

REVISTA
DE LA
ACADEMIA DE CIENCIAS
EXACTAS, FISICO-QUIMICAS Y NATURALES
DE
ZARAGOZA

SERIE 2.^a

TOMO XXX

Núm. 1-2



1975

INDICE DE MATERIAS

ELADIO DOMÍNGUEZ. — <i>Grupos de pseudobordismo</i>	5
M. ALFARO GARCÍA. — <i>Pseudopolinomios en la teoría de polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad ...</i>	17
M. SOLER. — <i>Topologías engendradas en un espacio vectorial por familias de funciones homogéneas respecto de un subgrupo de R^*</i>	25
M. SAN MIGUEL. — <i>Dos observaciones sobre una desigualdad de Burkholder</i>	31
M. SAN MIGUEL. — <i>Sobre el principio de invariancia para procesos intercambiables</i>	35
RAFAEL CID y MANUEL CALVO. — <i>Sistemas canónicos en mecánica celeste</i>	43
MANUEL CALVO. — <i>Sobre el problema de resonancia ideal ...</i>	53
V. CAMARENA. — <i>Transformaciones canónicas en optimización de trayectorias</i>	61
M. A. REBOLLEDO y E. BERNABÉU. — <i>On obtaining analytical expressions for level-crossing spectroscopy</i>	73
S. MAR* y M. QUINTANILLA. — <i>Formulación y estudio de un método optimización para problemas de diseño de combinaciones ópticas</i>	83
F. GÓMEZ BELTRÁN, L. A. ORO, M. P. PUEBLA y R. DE VAL. — <i>Estudio de algunos «oxinatos» complejos de iones de los metales de transición. III, Espectroscopia infrarroja de algunos 8-hidroxiquinoleinatos de Ni(II) y Co(II)</i>	99
J. BELTRÁN y A. TRINIDAD. — <i>Determinación de las constantes de disociación del pirogalol y de la constante de estabilidad del pirogalatocobalto(II)</i>	107
J. BELTRÁN y A. TRINIDAD. — <i>Complejos de Co(II) y pirogalol</i>	113
A. MARTÍN e I. GRACIA. — <i>Renio en minerales de molibdeno de España</i>	119

GRUPOS DE SEUDOBORDISMO

P O R

ELADIO DOMÍNGUEZ

Departamento de Geometría y Topología
Universidad de Valencia (España)

Abstract

In this paper it is defined an ordinary geometric homology theory with coefficients in Z (Z_2) on the topological category. This theory is a singular bordism of oriented pseudomanifolds (any pseudomanifolds, resp.) It is shown that such theory satisfy the axioms of Eilemberg-Steenrod and therefore, on the compact polyhedral, it is the same as the singular homology. In a future paper it will be shown that this two theories are coincident on the topological Category.

Introducción

El objeto de este trabajo consiste en definir una teoría de bordismo, tomando como modelos geométricos las seudovarietades, y demostrar que constituye una teoría de homología ordinaria sobre la categoría de los pares de espacios topológicos. De este modo, por el teorema de unicidad de teorías de homología ordinaria sobre la categoría de pares poliedrales, dicha teoría nos produce una interpretación geométrica de la homología singular sobre los pares de poliedros.

Usaremos las técnicas de la topología combinatorial o pl-categoría ([2] y [3]). Los poliedros siempre serán euclídeos; es decir, el conjunto de puntos euclídeos que son reunión de los símlices de un complejo simplicial geométrico (localmente finito). Llamaremos triangulación de un poliedro P a un complejo simplicial K que lo recubra; lo representaremos por $|K| = P$. Las bolas y variedades siempre serán poliedrales. También supondremos que los poliedros se encuentran en un espacio euclídeo de dimensión lo suficientemente grande, para que todas las operaciones geométricas tengan su realización en dicho espacio. Un n -símplex (o un n -poliedro) será un símplex (poliedro, respectivamente) de dimensión n . Si A es un símplex, representaremos por $\overset{\circ}{A}$ su interior y por $\overset{\cdot}{A}$ su frontera.

I. — Algunas propiedades de las seudovarietades

1. Nota

Consideramos las seudovarietades en un sentido más amplio que el clásico; es decir:

Una n -seudovariiedad cerrada es un poliedro compacto P que admite una triangulación K , cumpliendo las siguientes condiciones:

- 1) K es n -principal. Es decir, todo simplex de K es cara de un n -simplex.
- 2) Todo $(n-1)$ -simplex de K es cara de dos n -simplices exactamente.

Una n -seudovariiedad con borde es un poliedro compacto P que admite una triangulación K , cumpliendo:

- a) K es n -principal.
- b) Todo $(n-1)$ -simplex de K es cara de dos n -simplices como máximo.
- c) El conjunto de los $(n-1)$ -simplices que son cara de un solo n -simplex, constituyen una $(n-1)$ -seudovariiedad cerrada. Dicho complejo lo denotaremos por ∂K y a $\partial P = |\partial K|$ lo llamaremos el borde de P .

2. Teorema

Un n -poliedro compacto P es una n -seudovariiedad cerrada si y sólo si existe un $(n-2)$ -subpoliedro SP cumpliendo las siguientes condiciones:

- 1) $Cl(P-SP) = P$, donde $Cl()$ representa la clausura topológica.
- 2) $P-SP$ es una n -variedad sin borde.

Demostración

I) Supongamos que P admite una triangulación K cumpliendo las condiciones 1 y 2 de la nota anterior. Sea L el $(n-2)$ -esqueleto simplicial de K . Dado $x \in |L|$, sea A^i el único i -simplex de K tal que $x \in \overset{\circ}{A}^i$. Dicho simplex tiene que tener la dimensión menor o igual que $n-2$; por lo tanto existe un n -simplex A^n de K , del que es una cara propia. De donde se deduce que todo entorno de x en $|K|$ tiene que cortar a $\overset{\circ}{A}^n \subset |K| - |L|$.

Sea $x \in |K| - |L|$, entonces $x \in \overset{\circ}{A}^i$ con $i = n$ ó $i = n-1$. Si $i = n$, $\overset{\circ}{A}^n$ es un entorno abierto de x en $|K| - |L|$ que es una n -bola abierta. Si $i = n-1$, existen exactamente dos n -simplices A_1^n y A_2^n de los que A^{n-1} es una cara; entonces $\overset{\circ}{A}^n \cup \overset{\circ}{A}_1^n \cup \overset{\circ}{A}_2^n$ es una n -bola abierta que es entorno de x en $|K| - |L|$. Así pues, $|K| - |L|$ es una n -variedad sin borde.

II) Recíprocamente, sean L y K triangulaciones de SP y P respectivamente de forma que L sea un subcomplejo de K . Puesto que SP es un $(n-2)$ -subpoliedro, L es un complejo de dimensión $(n-2)$. Sea A^i un simplex principal de K , entonces $\overset{\circ}{A}^i$ es un abierto en $|K|$. Por lo tanto $\overset{\circ}{A}^i \subset |K| - |L|$, pues $Cl(|K| - |L|) = |K|$. De donde se deduce que $i = n$.

Dado $A^{n-1} \in K$, sea $\{A_1^n, \dots, A_r^n\}$ el conjunto de n -simplices de K que contienen a A^{n-1} como cara. Sea $x \in \overset{\circ}{A}^{n-1}$, entonces la estrella simplicial abierta

$$st(x, |K|) = \overset{\circ}{A}^{n-1} \cup \overset{\circ}{A}_1^n \cup \dots \cup \overset{\circ}{A}_r^n$$

es un entorno abierto de x en $|K| - |L|$. Por lo tanto tiene que ser una n -bola abierta; de donde se deduce que $r = 2$.

3. Teorema

Un n -poliedro compacto P es una n -seudovariiedad con borde Q si y sólo si existe un $(n-2)$ -subpoliedro SP cumpliendo:

- 1) $P = Cl(P-SP)$.
- 2) $P-SP$ es una n -variedad con borde $Q-SP$.
- 3) $(Q, Q \cap SP)$ es una $(n-1)$ -seudovariiedad cerrada.

Demostración

I) Supongamos que P admite una triangulación K cumpliendo las condiciones a , b y c de la nota 1. Sea L el $(n-2)$ -esqueleto simplicial de K y M el subcomplejo de K formado por todos los $(n-1)$ -símplices de K que son cara de un n -símplice exactamente. Entonces, tomando $Q = |M|$ y $SP = |L|$, la demostración se realiza de forma análoga a la del teorema anterior.

II) Recíprocamente se consideran triangulaciones K , M y L de P , Q y SP respectivamente de forma que L y M sean subcomplejos de K . Igualmente, en este caso, la demostración se realiza fácilmente como en el teorema anterior.

4. Corolario

Sea P una n -seudovariiedad cerrada (o con borde), entonces cualquier triangulación de P cumple las condiciones 1 y 2 (a , b y c respectivamente) de la nota 1.

Observemos que la definición de seudovariiedad cerrada es un caso particular de la seudovariiedad con borde. Por ello, y cuando no exista posibilidad de confusión, consideraremos una seudovariiedad con borde posiblemente vacío.

5. Nota

Un símplice orientado lo denotaremos por $A = \langle v_0, \dots, v_n \rangle$ y por $-A$ representaremos a dicho símplice con la orientación opuesta. La orientación inducida sobre cada cara de A la representaremos por

$$A^{(i)} = (-1)^i \langle v_0, \dots, \overset{\wedge}{v_i}, \dots, v_n \rangle$$

Recordemos que (ver [1]) una orientación sobre R^n queda biunívocamente determinada por una orientación sobre un n -símplice cualquiera de R^n . Además las orientaciones sobre dos n -símplices, que se cortan en una $(n-1)$ -cara, están determinadas por una orientación sobre R^n si y sólo si las orientaciones que inducen sobre su cara común son opuestas.

Consideramos el concepto de orientación sobre las seudovariiedades en el sentido ordinario; es decir: *Una n -seudovariiedad con borde es orientable* si existe una triangulación y una orientación sobre cada n -símplice de forma que, cuando dos de ellos se cortan en un $(n-1)$ -símplice, las orientaciones que inducen sobre él son opuestas. A un conjunto de tales orientaciones lo llamaremos una *orientación compatible*. Una *n -seudovariiedad con borde orientada* será el par formado por una n -seudovariiedad con borde orientable y una orientación compatible sobre ella. De lo expuesto en el párrafo anterior se deduce que la definición de orientabilidad es independiente de la triangulación. Igualmente, como con la definición ordinaria (ver [1], § 3), se obtienen el siguiente resultado: Si K es una triangulación de una n -seudovariiedad con borde no vacío, sobre los $(n-1)$ -símplices de ∂K consideramos la orientación inducida por la del único n -símplice que los contiene como cara. Entonces, dichas orientaciones, definen una orientación compatible sobre ∂K .

Si P es una n -seudovariiedad orientada con borde, por $-P$ representaremos la seudovariiedad con la orientación opuesta. Es decir, sobre los n -símplices de una triangulación K de P consideramos las orientaciones opuestas a las dadas.

6. Proposición

Sean P_1 y P_2 n -seudovariiedades orientadas con borde $Q_1 \cup T_1$ y $Q_2 \cup T_2$ respectivamente, de forma que:

- 1) Q_i y T_i son $(n-1)$ -seudovariedades con borde tales que $\partial Q_i = \partial T_i$.
- 2) T_1 y T_2 son *pl*-isomorfas.
- 3) La orientación que induce P_1 sobre T_1 transformada por el *pl*-isomorfismo anterior, es opuesta a la que induce P_2 sobre T_2 .

Entonces el pegamiento de P_1 y P_2 mediante el *pl*-isomorfismo indicado, es una n -seudovariedad con borde $Q_1 \cup Q_2$ que admite una orientación canónica inducida por las dadas.

Demostración

Según el teorema 2-15 de [2], podemos considerar triangulaciones K_i , L_i y M_i de P_i , Q_i y T_i respectivamente de forma que: a) L_i y M_i son subcomplejos de K_i , b) M_1 y M_2 son isomorfas simplicialmente. Entonces la demostración es fácil.

7. Proposición

Sea A un n -simplex orientado. Entonces $A \times I$ es una $(n+1)$ -seudovariedad orientable con borde

$$\dot{A} \times I \cup A \times 0 \cup A \times 1$$

con una orientación canónica de forma que las orientaciones inducidas sobre $A \times 0$ y $A \times 1$ son respectivamente A y $-A$.

Demostración

$A \times I$ es una $(n+1)$ -variedad, de donde se deduce que es una $(n+1)$ -seudovariedad. Así pues, sólo hay que demostrar la existencia de una orientación cumpliendo las condiciones. Para ello, encontraremos una triangulación conveniente de $A \times I$. Según [3], la célula $A \times I$ admite una triangulación sin introducir nuevos vértices. Vamos a especificar dicha triangulación. Sea

$$\begin{aligned} A &= A \times 0 = (x_0, \dots, x_n) \\ A \times 1 &= (x'_0, \dots, x'_n) \text{ con } x'_i = (x_i, 1) \end{aligned}$$

Consideremos

$$\begin{aligned} B_h &= (x_{n-h+1}, \dots, x_n) \times I \quad \text{para } h = 1, \dots, n+1 \\ A_h &= B_h \cup (x_{n-h}, \dots, x_n) \quad \text{para } h = 1, \dots, n \end{aligned}$$

entonces $A \times I = B_{n+1}$ y $B_{h+1} = x'_{n-h} A_h$ para $h = 1, \dots, n$. La subdivisión simplicial se realiza por inducción sobre los B_h . Entonces, según las definiciones, es fácil observar que los h -simplices de B_h son de la forma

$$(x'_{n-h+1}, \dots, x'_i, x_i, \dots, x_n) \quad \text{para } i = n-h+1, \dots, n$$

Así pues, en la triangulación inducida sobre $A \times I$, los $(n+1)$ -simplices son de la forma

$$(x'_0, \dots, x'_i, x_i, \dots, x_n) \quad \text{para } i = 0, \dots, n$$

y los n -simplices

$$\begin{aligned} (A) \equiv (x'_0, \dots, \hat{x}'_j, \dots, x'_i, x_i, \dots, x_n) & \quad j = 0, \dots, n-1; \quad i = 1, \dots, n \\ (x'_0, \dots, x'_i, x_i, \dots, \hat{x}'_j, \dots, x_n) & \quad j = i+1, \dots, n \\ & \quad i = 0, \dots, n-1 \end{aligned}$$

$$(B) \equiv \begin{matrix} (x'_0, \dots, x'_i, x_{i+1}, \dots, x_n) & i = 0, \dots, n-1 \\ (x'_0, \dots, x'_{i-1}, x_i, \dots, x_n) & i = 1, \dots, n \end{matrix}$$

Los de la forma (A) constituyen la subdivisión simplicial de $\dot{A} \times I \cup A \times 0 \cup A \times 1$. Sobre $A \times 0$ consideramos la orientación inducida por la de A ; es decir

$$A \times 0 = \langle x_0, \dots, x_n \rangle$$

y sobre cada $(n+1)$ -símple, la orientación

$$(-1)^i \langle x'_0, \dots, x'_i, x_i, \dots, x_n \rangle$$

Es fácil observar que definen una orientación compatible sobre la triangulación dada. Además, la orientación inducida sobre $A \times 1$ es

$$(-1)^{2n+1} \langle x'_0, \dots, x'_n \rangle = -A$$

De las proposiciones 6 y 7 se deduce

8. Corolario

Sea P una n -seudovariiedad orientada con borde Q , entonces $P \times I$ es una $(n+1)$ -seudovariiedad orientable con borde

$$Q \times I \cup P \times 0 \cup P \times 1$$

Además, admite una orientación canónica de forma que las inducidas sobre $P \times 0$ y $P \times 1$ coinciden respectivamente con las de P y $-P$.

9. Proposición

1) El cono desde un punto c sobre una n -seudovariiedad P orientada cerrada con $n > 0$, es una $(n+1)$ -seudovariiedad orientable con borde P .

2) El cono desde un punto c sobre una n -seudovariiedad orientada P con borde Q y $n > 1$, es una $(n+1)$ -seudovariiedad orientable con borde $P \cup cQ$.

Además, en ambos casos, cP admite una orientación canónica de forma que la que induce sobre P es la dada.

Demostración

En ambos casos, la demostración es fácil. Basta observar que si (K, L) es una triangulación de (P, Q) , entonces (cK, cL) es una triangulación de (cP, cQ) . Además si sobre los $(n+1)$ -símplexes cA de cK consideramos las orientaciones inducidas por A , obtenemos una orientación compatible sobre cK con las condiciones requeridas.

10. Nota

Dada una aplicación simplicial $f: K \rightarrow L$, sean K' y L' subdivisiones derivadas de forma que $f: K' \rightarrow L'$ siga siendo simplicial. Supongamos que K es una n -seudovariiedad con borde, entonces definimos

$$D(\alpha, f) = \{b(\sigma) \dots b(\tau); \alpha < f(\sigma), \sigma < \dots < \tau \in K\}$$

$$\dot{D}(\alpha, f) = \{b(\sigma) \dots b(\tau); \alpha < f(\sigma), \alpha \neq f(\sigma), \sigma < \dots < \tau \in K\}$$

$$D(\alpha, f | \partial K) = \{b(\sigma) \dots b(\tau); \alpha < f(\sigma), \sigma < \dots < \tau \in \partial K\}$$

siendo α un i -símple de L $\{b(\sigma), \dots, b(\tau)\}$ los puntos asociados a $\{\sigma, \dots, \tau\}$ para realizar la subdivisión K' y $b(\sigma) \dots b(\tau)$ el símple de K' que determinan.

11. Teorema

Sea $f: K \rightarrow L$ una aplicación simplicial y $|K|$ una n -seudovariedad con borde. Si α es un i -símplice de L , se cumple:

1) $|D(\alpha, f)|$ es una $(n-i)$ -seudovariedad con borde

$$\partial D(\alpha, f) = \dot{D}(\alpha, f) \cup D(\alpha, f|_{\partial K})$$

2) $|\dot{D}(\alpha, f)|$ es vacío o una $(n-i-1)$ -seudovariedad con borde. $|D(\alpha, f|_{\partial K}|$ es una $(n-i-1)$ -seudovariedad con borde si $\alpha \in f(\partial K)$ y vacío en el resto de los casos. Además

$$\partial \dot{D}(\alpha, f) = \dot{D}(\alpha, f|_{\partial K}) = \dot{D}(\alpha, f) \cap \partial K' = \partial D(\alpha, f|_{\partial K})$$

Demostración

1) Sea $A = b(\sigma) \dots b(\tau) \in D(\alpha, f)$, entonces $\alpha < f(\sigma)$ y $\sigma < \dots < \tau \in K$. Sea ω^i una mínima cara de σ tal que $f(\omega^i) = \alpha$ y

$$\omega^i < \omega^{i+1} < \dots < \sigma < \dots < \tau < \dots < \omega^n$$

un refinamiento de la cadena dada. Entonces

$$A^{n-1} = b(\omega^i) b(\omega^{i+1}) \dots b(\sigma) \dots b(\tau) \dots b(\omega^n)$$

pertenece a $D(\alpha, f)$ y contiene al símplice A como cara.

Dado $A^{n-1} \in D(\alpha, f)$, puede tomar una de las siguientes formas:

a) $b(\omega^{i+1}) \dots b(\omega^n)$ con $\alpha < f(\omega^{i+1})$, $\alpha \neq f(\omega^{i+1})$

b) $b(\omega^{i+1}) \dots b(\omega^n)$ con $\alpha = f(\omega^{i+1})$

c) $b(\omega^i) \dots \overset{\wedge}{b(\omega^j)} \dots b(\omega^n)$ con $j \neq n, i; f(\omega^i) = \alpha$

d) $b(\omega^i) \dots b(\omega^{n-1})$ con $f(\omega^i) = \alpha$, $\omega^{n-1} \notin \partial K$

e) $b(\omega^i) \dots b(\omega^{n-1})$ con $f(\omega^i) = \alpha$, $\omega^{n-1} \in \partial K$

Sean $A_k^{n-i} \in D(\alpha, f)$ el conjunto de símplices que contienen a A^{n-i-1} como cara. Si A^{n-i-1} es del tipo a)

$$A_k^{n-i} = b(\omega_k^i) b(\omega^{i+1}) \dots b(\omega^n) \text{ con } f(\omega_k^i) = \alpha$$

Pero si $k > 1$, se deduciría que $f(\omega^{i+1}) = \alpha$. Supongamos que A^{n-i-1} es del tipo b)

$$A_k^{n-i} = b(\omega_k^i) b(\omega^{i+1}) \dots b(\omega^n) \text{ con } f(\omega_k^i) = f(\omega^{i+1}) = \alpha$$

entonces existen exactamente dos caras ω_k^i de ω^{i+1} tales que $f(\omega_k^i) = \alpha$. Si es del tipo c)

$$A_k^{n-i} = b(\omega^i) \dots b(\omega_k^i) \dots b(\omega^n)$$

Pero $\omega^{j-1} \in \dot{\omega}^{j+i}$, por lo tanto $k = 2$ (pues $\dot{\omega}^{j-1}$ es una j -seudovariedad cerrada). En el caso d) existen dos A_k^{n-i} , pues K es una n -seudovariedad con borde y $\omega^{n-1} \notin \partial K$. Por análoga razón, en el caso e) existe un solo A_k^{n-i} . Observemos que la reunión de los $(n-i-1)$ -símplices de $D(\alpha, f)$ que pertenecen a un único $(n-i)$ -símplice es

$$\dot{D}(\alpha, f) \cup D(\alpha, f|_{\partial K})$$

Por último, veamos que dicho complejo es la triangulación de una $(n-i-1)$ -seudovariiedad cerrada. El razonamiento de la demostración es análogo al caso anterior, teniendo en cuenta la siguiente caracterización de sus $(n-i-2)$ -símplices

$$a') \quad b(\omega^{i+1}) \dots \widehat{b(\omega^j)} \dots b(\omega^n) \text{ con } \alpha < f(\omega^{i+1}), \quad \alpha \neq f(\omega^{i+1})$$

$$b') \quad b(\omega^i) \dots \widehat{b(\omega^j)} \dots b(\omega^{n-1}) \text{ con } f(\omega^j) = \alpha \quad \omega^{n-1} \in \partial K$$

2) Observemos que

$$\begin{aligned} \dot{D}(\alpha, f) \cap D(\alpha, f|_{\partial K}) &= \dot{D}(\alpha, f) \cap D(\alpha, f) \cap \partial K' = \\ &= \dot{D}(\alpha, f) \cap \partial K' = \dot{D}(\alpha, f|_{\partial K}) \end{aligned}$$

Por hipótesis de inducción sobre n podemos suponer que $|D(\alpha, f|_{\partial K})|$ es una $(n-i-1)$ -seudovariiedad con borde $|\dot{D}(\alpha, f|_{\partial K})|$. Entonces de la igualdad anterior, se deduce que $|\dot{D}(\alpha, f)|$ es el cierre del complementario de una $(n-i-1)$ -seudovariiedad $|D(\alpha, f|_{\partial K})|$ con borde, en una $(n-i-1)$ -seudovariiedad cerrada $|\partial D(\alpha, f)|$. Por lo tanto, se deduce inmediatamente que $|\dot{D}(\alpha, f)|$ es una $(n-i-1)$ -seudovariiedad con borde $\dot{D}(\alpha, f|_{\partial K})$.

12. Nota

Consideramos la definición de entorno regular dada en [2]. Es decir; sean $X \subset Y$ poliedros compactos y (K, L) triangulaciones de (Y, X) de forma que L sea un subcomplejo lleno de K . Sea K' una subdivisión derivada de K cerca de L , entonces el poliedro que determina el entorno simplicial $N(L, K')$ lo llamaremos entorno regular de X en Y .

13. Corolario

Sea X un subpoliedro de una n -seudovariiedad P orientada con borde. Entonces, todo entorno regular N de X en P es una n -seudovariiedad orientable con borde $\dot{N} \cup (N \cap \partial P)$, que admite una orientación canónica inducida por la de P .

Demostración

Sean (K, L) triangulaciones de (P, X) de forma que L sea un subcomplejo lleno de K . Sea $f_L: K \rightarrow I$, donde I es el complejo simplicial determinado por el intervalo unidad, la aplicación simplicial que transforma todo vértice de L en el 0 y los restantes en el 1. Dado $\rho \in (0, 1)$, escogemos una subdivisión derivada K' de K cerca de L tomando los nuevos vértices en $f_L^{-1}(\rho)$. Entonces $f_L: K' \rightarrow I'$, siendo I' la subdivisión de I que resulta al añadir el nuevo vértice ρ , sigue siendo simplicial.

De este modo resulta que

$$N(L, K') = \{A \in K'; A < B, B \cap X \neq \emptyset\} = D(0, f_L)$$

$$\dot{N}(L, K') = \{A \in N(L, K'); A \cap X \neq \emptyset\} = \dot{D}(0, f_L)$$

$$N(L, K') \cap \partial K' = D(0, f_L|_{\partial K})$$

Por lo tanto, del teorema anterior, se deduce que $|N(L, K')|$ es una n -seudovariiedad con borde

$$|\dot{N}(L, K')| \cup (N \cap \partial K')$$

Si sobre los n -símplices de N consideramos las orientaciones correspondientes a una orientación compatible sobre K' , es obvio que obtenemos una orientación compatible sobre N .

Además de la unicidad, salvo pl -isomorfismos, de los entornos regulares (teorema 3.8 de [2]), se deduce finalmente lo propuesto.

II. — Grupos de Seudobordismo orientado

En todo el apartado, y aunque no lo especifiquemos, las seudovariiedades estarán orientadas.

1. Definición

Dos n -seudovariiedades cerradas P_1 y P_2 son *seudobordantes* si existe una $(n+1)$ -seudovariiedad Q con borde la reunión disjunta de P_1 y $-P_2$ (lo denotaremos por $P_1 \sqcup -P_2$).

2. Nota

a) La relación de seudobordismo, anteriormente definida, es de equivalencia; pues la propiedad reflexiva se deduce del corolario I—8, la transitiva de la proposición I—6 y la simétrica es obvia.

b) El conjunto de las clases de n -seudovariiedades cerradas, bajo la relación de seudobordismo, lo denotaremos por $S\Omega_n$. Si sobre él definimos la operación

$$[P_1] + [P_2] = [P_1 \sqcup P_2]$$

obviamente constituye un grupo conmutativo. A $S\Omega_n$ lo llamaremos el n -grupo de seudobordismo orientado.

3. Proposición

- a) $S\Omega_n = 0$ para $n > 0$.
- b) $S\Omega_0 = \mathbb{Z}$.

Demostración

- a) Se deduce de la proposición A—9.
- b) Observemos que dos puntos con orientación positiva (o con orientación negativa) siempre son seudobordantes por el intervalo unidad.

4. Definición

Una n -seudovariiedad singular sobre un par de espacios topológicos (X, A) es un par (P, f) , siendo P una n -seudovariiedad con borde y $f: (P, \partial P) \rightarrow (X, A)$ una aplicación continua.

Dos n -seudovariedades singulares (P_1, f_1) y (P_2, f_2) sobre (X, A) son *seudobordantes singularmente* si existe un par (Q, F) tal que:

- 1) Q es una $(n + 1)$ -seudovariedad con borde $(P_1 \sqcup -P_2) \cup Q_0$.
- 2) $F: (Q, Q_0) \rightarrow (X, A)$ es una aplicación continua de forma que $F|_{P_i} = f_i$ para $i = 1, 2$.

5. Nota

- a) La relación de pseudobordismo singular es de equivalencia.
- b) El conjunto $S\Omega_n(X, A)$, de las clases de n -seudovariedades singulares sobre (X, A) , admite estructura de grupo conmutativo con la operación

$$[P_1, f_1] + [P_2, f_2] = [P_1 \sqcup P_2, f_1 \sqcup f_2]$$

Tengamos en cuenta que el elemento neutro será la clase de los pares (P, f) tales que existe (Q, F) , siendo Q una $(n + 1)$ -seudovariedad con borde $P \cup Q_0$ y F una aplicación continua entre los pares (Q, Q_0) y (X, A) de forma que $F|_P = f$. A $S\Omega_n(X, A)$ lo llamaremos el n -grupo de pseudobordismo singular orientado sobre (X, A) .

- c) Dada una aplicación continua $\Phi: (X, A) \rightarrow (Y, B)$ definimos un morfismo $\Phi_*: S\Omega_n(X, A) \rightarrow S\Omega_n(Y, B)$ por la fórmula

$$\Phi_*[P, f] = [\Phi P, \Phi f]$$

Por lo tanto se tiene fácilmente

6. Proposición

$S\Omega_*(,)$ define un functor covariante de la categoría de los pares de espacios topológicos en la de los grupos abelianos.

7. Teorema. De la dimensión

- a) $S\Omega_n(\text{pto}) = 0$ para $n > 0$.
- b) $S\Omega_0(\text{pto}) = \mathbb{Z}$.

Demostración

Se deduce de la proposición 3, teniendo en cuenta que $S\Omega_n(\text{pto}) = S\Omega_n$.

8. Definición. Morfismo de conexión

$$\partial: S\Omega_n(X, A) \rightarrow S\Omega_{n-1}(A)$$

es el morfismo definido por

$$\partial[P, f] = [\partial P, f|_{\partial P}]$$

donde sobre ∂P consideramos la orientación inducida.

9. Teorema. De exactitud

La sucesión

$$\dots \rightarrow S_{\Omega_n}(A) \xrightarrow{i_*} S_{\Omega_n}(X) \xrightarrow{j_*} S_{\Omega_n}(X, A) \xrightarrow{\partial} S_{\Omega_{n-1}}(A) \rightarrow \dots$$

donde $\{i: A \rightarrow X, j: X \rightarrow (X, A)\}$ son las inclusiones canónicas, es exacta.

Demostración

1) Exactitud en $S_{\Omega_n}(X)$. Sea $[P, f] \in S_{\Omega_n}(A)$, entonces $[P, jif] = 0$. Basta considerar el par $(P \times I, F)$, siendo

$$F: (P \times I, -P \times 1) \longrightarrow (X, A)$$

definida por $F(z, t) = jif(z)$.

Sea $[P, f] \in S_{\Omega_n}(X)$ tal que $[P, jf] = 0$. Entonces existe un par (Q, F) tal que $\partial Q = P \cup Q_0, F|_{Q_0} \subseteq A$ y $F|_P = f$. Puesto que ∂Q y P son n -seudovariedades cerradas, podemos considerar fácilmente que Q_0 es una n -seudovariedad cerrada tal que $\dim(P \cap Q_0) \leq n-2$. Finalmente, pegando convenientemente el cilindro $Q_0 \times I$, podemos considerar que $\partial Q = P \cup Q_0$. Por lo tanto, (Q, F) determina la igualdad

$$[P, f] = [-Q_0, F|_{Q_0}]$$

Pero el segundo miembro pertenece a la imagen de i_*

2) Exactitud en $S_{\Omega_n}(X, A)$. Si $[P, f] \in S_{\Omega_n}(X, A)$, P es una n -seudovariedad cerrada y por lo tanto $\partial[P, f] = 0$.

Sea $[P, f] \in S_{\Omega_n}(X, A)$ tal que $\partial[P, f] = [\partial P, f|_{\partial P}] = 0$. Entonces existe (Q, F) de forma que $\partial Q = \partial P$ y $F: Q \rightarrow A$ con $F|_{\partial Q} = f|_{\partial P}$: Por lo tanto, el pegamiento

$$(A) \equiv [P \xrightarrow{\quad} -Q, f \cup F]_{\partial P}$$

define una n -seudovariedad singular sobre X . De este modo, el pagmiento

$$[P \times I \xrightarrow{\quad} -Q \times I, f \times 1 \cup F \times 1]_{\partial P \times I}$$

demuestra que la imagen de (A) por j_* es $[P, f]$.

3) Exactitud en $S_{\Omega_n}(A)$. Si $[P, f] \in S_{\Omega_{n+1}}(X, A)$, obviamente $[\partial P, if|_{\partial P}] = 0$.

Sea $[P, f] \in S_{\Omega_n}(A)$ tal que $[P, if] = 0$. Entonces existe un (Q, F) tal que $\partial Q = P$ y $F: Q \rightarrow X$ con $F|_P = if$. Por lo tanto (Q, F) representa una $(n+1)$ -seudovariedad singular sobre (X, A) , cuya imagen por ∂ es $[P, f]$.

10. Teorema. De homotopía

Si $\Phi, \psi: (X, A) \rightarrow (Y, B)$ son aplicaciones homotópicas, entonces $\Phi_* = \psi_*$.

Demostración

Sea $H: (X, A) \times I \rightarrow (Y, B)$ una homotopía entre Φ y ψ . Dado $[P, f] \in S_{\Omega_n}(X, A)$, $(P \times I, H(f \times 1))$ define un pseudobordismo singular entre $[P, \Phi f]$ y $[P, \psi f]$.

11. Teorema. De escisión

Sea (X, A) un par topológico y U un abierto en X tal que su clausura \bar{U} esté contenida en el interior \hat{A} de A . Entonces la inclusión canónica

$$i: (X - U, A - U) \rightarrow (X, A)$$

induce un isomorfismo $S\Omega_n(X - U, A - U) \simeq S\Omega_n(X, A)$.

Demostración

Sea $[P, f] \in S\Omega_n(X, A)$, $A' = f^{-1}(X - \hat{A})$ y $U' = f^{-1}(\bar{U})$. Puesto que A' y U' son subconjuntos compactos de P , existirá una distancia positiva entre ellos y, por lo tanto, dada una triangulación K de P , podemos encontrar una subdivisión derivada $K^{(r)}$ de forma que el entorno simplicial M de A' en $K^{(r)}$ no corta a U' . Si N es el entorno regular triangulado por M , entonces $N \cap U' = \emptyset$. Así pues, por el corolario A-13, N es una n -seudovariedad con borde $\dot{N} \cup (N \cap \partial P)$ y $(N, f|_N)$ representa un elemento de $S\Omega_n(X - U, A - U)$. Entonces $(P \times I, F)$ con $F(z, t) = f(z)$ define un pseudobordismo entre $[P, f]$ y $[N, f|_N]$, sobre el espacio (X, A) . Es decir, i_* es un epimorfismo.

Supongamos que $[P, f] \in S\Omega_n(X - U, A - U)$ es tal que $[P, if] = 0$. Entonces existe (Q, F) de forma que $\partial Q = P \cup Q_0$, siendo $F: (Q, Q_0) \rightarrow (X, A)$ con $F|_P = if$. Tomando $U' = F^{-1}(\bar{U})$ y $A' = F^{-1}(X - \hat{A})$, se demuestra como en el caso anterior que existe un entorno regular N de A' tal que $N \cap U' = \emptyset$. Además N será una $(n + 1)$ -seudovariedad con borde

$$\dot{N} \cup (N \cap \partial Q) = P \cup (\dot{N} \cup (N \cap Q_0)) = P \cup Q_0'$$

De las condiciones dadas, se deduce fácilmente que $F(Q_0') \subset A - U$. Por lo tanto, $(N, F|_N)$ define un pseudobordismo de (P, f) al vacío sobre el espacio $(X - U, A - U)$. Así pues, i_* es inyectiva.

12. Corolario

$S\Omega_*(;)$ es una teoría de homología ordinaria con coeficiente en Z .

III. — Grupos de Seudobordismo no orientado

En este apartado consideraremos pseudovariedades cualesquiera, independientes de si son orientables o no.

1. Definición

Dos n -seudovariedades cerradas P_1 y P_2 son pseudobordes si existe una $(n + 1)$ -seudovariedad Q con borde $P_1 \sqcup P_2$.

2. Nota

a) Como en el apartado anterior, resulta que la relación anterior es de equivalencia. Sobre el conjunto $S\eta_n$ de las clases de n -seudovariedades cerradas, bajo dicha relación definimos la operación

$$[P_1] + [P_2] = [P_1 \sqcup P_2]$$

Entonces S_{η_n} es un grupo conmutativo, llamado el *n-grupo de pseudobordismo no orientado*. Obviamente cumple que $S_{\eta_n} = 0$ para $n > 0$, $S_{\eta_0} = \mathbb{Z}_2$.

b) De forma análoga se definen las nociones de pseudovariiedad y pseudobordismo singular en el caso no orientado obteniéndose un grupo conmutativo $S_{\eta_n}(X, A)$, llamado el *n-grupo de pseudobordismo singular no orientado sobre (X, A)*. También es un functor covariante de la categoría de los pares de espacios topológicos en la de los grupos abelianos. Y si en las demostraciones del apartado anterior prescindimos de las orientaciones obtenemos el siguiente resultado:

3. Teorema

$S_{\eta_*}(\ ; \)$ es una teoría de homología ordinaria con coeficientes en \mathbb{Z}_2 .

BIBLIOGRAFIA

1. P. S. ALEKSANDROV: *Combinatorial Topology*. Graylock Press, 1960.
2. C. P. ROURKE and B. J. SANDERSON: *Introduction to piecewise linear topology*. Springer, 1972.
3. E. C. ZEEMAN: *Seminar on Combinatorial Topology*. I. H. E. S. París, 1963.

PSEUDOPOLINOMIOS EN LA TEORIA DE POLINOMIOS ORTOGONALES SOBRE LA CIRCUNFERENCIA UNIDAD

P O R

M. ALFARO GARCÍA

Departamento de Teoría de Funciones, Universidad de Zaragoza (España)

Abstract

This article contains some remarks related to some of the open problems presented in [2].

In Remark 1, we extend the inner product defined by means of an infinite Toeplitz hermitian positive definite matrix, to the so-called pseudopolynomials.

In 2., we enlarge the $*n$ -operators family, $n \in N$, ([4] and [2]) to the one of the $*n$ -operators, $n \in Z$, generalizing their properties.

Finally in 3., we obtain the series expansion of a pseudopolynomial.

Pseudopolinomios en la teoría de polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad

Ya es conocido (véase [5]) que una matriz infinita hermitiana definida positiva de Toeplitz

$$m = \begin{bmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \dots \\ c_{-1} & c_0 & c_1 & \dots \\ c_{-2} & c_{-1} & c_0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (c_{-i} = \overline{c_i})$$

define un producto escalar \circ en el espacio vectorial \square de los polinomios sobre C , respecto del cual la sucesión de polinomios $\{P_n(z)\}$, cuyo término n -ésimo viene dado por

$$P_n(z) = \begin{bmatrix} c_0 & c_1 & \dots & c_n \\ c_{-1} & c_0 & \dots & c_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{-n+1} & c_{-n+2} & \dots & c_1 \\ 1 & z & \dots & z^n \end{bmatrix},$$

es una sucesión de polinomios ortogonales relativos a la circunferencia unidad.

En este artículo exponemos unas notas con las que pretendemos iniciar el estudio de algunas de las cuestiones que quedaban abiertas en [2]; nos proponemos precisamente:

- i) Extender a los habitualmente llamados pseudopolinomios, el producto escalar definido por m en \square .
- ii) Ampliar la familia de los operadores $*n$ ($n \in N$) (véanse [4] y [2]), a la de los operadores $*n$ ($n \in Z$), generalizando las propiedades de los primeros, estudiadas en [2].
- iii) Como aplicación de i) y ii), obtener el desarrollo de un pseudopolinomio en alguno de los sistemas ortonormales ya conocidos y, posteriormente, su desarrollo en serie.

NOTA 1. Extensión del producto escalar a pseudopolinomios

Recordemos que suele llamarse pseudopolinomio a toda expresión del tipo $\sum_{-m}^n a_i z^i$, con $a_i \in \mathbb{C}$, siendo por lo general $n, m \in N$. (La restricción de la teoría clásica de considerar únicamente pseudopolinomios simétricos es decir, con $n = m$ (véase p. ej. [1]), es innecesaria como se comprueba a lo largo del artículo).

Conviene hacer notar que si en $\sum_{-m}^n a_i z^i$ admitimos que m, n sean enteros ($n \geq -m$), los polinomios en z o en z^{-1} pueden considerarse casos particulares de pseudopolinomios, en los que $-m \geq 0$ ó $n \leq 0$, respectivamente. Teniendo presente esto, enunciaremos la

Definición. — «Dado un pseudopolinomio $S(z) = \sum_{-m}^n a_i z^i$, diremos que es de orden (m, n) si $a_n a_{-m} \neq 0$ y $n, m \in N$; que es de orden $(0, n)$ si $a_n \neq 0$ y $-m \geq 0$ y que es de orden $(m, 0)$ si $a_{-m} \neq 0$ y $n \leq 0$ ».

De acuerdo con esta definición el grado de un polinomio y su orden como pseudopolinomio coinciden.

Es evidente que

a) El conjunto \mathcal{P} de los pseudopolinomios sobre C es un álgebra conmutativa con elemento unidad.

b) Si designamos con \mathcal{P}_m^n el conjunto de todos los pseudopolinomios cuyo orden (m', n') sea tal que $m \geq m'$ y $n \geq n'$, \mathcal{P}_m^n es un subespacio vectorial de \mathcal{P} .

(Con esta notación \mathcal{P}_0^n es el subespacio vectorial de \square formado por los polinomios en C de grado menor o igual que n , que habitualmente designamos con \square_n).

En nuestra memoria [2] demostrábamos que el producto escalar \circ queda caracterizado por la propiedad

$$z^p \circ z^q = z^p \circ z^q = z^p \circ Q(z) = P(z) \circ Q(z)$$

válida $\forall p \in N$ y $\forall P, Q \in \square$.

Generalizando a exponentes enteros, surge de manera natural, la forma de extender \circ a \mathcal{P} . Así pues, definimos

$$z^p \circ z^q = z^{p-q} \circ 1 = c_{p-q} \quad \forall p, q \in Z$$

En general,

$$\frac{P(z)}{z^r} \circ \frac{Q(z)}{z^s} = z^{s-r} P(z) \circ Q(z) \tag{1}$$

siendo r, s naturales y P, Q polinomios cualesquiera.

La posibilidad de escribir un pseudopolinomio $\sum_{p=-m}^n a_p z^p$ en la forma

$$\frac{1}{z^m} \sum_{p=0}^{m+n} a_{p-m} z^p = \frac{Q_{m+n}(z)}{z^m}$$

nos permite aplicar la extensión deseada.

Sean $S'(z)$ y $S''(z)$ los pseudopolinomios

$$S'(z) = \sum_{p=-m}^n a_p z^p = \frac{T'(z)}{z^m}$$

$$S''(z) = \sum_{q=-m'}^{n'} b_q z^q = \frac{T''(z)}{z^{m'}}$$

entonces,

$$S'(z) \circ S''(z) = \frac{T'(z)}{z^m} \circ \frac{T''(z)}{z^{m'}} = T'(z) \circ z^{m-m'} T''(z) \quad \text{si } m \geq m'$$

(si fuera $m < m'$, evidentemente, $S'(z) \circ S''(z) = z^{m-m'} T'(z) \circ T''(z)$).

Se podía también haber introducido directamente el producto escalar anterior en \mathcal{Y} , dando una matriz de Toeplitz doblemente indefinida y con el convenio

$$z^p \circ z^q = c_{p-q} \quad \forall p, q \in \mathbb{Z}$$

NOTA 2. Operadores $*n$.

En [2] introducíamos el llamado operador $*n$ de \square_n sobre \square_n tal que $P(z)^{*n} = z^n \bar{P}\left(\frac{1}{z}\right)$ (véase también [4]), teniendo así una familia numerable de operadores, de la que se estudiaban sus propiedades. Se hacía notar que cada operador $*n$ no se podía aplicar a ningún polinomio de grado superior a n .

El operador $*n$ ($n \in \mathbb{N}$) se aplica igualmente a pseudopolinomios con su propia definición:

$$S^{*p}(z) = \left(\sum_{i=-m}^n a_i z^i \right)^{*p} = \left(\frac{1}{z^m} \sum_{i=0}^{m+n} a_{i-m} z^i \right)^{*p} = z^p z^m \sum_{i=0}^{m+n} a_{i-m} \frac{1}{z^i} = \sum_{i=0}^{m+n} a_{i-m} z^{m+p-i}$$

En el caso en que sea $p \geq n$, $S(z)^{*p}$ es un polinomio, pero si $p < n$ $S(z)^{*p}$ es un pseudopolinomio, precisamente $\sum_{j=0}^{m+n} a_{n-j} z^{p-n+j}$.

Con esto a partir de ahora, desaparece la restricción impuesta en [2] de no aplicar el operador $*n$ a un polinomio de grado mayor que n .

También se puede extender el operador $*n$ para $n \in \mathbb{Z}$ con la definición usual. Así, si $-p$ es un entero negativo,

$$S(z)^{*(-p)} = \frac{1}{z^p} \bar{S}\left(\frac{1}{z}\right).$$

Consideraremos ahora las propiedades más importantes del operador $*p$ ($p \in \mathbb{Z}$) aplicado a pseudopolinomios.

i) El operador $*p$ es una biyección de \mathcal{Y} sobre \mathcal{Y} . Por consiguiente

$$S(z) \equiv T(z) \Rightarrow S(z)^{*p} \equiv T(z)^{*p} \quad \forall p \in \mathbb{Z}, \text{ siendo } S(z), T(z) \in \mathcal{Y}$$

Según los valores de p y el orden del pseudopolinomio sobre el que opere $*p$, podemos poner de forma más precisa:

$$\begin{aligned} \text{Si } p \geq n & \quad *p: \mathcal{S}_m^n \longrightarrow \prod_{m+p} \\ \text{Si } p < n & \quad *p: \mathcal{S}_m^n \longrightarrow \mathcal{S}_{n-p}^{m+p} \\ \text{Si } p \geq m & \quad *(-p): \mathcal{S}_m^n \longrightarrow \mathcal{S}_{n+p}^0 \\ \text{Si } p < m & \quad *(-p): \mathcal{S}_m^n \longrightarrow \mathcal{S}_{n+p}^{m-p} \end{aligned}$$

donde se ha supuesto $p, m, n \in \mathbf{N}$.

En los casos segundo y cuarto, el operador es una biyección entre los respectivos espacios, así como en el primero si $p = n$ y en el tercero si $p = m$. Si $p > n$ en el primero caso y $p < m$ en el tercero, el operador no es suprayectivo.

ii) Sea $S(z) \in \mathcal{S}_m^n$ y $p \in \mathbf{N}$. Si $p > n$, $S(z)^{*p}$ tiene en el origen un cero de orden $p-n$; si $p = n$, el origen es un punto ordinario y si $p < n$, el origen es un polo de orden $n-p$. Además, $S(z)^{*(-p)}$ tiene en el origen un polo de orden $p+n$.

iii) El operador $*n$ es involutivo y semilineal, como se prueba fácilmente.

iv) *Propiedad del producto ordinario.*

Si $S(z), T(z) \in \mathcal{S}$ y $p, q, r \in \mathbf{Z}$ se comprueba que

$$z^{q+r} [S(z) \cdot T(z)]^{*p} = z^p S(z)^{*q} T(z)^{*r} \quad (2)$$

v) *Relación entre operadores $*p$ y $*q$.*

Como corolario de la propiedad anterior se obtiene, haciendo simplemente $T(z) = 1$ en (2), la relación

$$z^q S(z)^{*p} = z^p S(z)^{*q} \quad \text{con } p, q \in \mathbf{Z}$$

vi) El endomorfismo de conjugación es conmutable con el operador $*p$. Esta propiedad se comprueba aplicando el operador $*p$ a $S(\bar{z})$ de la misma forma que a $S(z)$.

vii) *Propiedad del producto escalar.*

Dados dos pseudopolinomios $S(z), T(z)$ y dos números enteros p, q , se verifica

$$S(z)^{*p} \circ T(z)^{*q} = z^{p-q} T(z) \circ S(z)$$

Corolario 1. — «Se cumple

$$S(z)^{*p} \circ T(z)^{*p} = T(z) \circ S(z) \quad (3)$$

$\forall p \in \mathbf{Z}$ y para todo par de pseudopolinomios.»

Corolario 2. — «Se verifica:

$$S(z)^{*p} \circ T(z) = T(z)^{*p} \circ S(z) \quad \forall p \in \mathbf{Z}$$

y para todo par de pseudopolinomios.»

viii) *Propiedad de isometría*

Si en (3) ponemos $S(z) = T(z)$ queda

$$S(z)^{*p} \circ S(z)^{*p} = S(z) \circ S(z)$$

es decir

$$\| S(z)^{*p} \| = \| S(z) \|$$

luego $*p$ es un operador isométrico.

ix) También se sigue de (3) que si dos pseudopolinomios son ortogonales, asimismo lo son sus respectivos transformados por el operador $*p$, es decir

$$S(z) \circ T(z) = 0 \implies S(z)^{*p} \circ T(z)^{*p} = 0.$$

x) Según ix) y por su carácter biyectivo y semilineal, $*p$ transforma bases ortogonales de \mathcal{S} en bases ortogonales de \mathcal{S} . En general, las bases ortogonales de \mathcal{S}_m^n no se convierten en bases del subespacio imagen; sin embargo algunas veces sí ocurre, así por ejemplo, en [2] se citaba el caso de la llamada base $B_n^{(0)}$ en \square_n : $\{P_0(z), P_1(z), \dots, P_n(z)\}$ y su $*n$ -transformada, $B_n^{(n)} \equiv \{z^n P_0^*(z), z^{n-1} P_1^*(z), \dots, z P_{n-1}^*(z), P_n^*(z)\}$ que también es base de \square_n ; donde $P_i(z)$ y $P_i^*(z)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) son los normalizados respectivos de $P_i(z)$ y $P_i^*(z)$.

xi) Se demuestra para pseudopolinomios $S(z), T(z)$ y $U(z)$ y $\forall p \in \mathbb{Z}$ que

$$S(z) \circ T(z) \circ U(z) = z^p T(z) \circ S(z)^{*p} U(z)$$

Casos particulares interesantes son:

$$\begin{aligned} S(z) \circ 1 &= z^p \circ S(z)^{*p} \\ S(z) \circ T(z) &= z^p \circ S(z)^{*p} \cdot T(z) \\ S(z) \circ S(z) &= z^p \circ S(z)^{*p} \cdot S(z) \\ S(z)^{*p} T(z) \circ U(z) &= z^p T(z) \circ S(z) U(z) \\ S(z) S(z) \circ z^p &= z^p S(z) \circ S(z)^{*p} z^p = S(z) \circ S(z)^{*p} = \\ &= z^p \circ S(z)^{*p} S(z)^{*p}. \end{aligned}$$

Como era de esperar, las propiedades del operador $*p$ ($p \in \mathbb{Z}$) actuando sobre pseudopolinomios mantienen, generalmente, un gran paralelismo con las del operador $*n$, ($n \in \mathbb{N}$), actuando sobre polinomios.

NOTA 3. Desarrollo en serie de un pseudopolinomio

Consideraremos primeramente el desarrollo de un pseudopolinomio según uno de los sistemas ortogonales (bases ortogonales de \square_n) introducidos en [2] (capítulo IV, apartado II), para obtener después su desarrollo en serie.

Sea $S(z) = \sum_{-m}^r a_i z^i$ un pseudopolinomio de orden (m, r) ; evidentemente, se puede descomponer en la forma:

$$S(z) = \sum_0^r a_i z^i + \frac{R(z)}{z^m} = Q(z) + \frac{R(z)}{z^m} \quad (4)$$

donde $Q(z) \in \square_r$ y $R(z) \in \square_{m-1}$, precisamente $R(z) = a_{-m} + a_{-m+1}z + \dots + a_{-1}z^{m-1}$.

Habiendo sido ya estudiado el desarrollo de un polinomio en [3], bastará considerar el de $\frac{R(z)}{z^m}$.

Como $R(z)$ es un polinomio de grado menor que m , podemos descomponerlo según la base de \square_n llamada $B_n^{(m)}$:

$$\{z^m P_0(z), z^m P_1(z), \dots, z^m P_{n-m}(z), z^{m-1} P_{n-m+1}^*(z), \dots, P_n^*(z)\}$$

($n \in \mathbb{N}$ arbitrario con la condición $n \geq m$), y resulta

$$R(z) = \sum_{j=0}^{n-m} b_j z^m P_j(z) + b_{n-m+1} z^{m-1} P_{n-m+1}^*(z) + \dots + b_m P_n^*(z) \quad (5)$$

siendo

$$b_{jn} = R(z) \circ z^m P_j(z) = \frac{R(z)}{z^m} \circ P_j(z) \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, n-m$$

$$b_{hn} = R(z) \circ z^{n-h} P_h^*(z) \quad \text{para } h = n-m+1, \dots, n.$$

Se observa que los coeficientes b_{jn} ($j = 0, \dots, n-m$) son independientes de n por lo que, en lo sucesivo, los designaremos a_j .

Podemos entonces escribir (5) en la forma

$$\frac{R(z)}{z^m} = \sum_{j=0}^{n-m} a_j P_j(z) + b_{n-m+1,n} \frac{P_{n-m+1}^*(z)}{z} + \dots + b_{nn} \frac{P_n^*(z)}{z^m} \quad (6)$$

expresión que constituye el desarrollo de $\frac{R(z)}{z^m}$ según el sistema ortonormal

$$\left\{ P_0(z), \dots, P_{n-m}(z), \frac{P_{n-m+1}^*(z)}{z}, \dots, \frac{P_n^*(z)}{z^m} \right\}.$$

Esta fórmula y el hecho de que los coeficientes a_j sean independientes de n , nos permiten afirmar que $R(z)/z^m$ posee un desarrollo en serie respecto del sistema ortonormal $\{P_n(z)\}_0^\infty$;

$$\frac{R(z)}{z^m} \sim \sum_0^\infty a_n P_n(z)$$

donde los coeficientes a_n vienen dados por

$$a_n = \frac{R(z)}{z^m} \circ P_n(z) = R(z) \circ z^m P_n(z) \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Por otra parte, si en (6) tomamos normas, por (1) y la ortonormalidad del sistema empleado tenemos

$$\left\| \frac{R(z)}{z^m} \right\|^2 = \|R(z)\|^2 = \sum_{j=0}^{n-m} |a_j|^2 + |b_{n-m+1,n}|^2 + \dots + |b_{nn}|^2; \quad (7)$$

por tanto

$$\left\| \frac{R(z)}{z^m} \right\|^2 < \sum_{j=0}^{n-m} |a_j|^2$$

pues $|b_{n-m+1,n}|^2, \dots, |b_{nn}|^2$ no pueden anularse simultáneamente ya que entonces $\frac{R(z)}{z^m}$ sería un polinomio en contra de lo supuesto.

Si pasamos al límite en n , en (7), se tiene

$$\left\| \frac{R(z)}{z^m} \right\|^2 = \|R(z)\|^2 = \sum_{j=0}^\infty |a_j|^2 + \lim_n [|b_{n-m+1,n}|^2 + \dots + |b_{nn}|^2]$$

donde el límite del segundo miembro existe, evidentemente.

Así pues

$$\left\| \frac{R(z)}{z^m} \right\|^2 \leq \sum_{j=0}^\infty |a_j|^2 \quad (\text{desigualdad de Bessel})$$

verificándose la igualdad de Parseval

$$\left\| \frac{R(z)}{z^m} \right\|^2 = \sum_{j=0}^n |a_j|^2$$

sí y sólo si

$$\lim_n [|b_{n-m+1,n}|^2 + \dots + |b_m|^2] = 0$$

o, lo que es equivalente, sí y sólo si

$$\lim_n |b_{jn}|^2 = 0 \quad \text{para } j = n - m + 1, \dots, n$$

Si, dado un polinomio $P(z) = \sum_{i=0}^n d_i z^i$, llamamos

$$P(z)|_m = \sum_{j=0}^m d_j z^j; \quad P(z)|^m = \sum_{m+1}^n d_j z^j \quad (0 \leq m \leq n)$$

y utilizamos esta notación en (5), como $\text{grad } R(z) = h \leq m - 1$, será

$$R(z) = [b_{n-m+1,n} z^{m-1} \mathbf{P}_{n-m+1}^*(z) + \dots + b_m \mathbf{P}_n^*(z)]_h \quad (8)$$

$$0 = \sum_0^{n-m} b_{jn} z^m \mathbf{P}_j(z) + [b_{n-m+1,n} z^{m-1} \mathbf{P}_{n-m+1}^*(z) + \dots + b_m \mathbf{P}_n^*(z)]^h \quad (9)$$

Así pues podemos enunciar:

Proposición 1. — «Dado un polinomio $R(z)$ de grado h y dos números naturales m, n tales que $h < m \leq n$, se tiene:

i) El segmento hasta el término $n - m$ del desarrollo en serie del pseudopolinomio $\frac{R(z)}{z^m}$ respecto del sistema $\{\mathbf{P}_n(z)\}$ viene dado por

$$\sum_{j=0}^{n-m} a_j \mathbf{P}_j(z) = - \frac{1}{z^m} \left[\sum_{j=n-m+1}^n b_{jn} z^{n-j} \mathbf{P}_j^*(z) \right]^{m-1}$$

ii)

$$R(z) = \sum_{j=n-m+1}^n b_{jn} z^{n-j} \mathbf{P}_j^*(z) |_h$$

siendo $\{b_{jn}\}_0^n$, los coeficientes del desarrollo de $R(z)$ en la base $\mathbf{B}_n^{(m)}$.

Además, por identificación de los coeficientes de z^j , para $j = 0, 1, \dots, n$, en (8) y (9), se obtiene un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas $\{b_{jn}\}_0^n$, de determinante evidentemente no nulo, del cual no vamos a ocuparnos sino para concluir la

Proposición 2. — «Los coeficientes del desarrollo en serie respecto del sistema ortogonal $\{\mathbf{P}_n\}$ de un pseudopolinomio pueden obtenerse mediante operaciones lineales».

Como se ha podido apreciar la descomposición (4) nos ha permitido reducir el estudio del desarrollo de un pseudopolinomio cualquiera, al caso particular de un pseudopolinomio de orden $(m, 0)$.

Análogamente, en la primera nota podíamos habernos limitado a considerar pseudopolinomios de orden $(m, 0)$, extendiendo los resultados obtenidos a todo \mathcal{Y} , con ayuda de la citada descomposición. Así, una vez introducida la fórmula (1) se generaliza el producto escalar de la forma siguiente:

Si

$$S(z) = Q(z) + \frac{R(z)}{z^m}, \quad T(z) = L(z) + \frac{M(z)}{z^p}$$

con $p > m$, escribimos, por linealidad,

$$\begin{aligned} S(z) \circ T(z) &= Q(z) \circ L(z) + Q(z) \circ \frac{M(z)}{z^p} + \frac{R(z)}{z^m} \circ L(z) + \frac{R(z)}{z^m} \circ \frac{M(z)}{z^p} = \\ &= Q(z) \circ L(z) + z^p Q(z) \circ M(z) + R(z) \circ z^m L(z) + z^{p-m} R(z) \circ M(z) \end{aligned}$$

donde los productos escalares del último miembro están todos definidos.

Es evidente que esta fórmula es menos manejable que la obtenida en la nota 1 y que no pone de manifiesto la propiedad característica del producto escalar, por lo que este procedimiento no mejora el antes utilizado.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] AKHIEZER N. I. y KREIN, M. G.: *Some problems of the theory of moments*. Am. Math. Soc., Trans. Math. Mon. Vol. 2, 1968.
- [2] ALFARO, M.: *Teoría paramétrica de polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad*. Rev. Ac. Ciencias, tomo XXIX, núm. 1, Zaragoza, 1974, pp. 5-79.
- [3] ALFARO, M.: *El operador multiplicación en la teoría de polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad*. Comunicación a las 2.^{as} Jornadas Matemáticas Hispano-Lusitanas. Madrid, 1973.
- [4] FREUD, G.: *Orthogonale Polynome*. Math. Reihe b.33, Birkhauser Verlag, Basilea, 1969.
- [5] VIGIL, L.: *Sobre propiedades formales de polinomios ortogonales. Sumatoria y recurrencia*. Rev. Ac. Ciencias, tomo LXIII, Madrid, 1969, pp. 11-32.

TOPOLOGIAS ENGENDRADAS EN UN ESPACIO VECTORIAL POR FAMILIAS DE FUNCIONES HOMOGENEAS RESPECTO DE UN SUBGRUPO DE R^*

P O R

M. SOLER

Departamento Teoría de Funciones. Facultad de Ciencias, Zaragoza (España)

Abstract

The conditions in which a S -homogeneous map defines a topology compatible with an algebraic structure of a vector space are studied in this paper. The idea of convexity and gauge are generalized, and its properties are studied. The definition of norme is generalized, and its relation with the concepts above are obtained.

Introducción

En la teoría de los espacios vectoriales topológicos posee gran importancia el estudio de los métodos utilizados para construir tales espacios, esto es, para unir una estructura topológica a una algebraica logrando que ambas sean compatibles. Entre los procedimientos empleados para ello, uno de gran interés es aquel que, partiendo de una familia de funciones definidas en el espacio vectorial permite obtener una topología para la que se satisfagan ciertas condiciones de continuidad. En este sentido, las funciones que originan espacios vectoriales topológicos más ricos en propiedades son las normas. Se han estudiado distintas generalizaciones de éstas, tendiéndose en casi todas ellas a suavizar la condición de subaditividad. Así, en (4) Cuartero prescinde de la subaditividad y estudia topologías engendradas por funciones absolutamente homogéneas, encontrando interesantes resultados. En (7) Garay prescinde de la homogeneidad absoluta y se limita a considerar funciones positivamente homogéneas obteniendo condiciones necesarias y suficientes para que una función de este tipo engendre una topología compatible con la estructura algebraica. En esta memoria debilitamos aún más la condición de homogeneidad, estudiando las condiciones que debe verificar una aplicación homogénea con respecto a los elementos de un subgrupo S de R_+^* (S -homogénea), para que induzca una topología compatible con la estructura de espacio vectorial. Para obtener estas condiciones nos apoyamos en los resultados obtenidos por Garay en (7); en particular utilizamos con frecuencia las dos condiciones siguientes:

(PH.1) Existe $k > 0$ tal que $p(x + y) \leq k[p(x) + p(x)]$ para todo $x, y \in E$.

(PH.2) $p(-U_p^*)$ está acotado.

* Resumen de la Tesis Doctoral, dirigida por el Dr. Garay de Pablo y leída el día 18 de diciembre de 1974 ante el tribunal formado por los Doctores Rodríguez Vidal, Vigil y Vázquez, Garay de Pablo, Carpintero Organero y Torres Iglesias. Fue calificada con sobresaliente «cum laude».

En lo que sigue, suponemos que el subgrupo S no es trivial. Si es discreto, tomamos como generador el mínimo elemento mayor que 1. Suponemos también, que los espacios vectoriales son reales y utilizamos la notación usual.

I. Aplicaciones S -homogéneas

En el primer capítulo estudiamos las condiciones para que una función S -homogénea genere una topología compatible con la estructura algebraica.

Definición. — Sea E un espacio vectorial, S un subconjunto de R_+^* y p una aplicación de E en R_+ . Decimos que p es una aplicación S -homogénea si verifica

- i) $p(0_E) = 0$.
- ii) $p(\lambda x) = \lambda p(x)$ para todo $\lambda \in S$ y para todo $x \in E$.
- iii) $p(E) \subseteq S \cup \{0\}$.

Una vez definida así la aplicación S -homogénea, se prueba que también es homogénea, para los elementos del mínimo subgrupo multiplicativo que contiene a S , por lo que se puede suponer, sin perder generalidad, que S es un subgrupo de R_+^* .

Se introducen los conjuntos.

$$A_x = \{t > 0 \mid p(tx) = 1\}$$

que serán de utilidad en lo que sigue, y estudiamos sus propiedades.

Definiendo

$$\begin{aligned} U_p &= \{x \mid p(x) < 1\} \\ U_p^* &= \{x \mid p(x) = 1\} \end{aligned}$$

obtenemos el siguiente resultado:

Proposición. — Son equivalentes:

- (SH.1) U_p es absorbente.
- (SH.2) Para todo $x \in U_p^*$ existe $\alpha_x \in R_+^*$ tal que

$$|\mu| \leq \alpha_x \Rightarrow p(\mu x) < 1$$

- (SH.3) $\inf A_x \neq 0$ para todo $x \in E^*$.

Como necesitaremos que los U_p sean absorbentes, tenemos que imponer la condición SH. 3.

Representamos por β_x el ínfimo de A_x y definimos

$$\begin{aligned} q: E &\longrightarrow R_+ \\ \begin{cases} q(x) = 0 & \text{si } A_x = \emptyset \\ q(x) = \beta_x^{-1} & \text{si } A_x \neq \emptyset \end{cases} \end{aligned}$$

Esta aplicación es positivamente homogénea y si verifica, como tal aplicación, las condiciones PH. 1 y PH. 2, induce una topología compatible con la estructura de espacio vectorial. Se satisface el contenido

$$U_q = \{x \mid q(x) < 1\} \subseteq U_p$$

y si imponemos la condición

$$(SH. 6) \quad \inf \{\beta_x \mid x \in U_p\} > 0$$

es cierto el contenido $U_p \subseteq \lambda U_q$ para algún $\lambda > 0$, comprobándose la equivalencia entre este último hecho y la condición SH. 6. Va a resultar suficiente imponer esta última condición SH. 6, debido a que su cumplimiento implica el de SH. 3.

Las condiciones PH. 1 y PH. 2 referidas a la aplicación q toman la forma

$$(SH. 4) \quad \text{Existe } k > 0 \text{ tal que } \beta_{x+y}^{-1} \leq k(\beta_x^{-1} + \beta_y^{-1}) \quad \forall x, y \in E.$$

$$(SH. 5) \quad \{\beta_{-x}^{-1} \mid \beta_x = 1\} \text{ está acotado.}$$

Se obtiene ahora el resultado que buscábamos.

Teorema: Sea p una aplicación S -homogénea definida en un espacio vectorial E . p induce en E una topología compatible y localmente acotada sí, y sólo si, verifica SH. 4, SH. 5 y SH. 6.

Dedicamos el resto del capítulo al estudio de las condiciones para que una familia de aplicaciones S -homogéneas engendre una topología, al estudio de la equivalencia de aplicaciones S -homogéneas (en el sentido de que induzcan la misma topología), y a la separabilidad y metrizabilidad de dicha topología.

II. S-convexidad

Una vez obtenidos estos resultados pensamos en la posibilidad de obtener una generalización del concepto de norma en el sentido anterior. Como la convexidad aparece relacionada de forma muy directa con las normas, damos, en el segundo capítulo, unas definiciones de conjunto convexo y absolutamente convexo dependientes del subgrupo S . Las definiciones son similares a las clásicas, pero restringiéndonos a considerar elementos del subgrupo en el caso de S -convexo, y elementos cuyo módulo está en el subgrupo, en el caso de S -equilibrado y absolutamente S -convexo. Estudiamos las relaciones entre ellos y la existencia de envolventes, determinando la forma de éstas en unos casos particulares. Consideramos después que el espacio está provisto de una topología, y estudiamos las propiedades topológicas de los conjuntos que acabamos de definir, resultando su invariancia por paso a la clausura. Se obtiene también que la clausura de un conjunto S -convexo es siempre un conjunto convexo, mientras que en el caso de los S -equilibrados y absolutamente S -convexos, es preciso exigir que el subgrupo sea denso.

III. S-funcional de Minkowski

Dedicamos el capítulo tercero al estudio del S -funcional de Minkowski, generalización del conocido funcional de Minkowski. Ahora, lo definimos como

$$P_{US}(x) = \inf \{a \in S \mid x \in aU\}$$

conviniendo que $\inf \emptyset = +\infty$. Este funcional es finito sí, y sólo si, $SU = E$. Imponiendo restricciones al conjunto U vamos obteniendo distintas propiedades de esta aplicación, entre las que destaca la siguiente:

Proposición. — Sea U estrellado. Entonces U es pseudoconvexo (en el sentido de Rolewicz) sí, y sólo si, existe $k > 0$ tal que

$$P_{US}(x+y) \leq k[P_{US}(x) + P_{US}(y)] \quad \forall x, y \in E$$

Se obtiene también que si U es S -estrellado y p_{US} verifica SH. 1 (o equivalentemente SH. 2 ó SH. 3), U es absorbente y que si U es absorbente, p_{US} verifica SH. 1, SH. 2 y SH. 3.

Definimos acotación en una dirección y estudiamos su relación con el hecho de que el S-funcional de Minkowski se anule, terminado el capítulo con el estudio de las «bolas abiertas y cerradas» de esta aplicación, así como su relación con la continuidad superior e inferior.

IV. S-normas

Habíamos definido espacio localmente S-convexo como aquél que admite una base de entornos del origen absolutamente S-convexos, resultando ejemplos suyos los espacios l_p , $0 < p < 1$. Pasamos ahora al estudio de los espacios localmente S-convexos y de las S-normas, dedicando a éste nuestro cuarto capítulo.

Definición. — Sea E un espacio vectorial y S un subgrupo de R_+^* . Llamamos S-norma a una aplicación

$$\| \cdot \| : E \longrightarrow R_+$$

que verifica

$$(SN. 1) \quad \| x \| = 0 \iff x = \theta$$

$$(SN. 2) \quad \| x + y \| \leq \| x \| + \| y \|\quad$$

$$(SN. 3) \quad \| tx \| = |t| \cdot \| x \|\quad$$

$$(SN. 4) \quad \| E \| \subseteq S \cup \{0\}$$

para todo $x, y \in E$ y para todo t tal que $|t| \in S$.

Definimos de forma similar S-seminorma, S-cuasinorma y S-cuasiseminorma.

Ahora nos basta imponer la condición SH. 6 a una S-cuasiseminorma para que ésta induzca una topología en el espacio vectorial, topología que es localmente acotada. La topología que induce una S-seminorma es localmente S-convexa y si 2 es un elemento de S , esta topología es localmente convexa. En el recíproco hay que distinguir dos casos, tal y como se prueba en:

Proposición. — Sea E un espacio localmente S-convexo y localmente acotado. Se verifica:

- i) Si S es discreto, existe una S-cuasiseminorma que genera la topología.
- ii) Si S es denso, existe una cuasiseminorma que genera la topología.

En el caso de que el espacio topológico sea Hausdorff, se sustituyen las funciones anteriores por S-cuasinorma y por cuasinorma respectivamente.

Se obtienen resultados similares para el caso de familias de funciones S-homogéneas, eliminándose la condición de localmente acotado en el recíproco.

En el segundo párrafo de este cuarto capítulo se estudia el espacio $L_{CG}(E, F)$ de las aplicaciones aditivas, S-homogéneas y continuas entre dos espacios vectoriales E y F S-normado, T -normado, respectivamente.

Proposición. — Sea $f \in L_c(E, F)$. Son equivalentes

$$i) \quad A = \left\{ \frac{\| f(x) \|_r}{\| x \|_s} \mid x \neq \theta \right\} \text{ está acotado.}$$

- ii) f es continua.

Existen equivalencias similares con los conjuntos

$$B = \{ \| f(x) \|_r \mid \| x \|_s = 1 \}$$

$$C = \{ \| f(x) \|_r \mid \| x \|_s < 1 \}$$

coincidiendo los supremos de todos ellos si S es denso. Si S es discreto, con elemento generador a , se verifica que

$$N \leq M \leq N a$$

donde $N = \sup C$ y $M = \sup A$. En todo caso, $\sup A = \sup B$.

Para definir la norma en $L_{CG}(E, F)$ utilizamos el conjunto A , y definimos la aplicación

$$\begin{aligned} \|\cdot\| : L_{CG}(E, F) &\longrightarrow R \\ \|f\| &= \sup A. \end{aligned}$$

resultando que si T es discreto, la aplicación anteriormente definida es una T -norma, y si T es denso, es una norma. Si la definición la diésemos utilizando el conjunto B , no habría modificación. Si utilizamos el conjunto C , la norma cambia, pero la topología engendrada será la misma debido a las desigualdades que hemos reseñado anteriormente. Además, esta aplicación engendra siempre una topología compatible con la estructura de espacio vectorial. Por lo tanto, si T es discreto la topología es localmente T -convexa, y si T es denso, es localmente convexa.

Se define el S -dual topológico como el espacio $L_{CS}(E, R)$, que es, por tanto, espacio normado. En el caso de que F sea completo, $L_{CG}(E, F)$ es completo, por lo que el S -dual topológico es también completo.

BIBLIOGRAFIA

- (1) J. BASTERO y B. CUARTERO: Actas III Jor. Mat. Hispano-Lusitanas (1974).
- (2) N. BOURBAKI: *Elements de Mathématique. Livre III. Topologie Generale.* Herman (1963).
- (3) B. CUARTERO: Tesis Doctoral. Zaragoza (1972).
- (4) B. CUARTERO: Actas II Jor. Mat. Hispano-Lusitanas (1973).
- (5) J. DUGUNDJI: *Topology.* Allyn and Bacon (1972).
- (6) B. EPSTEIN: *Linear Functional Analysis.* W. B. Saunders Co. (1970).
- (7) J. GARAY: Actas I Jor. Mat. Hispano-Lusitanas (1972).
- (8) J. HORVATH: *Topological vector spaces and Distributions.* Addison Wesley (1966).
- (9) D. H. HYERS: *Revista de Ciencias*, 41 (1939), pág. 558.
- (10) G. KOTHE: *Topological vector spaces.* Springer Verlag (1969).
- (11) A. P., W. J. ROBERTSON: *Topological vector spaces.* Cambridge University Press (1973).
- (12) S. ROLEWICZ: *Metric Linear Spaces.* Polish Scientific Pub. (1972).
- (13) H. H. SCHRAEFER: *Topological vector spaces.* Springer Verlag (1971).
- (14) S. SIMONS: *Trans. Amer. Math. Soc.* 113, pág. 169.
- (15) M. SOLER: Actas II Jor. Mat. Hispano-Lusitanas (1973).

DOS OBSERVACIONES SOBRE UNA DESIGUALDAD DE BURKHOLDER

P O R

M. SAN MIGUEL

Departamento de Estadística Matemática y Cálculo de Probabilidades
Universidad de Zaragoza (España)

In this note, we give two applications of a inequality of Burkholder [1] which make more general a result of Neveu [2] about the increasing process associated to the Doob's decomposition of a sub-martingale $\{|X_n|^p\} n \in \mathbb{N}$ ($p \geq 1$) and a inequality of Rosén [3] for sums of independent r. v.'s.

Sobre (Ω, \mathcal{F}, P) sea $\{X_n\} n \in \mathbb{N}$ una martingala con respecto a la familia creciente $\{\mathcal{F}_n\} n \in \mathbb{N}$ de sub-tribus de \mathcal{F} , tal que $X_0 = 0$ y de potencia p -ésima integrable ($p \geq 1$). Designemos con $\{A_n^{(p)}\} n \in \mathbb{N}$ el proceso creciente de la descomposición de Doob de la submartingala $\{|X_n|^p\} n \in \mathbb{N}$:

$$A_0^{(p)} = 0, \quad A_{n+1}^{(p)} - A_n^{(p)} = E[|X_{n+1}|^p - |X_n|^p | \mathcal{F}_n]$$

y llamemos $\{B_n^{(p)}\} n \in \mathbb{N}$ al proceso creciente:

$$B_0^{(p)} = 0, \quad B_{n+1}^{(p)} - B_n^{(p)} = E[|X_{n+1} - X_n|^p | \mathcal{F}_n],$$

que coincide con el $\{A_n^{(p)}\} n \in \mathbb{N}$ en el caso en que $p = 2$.

I. — El teorema siguiente, basado en una desigualdad de Burkholder, generaliza notablemente un resultado de Neveu que liga ambos procesos crecientes (véase [2], páginas 159-160):

TEOREMA 1. — Si $p \geq 1$, se verifica:

$$\|A_\infty^{(p)}\|_1 \leq c E[(B_\infty^{(2)})^{p/2}] + c \|B_\infty^{(p)}\|_1, \quad (1)$$

donde c es finito, distinto de cero y depende sólo de p .

Si $p \geq 2$, se verifica:

$$c' \|A_\infty^{(p)}\|_1 \leq \|B_\infty^{(2)}\|_{p/2}^{p/2} + \|B_\infty^{(p)}\|_1 \leq c'' \|A_\infty^{(p)}\|_1, \quad (2)$$

donde c' y c'' son finitos, distintos de cero y dependen solamente de p .

DEMOSTRACIÓN. — Sea $\{\langle X, X \rangle_n\} n \in \mathbb{N}$ el proceso de varianzas asociado a la martingala $\{X_n\} n \in \mathbb{N}$:

$$\langle X, X \rangle_0 = E[X_0^2 | \mathcal{F}_0], \quad \langle X, X \rangle_n = E[X_0^2 | \mathcal{F}_0] + \dots + E[(X_n - X_{n-1})^2 | \mathcal{F}_{n-1}].$$

Si Φ es una función continua y no decreciente sobre $[0, \infty]$, que verifica:

$$\Phi(0) = 0, \quad \Phi(2\lambda) \leq c_1 \Phi(\lambda) \quad (\lambda > 0),$$

es válida entonces la siguiente desigualdad (véase [1], teorema 21.1):

$$E[\Phi(\sup_n |X_n|)] \leq c E[\Phi(\sqrt{\langle X, X \rangle_\infty})] + c E[\Phi(\sup_n |X_{n+1} - X_n|)], \quad (3)$$

donde c depende sólo de c_1 .

Tomando $\Phi(\lambda) = \lambda^p$ ($p \geq 1$) y advirtiendo que

$$\Phi(\sup_n |X_{n+1} - X_n|) \leq \sum_{n=0}^{\infty} \Phi(|X_{n+1} - X_n|),$$

se obtiene:

$$E[(\sup_n |X_n|)^p] \leq c E[(\sqrt{\langle X, X \rangle_\infty})^p] + c \sum_{n=0}^{\infty} E[E[|X_{n+1} - X_n|^p | \mathcal{F}_n]],$$

donde c sólo depende de p .

Basta tener en cuenta que $E[A_\infty^{(p)}] = \sup_n E[|X_n|^p]$ y la definición de los procesos $\{B_n^{(p)}\}$ $n \in \mathbb{N}$ para deducir (1).

Por otra parte, si $\{[X, X]_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es:

$$[X, X]_0 = X_0^2, \quad [X, X]_n = X_0^2 + \dots + (X_n - X_{n-1})^2$$

y $\{Q_n^x\}$ $n \in \mathbb{N}$ es el proceso de variación cuadrática, definido como $Q_n^x = \sqrt{[X, X]_n}$ ($n \in \mathbb{N}$), se tienen las desigualdades:

$$c_2 \|\sqrt{\langle X, X \rangle_\infty}\|_p \leq \|Q_\infty^x\|_p \leq c_3 \sup_n \|X_n\|_p (= c_3 E[A_\infty^{(p)}]) \quad (3')$$

(véase [1], lema 16.1 y teorema 3.2), donde c_2 y c_3 dependen exclusivamente de p .

Como $\sum_{n=0}^{\infty} |X_{n+1} - X_n|^p \leq (Q_\infty^x)^p$ si $p \geq 2$, resulta de aquí:

$$E[B_\infty^{(p)}] \leq c_3 \sup_n E[|X_n|^p] \quad (= c_3 E[A_\infty^{(p)}]) \quad (3'')$$

Y de (3') y (3'') se deduce en definitiva la desigualdad (2). $\#$

COROLARIO 1. — Sea $p > 1$. La martingala $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ converge en L_p (y por consiguiente [c. s.]) si $E[(B_\infty^{(2)})^{p/2}] < \infty$ y $E[B_\infty^{(p)}] < \infty$.

Cuando $p \geq 2$, la martingala $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ está acotada en L_p (y por consiguiente converge en L_p) si y sólo si $B_\infty^{(k)} \in L_{p/k}$ ($k = 2, p$).

DEMOSTRACIÓN. — Si $p > 1$ y $E[A_n^{(p)}] < \infty$, la martingala converge en L_p y [c. s.] a una v. a. integrable X_∞ . Aplicando la desigualdad (1) del teorema obtenemos por consiguiente la primera parte del corolario.

Si $p \geq 2$ y $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ está acotada en L_p basta tener en cuenta la segunda parte de la desigualdad (2) para deducir que $B_\infty^{(k)} \in L_{p/k}$ ($k = 2, p$). $\#$

OBSERVACIÓN 1. — Si T es un tiempo de parada con respecto a $\{\mathcal{F}_n\}$ $n \in \mathbb{N}$, la martingala $\{X_{T \wedge n}\}$ $n \in \mathbb{N}$ converge en L_p y [c. s.] si $E[(B_T^{(2)})^{p/2}] < \infty$ y $E[B_T^{(p)}] < \infty$, según el teorema y corolario anteriores.

En [2] pueden recogerse además algunas aplicaciones del teorema para el caso en que $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es un recorrido aleatorio. $\#$

Sabemos que si $E[\sup |X_{n+1} - X_n|^p] < \infty$ ($p \geq 1$), los sucesos $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es convergente } y $\{A_\infty^{(p)} < \infty\}$ son iguales [c. s.] (véase [2], págs. 156-158). Sin embargo, el corolario siguiente permite prescindir de tal hipótesis cuando $p \geq 2$:

COROLARIO 2. — Si la martingala $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es de potencia p -ésima integrable ($p \geq 2$), se verifica

$$\limsup_n X_n = +\infty \quad \text{y} \quad \liminf_n X_n = -\infty$$

sobre $\{A_\infty^{(p)} = \infty\}$.

DEMOSTRACIÓN. — Como

$$\sup_n |X_{n+1} - X_n|^p \leq \sum_{n=0}^{\infty} |X_{n+1} - X_n|^p,$$

resulta:

$$E[\sup_n |X_{n+1} - X_n|^p] \leq E[\sum_{n=0}^{\infty} |X_{n+1} - X_n|^p] = E[B_\infty^{(p)}]$$

y basta aplicar la desigualdad (2) para deducir

$$E[\sup_n |X_{n+1} - X_n|^p] \leq c'' \sup_n E[|X_n|^p] < \infty$$

La continuación de la demostración es análoga a la hecha en [2], págs. 156-158. $\#\$

II. — Mediante la misma desigualdad (3) se puede generalizar también un resultado de Rosén (véase [3]), del modo siguiente:

TEOREMA 2. — Si $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es una martingala y existen v. a. U_n y V_n ($n \in \mathbb{N}$) tales que

$$B_{n+1}^{(2k)} - B_n^{(2k)} \leq U_{n+1}^{2k} V_{n+1} \quad (k = 1 \text{ y } p, p \geq 1; n \in \mathbb{N}),$$

se verifica:

$$\sup_n \|X_n\|_{2p}^{2p} \leq c''' \max \{ [E(\sum_{n=0}^{\infty} U_{n+1}^2 V_{n+1})^p], E[\sum_{n=0}^{\infty} U_{n+1}^{2p} V_{n+1}] \} \quad (4)$$

donde c''' es un número que sólo depende de p .

DEMOSTRACIÓN. — Es inmediata teniendo en cuenta (2) y que $B_0^{(2k)} = 0$. $\#\$

OBSERVACIÓN 2. — Si $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ es una suma de v. a. independientes y centradas y U_{n+1} y V_{n+1} son números reales λ_{n+1} y ρ_{n+1} ($n \in \mathbb{N}$), respectivamente, se obtiene:

$$\sup_n \|X_n\|_{2p}^{2p} \leq c''' \max \{ (\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_{n+1}^2 \rho_{n+1})^p, \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_{n+1}^{2p} \rho_{n+1} \} \quad (5)$$

para todo $p \geq 1$. (Rosén demuestra esta desigualdad cuando p es un número natural). $\#\$

OBSERVACIÓN 3. — Si se toma

$$U_{n+1} = (E[|X_{n+1} - X_n|^{2p} | \mathcal{F}_n])^{1/2p}, \quad V_{n+1} = 1 \quad (n \in \mathbb{N}),$$

se obtiene en particular:

$$\sup_n \|X_n\|_p^p \leq c''' E \{ (\sum_{n=0}^{\infty} (E[|X_{n+1} - X_n|^{2p} | \mathcal{F}_n])^{1/2p})^p \} \quad (6)$$

o bien, si $\{X_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ está formada por sumas de v. a. independientes y centradas:

$$\sup_n \|X_n\|_p^p \leq c'' \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (E [|X_{n+1} - X_n|^{2p}]^{1/p})^p \right\} \quad (7)$$

(desigualdad de Whittle).

Para

$$U_{n+1} = 1, V_{n+1} = \text{máx.} \{ B_{n+1}^{(2)} - B_n^{(2)}, B_{n+1}^{(2p)} - B_n^{(2p)} \},$$

la desigualdad (4) se convierte en:

$$\sup \|X_n\|_{2p}^{2p} \leq c''' \text{máx.} \{ E [(\sum_{n=0}^{\infty} V_{n+1})^p], E [\sum_{n=0}^{\infty} V_{n+1}] \}. \quad \# \quad (8)$$

BIBLIOGRAFIA

- [1] BURKHOLDER, D. L.: *Distribution function inequalities for martingales*. Ann. Prob., 1, 19-42 (1973).
- [2] NEVEU, J.: *Martingales à temps discret*. Masson. París, 1972.
- [3] ROSÉN, B.: *On bounds on the central moments of even order of a sum of independent random variables*. Ann. Math. Statist., 41, 1074-1077 (1970).

SOBRE EL PRINCIPIO DE INVARIANCIA PARA PROCESOS INTERCAMBIABLES

P O R

M. SAN MIGUEL

Departamento de Estadística Matemática y Cálculo de Probabilidades, Zaragoza

Summary

We pretend to settle in this work a Donsker's invariance principle for exchangeable random variables, with an application to sampling without replacement.

0

Sea $C = C[0,1]$ el espacio de las funciones continuas reales sobre el intervalo cerrado $[0,1]$, metrizado mediante la definición de distancia entre dos funciones $x = x(t)$, $y = y(t)$ como:

$$\rho(x, y) = \sup_{0 \leq t \leq 1} |x(t) - y(t)| \quad (0.1)$$

Si X_1, \dots, X_n, \dots es una sucesión de variables aleatorias reales definidas sobre un espacio probabilístico (Ω, \mathcal{A}, P) , independientes e idénticamente distribuidas, con media cero y varianza σ^2 , y llamamos $S_0 = 0$, $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$ a la correspondiente sucesión de sumas parciales, el principio de invariancia de Donsker asegura que el elemento C definido en la forma:

$$Y_n(t, w) = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} S_{i-1}(w) + \frac{t - (i-1)/n}{1/n} \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} X_i(w) \quad (0.2)$$

si $t \in \left[\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n} \right]$; o bien, puesto que $i-1$ es la parte entera de nt , $i-1 = [nt]$, si $t \in [(i-1)/n, i/n]$, abreviadamente:

$$Y_n(t, w) = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} S_{[nt]}(w) + (nt - [nt]) \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} X_{[nt]+1}(w) \quad (0.3)$$

converge en distribución al movimiento browniano $W_t(w)$:

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W. \quad (0.4)$$

Del mismo modo, si D es el espacio de las funciones sobre $[0,1]$ que son continuas a

derecha y tienen límites a izquierda, con una métrica conveniente (véase [2], pp. 109-123), la función aleatoria de D :

$$Y_n(t, w) = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} S_{[nt]}(w) \tag{0.5}$$

verifica:

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W \tag{0.6}$$

Es grande el número de trabajos relativos al principio de invariancia o *teorema del límite central funcional* para diversas funciones aleatorias de C o D . Además de los de Billingsley [2] (1968), existen, entre otros, los de Lyones [5] (1969) para martingalas inversas, Brown (1971) para martingalas, Miller y Sen (1972) y Sen (1974) para U -estadísticos, Sen (1973) y Raghavachari (1973) para estadísticos de Kolmogorof-Smirnof, Sen y Ghosh (1974) para estadísticos de orden-rango, etc.

Consideremos por otra parte el espacio $(\mathbf{R}, \mathcal{B}_R)$, donde \mathbf{R} es el conjunto de los reales y \mathcal{B}_R la familia de los conjuntos de Borel de \mathbf{R} , y formemos el espacio producto $(\mathbf{R}^N, \mathcal{B}_R^N)$, donde N es el conjunto de los naturales. Si \mathcal{P} es el grupo de las permutaciones de N que sólo intercambian un número finito de naturales, para cada $p \in \mathcal{P}$ la biyección:

$$\{x_n\} \longrightarrow \{x_{p(n)}\}$$

preserva la estructura medible de \mathbf{R}^N (véase [6], p. 189). Si P es una medida de probabilidad sobre $(\mathbf{R}^N, \mathcal{B}_R^N)$ tal que su imagen mediante tal biyección coincide con P para todo p se dirá que P es una *probabilidad simétrica* o *intercambiable*. (Es evidente además que si P es un producto de medidas de probabilidad, P^* , iguales entre sí, P es intercambiable).

Si designamos con $\{X_n\}$ las variables aleatorias coordenadas y P es intercambiable, la distribución conjunta de X_{i_1}, \dots, X_{i_k} para cualesquiera i_1, \dots, i_k distintos depende solamente de k y es independiente de i_1, \dots, i_k . En este caso, el proceso $\{X_n\}$ se llama *intercambiable*. Un teorema de De Finetti asegura entonces que si \mathcal{F} es la clase de las funciones de distribución sobre $(\mathbf{R}, \mathcal{B}_R)$, si para cada par de números reales x, y , se define

$$\mathcal{F}(x, y) = \{F \in \mathcal{F} \mid F(x) \leq y\}$$

y si U es la σ -álgebra engendrada por la clase $\{\mathcal{F}(x, y)\}$, existe una medida de probabilidad μ sobre el espacio medible (\mathcal{F}, U) tal que:

$$P\{B\} = \int_{\mathcal{F}} P_F(B) \mu(dF) \tag{0.7}$$

para todo $B \in \mathcal{B}_R^N$, donde $P(B)$ es la probabilidad del suceso B y $P_F(B)$ es la probabilidad construida del modo habitual sobre $(\mathbf{R}_N, \mathcal{B}_R^N)$ a partir de la hipótesis de que las variables aleatorias $\{X_n\}$ son independientes y con la misma función de distribución F .

Los resultados de carácter general sobre variables aleatorias intercambiables pueden encontrarse en los textos de Loève [4] y Meyer [6] y en este último, en particular, se hace referencia a trabajos de Hewitt y Savage sobre el tema.

Billingsley demuestra que si, para cada n , las variables aleatorias

$$X_{n1}, X_{n2}, \dots, X_{nk_n}$$

son intercambiables y verifican:

$$\sum_{i=1}^{kn} X_{ni} \xrightarrow{P} 0, \quad \sum_{i=1}^{kn} X_{ni}^2 \xrightarrow{P} 1, \quad \max_{1 \leq i \leq kn} |X_{ni}| \xrightarrow{P} 0 \tag{0.8}$$

satisfacen un principio de invariancia, en el sentido de que la función aleatoria de D :

$$Y_n(t, \omega) = \sum_{i=1}^{[knt]} X_{ni}(\omega)$$

converge en distribución al puente browniano (véase [2], pp. 208-214):

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W^0$$

B. B. Bhattacharyya demuestra en [1] que si $\{X_n\}$ es una sucesión intercambiabile y $M_{1,n} \leq M_{2,n} \leq \dots \leq M_{n,n}$ son los estadísticos ordenados correspondientes a la n -tupla X_1, X_2, \dots, X_n , la sucesión $(M_{n,n} - M_{1,n}) / \binom{n}{2}$ es una submartingala inversa si $E(X_i) < \infty$ y la sucesión $M_{n,n}/n$ es así mismo una submartingala inversa si las X_i son no negativas. Podemos añadir entonces, teniendo en cuenta los resultados de Loynes, que para ambas sucesiones es válido un principio de invariancia, cuando sean martingalas.

Aprovechando un trabajo de Blum, Chernoff, Rosenblatt y Teicher [3], en el que se dan condiciones necesarias y suficientes para que un proceso intercambiabile satisfaga el teorema del límite central, pretendemos demostrar en lo que sigue la convergencia al movimiento browniano de las Y_n correspondientes.

1

Dada una probabilidad P intercambiabile sobre $(\mathbb{R}^N, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^N})$, consideremos el proceso coordenado intercambiabile definido en $\mathbf{0}, \{X_n\}$, para el que suponemos, sin merma de generalidad, que todas las variables aleatorias X_n tienen media cero y varianza uno. Sea además n el elemento de C :

$$Y_n(t, \omega) = \frac{1}{\sqrt{n}} S_{[nt]}(\omega) + (nt - [nt]) \frac{1}{\sqrt{n}} X_{[nt]+1}(\omega) \tag{1.1}$$

Puesto que utilizaremos la convergencia débil de las distribuciones finito-dimensionales de las medidas de probabilidad P_n en (C, \mathcal{C}) (\mathcal{C} es la σ -álgebra de los conjuntos de Borel de C), correspondientes a las Y_n , y el *tensamiento* («tightness») de la sucesión $\{Y_n\}$, que es equivalente (véase [2], p. 54), puesto que C es completo y separable, a la compacidad relativa de la familia P_n de medidas sobre (C, \mathcal{C}) , tenemos necesidad de establecer dos lemas:

LEMA 1. — Sea m un entero positivo y $\{S_n\}$ la sucesión de sumas parciales del proceso intercambiabile $\{X_n\}$. Si S' y S'' son variables aleatorias definidas en $(\mathbb{R}^N, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^N})$ y con valores en $(\mathbb{R}, \mathcal{B})$, se verifica:

$$S_n \xrightarrow{\mathcal{D}} S', \quad S_{n+m} - S_n \xrightarrow{\mathcal{D}} S'' \tag{1.2}$$

si y sólo si:

$$(S_n, S_{n+m} - S_n) \xrightarrow{\mathcal{D}} (S', S'') \tag{1.3}$$

DEMOSTRACIÓN. — Evidentemente (1.3) implica (1.1) aun sin hacer la hipótesis de que $\{X_n\}$ es intercambiabile. Para demostrar el recíproco, basta comprobar (véase [2], p. 27) que si

$$\lim_n P \{S_n \in A'\} = P \{S' \in A'\}$$

$$\lim_n P \{S_{n+m} - S_n \in A''\} = P \{S'' \in A''\}$$

para todo par de conjuntos A' y A'' de S' —continuidad y S'' — continuidad, respectivamente, entonces:

$$\lim_n P \{ S_n \in A', S_{n+m} - S_n \in A'' \} = P \{ S' \in A', S'' \in A'' \}.$$

Puesto que $\{w : S_n(w) \in A', S_{n+m}(w) - S_n(w) \in A''\}$ es un elemento de \mathcal{B}_R^N , se puede poner:

$$\begin{aligned} P \{ S_n \in A', S_{n+m} - S_n \in A'' \} &= \int_{\mathcal{F}} P_F \{ S_n \in A', S_{n+m} - S_n \in A'' \} \mu(dF) = \\ &= \int_{\mathcal{F}} P_F \{ S_n \in A' \} \cdot P_F \{ S_{n+m} - S_n \in A'' \} \mu(dF), \end{aligned}$$

teniendo en cuenta (0.7) y la independencia de S_n y $S_{n+m} - S_n$ bajo P_F .

Aplicando el teorema de la convergencia acotada de Lebesgue:

$$\begin{aligned} \lim_n P \{ S_n \in A', S_{n+m} - S_n \in A'' \} &= \\ &= \int_{\mathcal{F}} P_F \{ S' \in A' \} \cdot P_F \{ S'' \in A'' \} \mu(dF) = \int_{\mathcal{F}} P_F \{ S' \in A', S'' \in A'' \} \mu(dF) = \\ &= P \{ S' \in A', S'' \in A'' \}, \end{aligned}$$

ya que también $\{w : S'(w) \in A', S''(w) \in A''\} \in \mathcal{B}_R^N$. $\#$

LEMA 2. — Si $\{X_n\}$ es intercambiable se verifica:

$$P \{ \max_{i \leq n} |S_i| \geq \lambda \sqrt{n} \} \leq 2P \{ |S_n| \geq (\lambda - \sqrt{2}) \sqrt{n} \}. \quad (1.4)$$

DEMOSTRACIÓN. — La desigualdad es cierta para variables aleatorias independientes (véase [4], p. 247). Por consiguiente:

$$\begin{aligned} P \{ \max_{i \leq n} |S_i| \geq \lambda \sqrt{n} \} &= \int_{\mathcal{F}} P_F \{ \max_{i \leq n} |S_i| \geq \lambda \sqrt{n} \} \mu(dF) \leq \\ &\leq 2 \int_{\mathcal{F}} P_F \{ |S_n| \geq (\lambda - \sqrt{2}) \sqrt{n} \} \mu(dF) = \\ &= 2P \{ |S_n| \geq (\lambda - \sqrt{2}) \sqrt{n} \}. \quad \# \end{aligned}$$

El proceso intercambiable $\{X_n\}$ con media cero y varianza uno satisface el teorema del límite central si y sólo si:

$$E[X_i X_j] = 0, \quad E[(X_i^2 - 1)(X_j^2 - 1)] = 0 \quad (1.5)$$

para $i \neq j$ (véase [3]). Entonces:

TEOREMA 1. — Si el proceso intercambiable, con media cero y varianza uno, satisface las condiciones (1.5), las funciones aleatorias definidas en (1.1) verifican:

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W.$$

DEMOSTRACIÓN. — Procediendo como en [2], pp. 68 y 69, se demuestra que:

$$\frac{1}{\sqrt{n}} S_{[ns]} \xrightarrow{\mathcal{D}} W_s,$$

y, por consiguiente, que $Y_n(s) \rightarrow W_s$ para todo s , si se tiene en cuenta que $\{X_n\}$ satisface el teorema del límite central y además que $[ns]/n \rightarrow s$.

Del lema 1 se deduce entonces que para $s < t$:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n}} S_{[ns]}, \frac{1}{\sqrt{n}} (S_{[nt]} - S_{[ns]}) \right) \xrightarrow{\mathcal{D}} (W_s, W_t - W_s)$$

y por consiguiente:

$$(Y_n(s), Y_n(t) - Y_n(s)) \xrightarrow{\mathcal{D}} (W_s, W_t - W_s)$$

lo cual implica ([2], p. 31):

$$(Y_n(s), Y_n(t)) \xrightarrow{\mathcal{D}} (W_s, W_t)$$

Basta repetir el razonamiento con un conjunto de tres o más puntos para deducir que las distribuciones finito-dimensionales de las Y_n convergen a las de W .

Por otra parte, puesto que $\{X_n\}$ satisface el teorema del límite central:

$$P \left\{ |S_n| \geq \frac{1}{2} \lambda \sqrt{n} \right\} \rightarrow P \left\{ |\mathcal{N}| \geq \frac{1}{2} \lambda \right\}$$

(\mathcal{N} es la variable aleatoria correspondiente a una distribución normal de media cero y varianza uno), así que:

$$\begin{aligned} \lim_n \sup_{i \leq n} P \{ \max_i |S_i| \geq \lambda \sqrt{n} \} &= \\ &= 2 P \left\{ |\mathcal{N}| \geq \frac{1}{2} \lambda \right\} < \frac{16}{\lambda^3} E [|\mathcal{N}|^3], \end{aligned}$$

si aplicamos el lema 2 con $\lambda > 2 \sqrt{2}$.

Tomando λ suficientemente grande se deduce de [2], p. 59, que la sucesión $\{Y_n\}$ es tensa («tight»).

Ambas conclusiones implican la tesis del teorema (véase [2], p. 40). $\#$

OBSERVACIÓN 1. — Del mismo modo puede demostrarse que la función en D definida por

$$Y_n(t, w) = \frac{1}{\sqrt{n}} S_{[nt]}(w) \tag{1.6}$$

converge en distribución a W_t :

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W,$$

si $\{X_n\}$ es intercambiable con media cero y varianza uno y satisface (1.5). $\#$

2

Para cada entero positivo n , sean $X_{n1}, X_{n2}, \dots, X_{nk_n}$ variables aleatorias intercambia-
bles con media cero, varianza uno y momento absoluto de tercer orden finito. Si designa-
mos con E_n la esperanza con respecto a la distribución del n -ésimo proceso, en [3] se
demuestra que si:

$$E_n [X_{n1} \cdot X_{n2}] = 0 \left(\frac{1}{n} \right) \tag{1.7}$$

$$\lim E_n [X_{n1}^2 \cdot X_{n2}^2] = 1$$

$$E_n [|X_{n1}|^3] = 0 (\sqrt{n}),$$

$\{X_{ni}\}$ satisface el teorema del límite central. Si denotamos $S_{ni} = X_{n1} + \dots + X_{ni}$ e Y_n a
la función aleatoria sobre C que, como en el párrafo 1, es lineal sobre cada intervalo
 $[(i-1)/n, i/n]$ y toma los valores $Y_n(i/n) = S_{ni}/n$ en los puntos de subdivisión, puede

demostrarse, lo mismo que antes, la convergencia $Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W$:

TEOREMA 2. — Si las variables aleatorias intercambia-
bles $X_{n1}, X_{n2}, \dots, X_{nk_n}$ con media
cero, varianza uno y momento absoluto de tercer orden finito satisfacen las condiciones
(1.7), la función Y_n verifica:

$$Y_n \xrightarrow{\mathcal{D}} W.$$

DEMOSTRACIÓN. — Basta tener en cuenta la demostración del teorema 1, el lema 2, y el
corolario al teorema 8.3 de [2] en pp. 56-57. $\#$

Como aplicación, Billingsley generaliza un resultado de Rosén, considerando, para
cada n , una población finita:

$$x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nk_n} \tag{1.8}$$

y una permutación aleatoria de ella:

$$X_{n1}, \dots, X_{nk_n} \tag{1.9}$$

(cada una de la $k_n!$ permutaciones posibles tiene una probabilidad $1/k_n!$), que es, desde
luego, un proceso intercambiable. La función aleatoria de D :

$$Y_n(t, \omega) = \sum_{i=1}^{[k_n t]} X_{ni}(\omega)$$

e $Y_n(t, \omega) = 0$ para $0 \leq t < 1/k_n$ describe el curso de un muestreo sin reemplazamiento
sobre la población finita (1.8) y se demuestra, bajo las condiciones (0.8) ya citadas (véanse
[2] y [7], [8] y [9]), que Y_n converge en distribución al puente browniano W^0 .

Del mismo modo, si suponemos que para todo n las k_n -tuplas (1.8) satisfacen:

$$\frac{\sum_{i=1}^{k_n} x_{ni}}{k_n} = 0, \quad \frac{\sum_{i=1}^{k_n} x_{ni}^2}{k_n} = 1, \tag{1.10}$$

se obtiene mediante cálculos conocidos:

$$\begin{aligned}
 E_n [X_{n1} \cdot X_{n2}] &= -\frac{1}{k_n - 1} \\
 E_n [X_{n1}^2 \cdot X_{n2}^2] &= \frac{k_n^2 - \sum_{i=1}^{k_n} x_{ni}^4}{k_n(k_n - 1)} \\
 E_n [|X_{ni}|^3] &= \frac{\sum_{i=1}^{k_n} |x_{ni}|^3}{k_n}
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

para los procesos (1.9). Puede enunciarse entonces el siguiente corolario del teorema 2:

COROLARIO 1. — Si las poblaciones (1.8) satisfacen (1.10) para cada n y además:

$$\lim_n \frac{n}{k_n - 1} = 0, \quad \lim_n \frac{\sum_{i=1}^{k_n} x_{ni}^4}{k_n(k_n - 1)} = 0, \quad \frac{\sum_{i=1}^{k_n} |x_{ni}|^3}{k} < \infty, \tag{1.12}$$

la función aleatoria Y_n definida sobre C a partir de los procesos (1.9) converge en distribución al movimiento browniano.

DEMOSTRACIÓN. — Basta tener presente que los procesos (1.9) poseen, en este caso, media cero, varianza uno y momento absoluto de tercer orden finito y, según (1.11) y (1.12), satisfacen las condiciones (1.7). $\#$

BIBLIOGRAFIA

- [1] BATTACHARYYA, B. B.: *Reverse Submartingale and Some Functions of Order Statistics*. Ann. Math. Statist., 41 6; 1970.
- [2] BILLINGSLEY, P.: *Convergence of Probability Measures*. Wiley. Nueva York, 1968.
- [3] BLUM, J. R., H. CHERNOFF, M. ROSENBLATT AND H. TEICHER: *Central Limit Theorems for Interchangeable Processes*. Canadian J. Math., 10; 1958.
- [4] LOÈVE, M.: *Probability Theory*. (2.^a ed.). Van Nostrand. Princeton, 1960.
- [5] LOYNES, R. M.: *An Invariance Principle for Reversed Martingales*. Proc. Amer. Math. Soc., 25, 1970.
- [6] MEYER, P. A.: *Probabilités et potentiel*. Hermann. París, 1966.
- [7] ROSÉN, B.: *On the Central Limit Theorem for Sums of Dependent Random Variables*. Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete, 7, 1, 1967.
- [8] ROSÉN, B.: *On Asymptotic Normality of Sums of Dependent Random Vectors*. Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete, 7, 2; 1967.
- [9] ROSÉN, B.: *On the Central Limit Theorems for a Class of Sampling Procedures*. Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete, 7, 2; 1967.

SISTEMAS CANONICOS EN MECANICA CELESTE*

P O R

RAFAEL CID y MANUEL CALVO

Departamento de Física de la Tierra y del Cosmos
Universidad de Zaragoza

Abstract

In this paper a deeper revision of the Soudan work, on the canonical systems, is made. We have departed from Hill's canonical system and by means of an adequate generating function, we obtain all of Soudan's canonical systems valuable for elliptical motion and other general or elliptical systems not contained in that work.

1. Introducción

En el estudio de muchos problemas de Mecánica Celeste, es bastante usual comenzar escribiendo las ecuaciones correspondientes en forma canónica, no sólo porque así se dispone de un sistema de ecuaciones diferenciales todas de primer orden, sino porque para estos sistemas existen técnicas muy definidas que permiten abordar su resolución de una manera sistemática. Por otra parte, la integración de un sistema canónico depende esencialmente de la forma del hamiltoniano correspondiente o, lo que es igual, del conjunto de variables elegidas; de ahí la importancia de esta elección y por tanto del estudio de los diferentes sistemas canónicos que pueden ser utilizados.

Recordemos a este respecto que muchos problemas de carácter orbital (movimiento de un satélite artificial, movimiento planetario, etc.) se reducen al de dos cuerpos, con un potencial que, además del término principal $-\mu/r$, contiene otros términos denominados perturbaciones. Para este tipo de problemas es frecuente el uso de las variables canónicas de Delaunay (o combinaciones de éstas), basadas en los elementos osculadores instantáneos; pero existen otros sistemas de variables canónicas que, en ciertas condiciones, pueden sustituir ventajosamente al de Delaunay. Así, por ejemplo, Levi-Civita (1913), considerando fija la energía kepleriana, estableció otro sistema que lleva su nombre y en el cual las órbitas osculatrices son isoenergéticas en todo instante. Del mismo modo, Hill (1913), de Sitter (1913) y Jekhowsky (1916), apoyándose en esta idea definieron sistemas canónicos en los que las órbitas osculatrices tienen fijos otros elementos orbitales.

Finalmente, Soudan (1955) ideó un procedimiento sistemático para obtener estos cinco sistemas canónicos de variables juntamente con un nuevo sistema. Para ello, expresa las ecuaciones del movimiento por medio de las coordenadas polares y sus momentos canónicos conjugados y llega a la obtención de una función generatriz dependiente de varios parámetros. Según el modo alternativo de fijar dichos parámetros, obtiene los diferentes sistemas canónicos.

* Este trabajo fue presentado en las II Jornadas Matemáticas Hispano-Lusas (Madrid, abril de 1973).

El presente trabajo intenta una revisión más profunda del mismo problema, presentando los sistemas de variables incluidos en el trabajo de Soudan y algunos otros nuevos. Para ello, se ha partido del sistema de variables de Hill y mediante una adecuada función generatriz dependiente de ciertos parámetros, que pueden considerarse como constantes o variables, se establecen algunos sistemas canónicos válidos para cualquier movimiento orbital (elíptico, parabólico o hiperbólico) y otros que solamente pueden ser empleados en un movimiento elíptico. Entre éstos se encuentran los sistemas mencionados por Soudan.

2. Función generatriz

En el movimiento orbital de un punto P , con respecto a un cierto sistema de coordenadas de origen O , se puede definir la posición de P por medio de la distancia $r = |\mathbf{r}| = \overline{OP}$ y los ángulos h (ángulo del nodo) y $u = g + f$, siendo g el argumento del periaastro y f la anomalía verdadera. Estas tres coordenadas (r, u, h) , junto con las variables

$$R = \dot{r} = dr/dt \quad U = |\mathbf{r} \wedge \dot{\mathbf{r}}| \quad H = U \cos I \quad (2.1)$$

donde I designa la inclinación de la órbita, constituye el sistema (R, U, H, r, u, h) de variables canónicas de Hill.

En dicho sistema de variables, el hamiltoniano que define el movimiento del punto P , en un campo de potencial $V(r)$, viene dado por la expresión

$$H = \frac{1}{2} \left(R^2 + \frac{U^2}{r^2} \right) + V(r) \quad (2.2)$$

Ahora bien, con objeto de obtener una función generatriz de la cual se puedan deducir los distintos sistemas de variables, consideremos el caso en que la función potencial $V(r)$ es del tipo

$$V(r) = -\frac{\mu}{r} - \frac{\mu'}{r^2} \quad (2.3)$$

donde μ y μ' son dos parámetros.

Entonces, si E representa la energía de la solución, la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial u} \right)^2 \right] - \frac{\mu}{r} - \frac{\mu'}{r^2} = E \quad (2.4)$$

admite una solución de la forma

$$S = \int_{r_0}^r \sqrt{2E + \frac{2\mu}{r} + \frac{2\mu' - G^2}{r^2}} dr + Gu \quad (2.5)$$

donde G es una constante introducida en la integración de (2.5) y r_0 es un cierto valor de r , que más adelante definiremos.

Es evidente que en el caso del problema de los dos cuerpos, los parámetros (G, E, μ, μ') son constantes, pues G es el módulo del momento angular, E la integral de la energía $\mu' = 0$ y $\mu = k^2(m_0 + m)$ una constante absoluta. Sin embargo, dicha constancia se verá modificada, en los tres primeros cuando se trate de un movimiento perturbado e incluso no hay inconveniente en considerar el parámetro μ como variable (como sucede en el problema de movimiento de un cuerpo con masa variable).

Por eso es preferible considerar la función generatriz S como una función $S = S(r, u, E, G, \mu, \mu')$ que depende de las variables (r, u) y de un cierto número de parámetros, que pueden ser los mencionados u otros equivalentes.

De un modo más general, sea $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)$, $q = (q_1, q_2, \dots, q_n)$, $P = (P_1, P_2, \dots, P_n)$, $Q = (Q_1, Q_2, \dots, Q_n)$ y consideremos una función escalar

$$S = S(q, P, t; \eta) \quad (2.6)$$

que verifica la condición

$$\det \left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial P_k} \right) \neq 0 \quad (2.7)$$

y donde $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_k)$ son un conjunto de parámetros.

Entonces, si dichos parámetros son constantes (independientes de las coordenadas q_i y los momentos P_i), las ecuaciones.

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad Q = \frac{\partial S}{\partial P_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.8)$$

definen implícitamente una transformación canónica $(p, q) \rightarrow (P, Q)$.

En efecto, sustituyendo (2.8) en la forma diferencial

$$w = R dt - Q_i dP_i - p_i dq_i \quad (2.9)$$

y tomando $R = -S_t$, resulta una diferencial exacta, lo cual, como sabemos es condición necesaria y suficiente para que la transformación anterior sea completamente canónica.

Supongamos ahora que la función (2.6) contenga parámetros dependientes de las variables (q, P) , es decir $\eta_k = \eta_k(q, P)$. En este caso, las ecuaciones

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} + \frac{\partial S}{\partial \eta_\alpha} \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial q_i} \quad Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i} + \frac{\partial S}{\partial \eta_\alpha} \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial P_i} \quad (2.10)$$

nos proporcionarán una transformación canónica, siempre que las nuevas variables sean independientes. En efecto sustituyendo (2.10) en (2.9) con $R = -S_t$, queda

$$w = -S_t dt - S_{p_j} dP_j - S_{\eta_\alpha} (\eta_\alpha)_{p_j} dP_j - S_{q_j} dq_j - S_{\eta_\alpha} (\eta_\alpha)_{q_j} dq_j = -dS$$

que es una diferencia exacta, luego la transformación definida por (2.10) es completamente canónica.

Concretamente, en el problema que nos ocupa, tenemos una función S que depende de $q_1 = r$, $q_2 = u$, y de cuatro parámetros $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4$. Bastará, pues, tomar dos de ellos como momentos $P_1 = \eta_1, P_2 = \eta_2$, para tener una función del tipo (2.6), a la que aplicaremos la transformación (2.8) o (2.10), según que los restantes parámetros sean constantes o dependan de las coordenadas y momentos (q_1, q_2, P_1, P_2) .

3. Sistemas canónicos válidos para cualquier tipo de movimiento orbital

Veamos, en primer lugar, un conjunto de sistemas canónicos que pueden ser utilizados indistintamente en movimientos de tipo elíptico, parabólico o hiperbólico.

Para ello, en lugar de μ' , introduzcamos un nuevo parámetro η , dado por

$$2\mu' - G^2 = -\frac{G^2}{1 + \eta} \quad 2\mu' = \frac{\eta}{1 + \eta} G^2 \quad (3.1)$$

Tendremos así la función generatriz

$$S = \int_{r_0}^r \sqrt{2E + \frac{2\mu}{r} - \frac{G^2}{(1+\eta)r^2}} dr + Gu \quad (3.2)$$

y por tanto, las primeras ecuaciones (2.8) $p_i = \partial S / \partial q_i$ nos dan

$$R = \dot{r} = S_r = \sqrt{2E + \frac{2\mu}{r} - \frac{G^2}{(1+\eta)r^2}} \quad U = S_u = G \quad (3.3)$$

Por similitud con el problema de los dos cuerpos, definiremos una variable análoga a la anomalía verdadera f , por la relación

$$r^2 df = G dt \quad (3.4)$$

de tal manera que a r_0 corresponda el valor $f_0 = 0$.

a) Supongamos, pues, que tomamos η, μ , como constantes absolutas. En este caso, las ecuaciones

$$Q_E = S_E \quad Q_G = S_G$$

juntamente con las (3.3) nos proporciona una transformación canónica

$$(R, U, H, r, u, h) \rightarrow (E, G, H, Q_E, Q_G, h)$$

Explícitamente, si T es el valor de t correspondiente al extremo r_0 de r , tendremos

$$Q_E = S_E = \int_{r_0}^r \frac{dr}{\dot{r}} = \int_T^t dt = t - T \quad (3.5)$$

$$Q_G = S_G = u - \int_{r_0}^r \frac{G dr}{(1+\eta)r^2 \dot{r}} = u - \int_T^t \frac{G dt}{(1+\eta)r^2} = g + \frac{\eta}{1+\eta} f \quad (3.6)$$

y el nuevo sistema canónico vendrá definido por las variables

$$\begin{array}{ccc} E & G & H \\ t - T & g + \frac{\eta}{1+\eta} f & h \end{array} \quad (3.a)$$

b) Análogamente, para E, η , constantes, resultará

$$Q_\mu = S_\mu = \int_{r_0}^r \frac{dr}{r \dot{r}} = \int_T^t \frac{dt}{r} = s$$

siendo s una variable regularizadora definida por la última integral.

De este modo obtendremos el sistema de variables canónicas

$$\begin{array}{ccc} (E, \eta \text{ constantes}) & \mu & G & H \\ s & g + \frac{\eta}{1+\eta} f & h \end{array} \quad (3.b)$$

c) Cuando se consideran constantes los parámetros G, η , llegaremos al sistema

$$(G, \eta \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} E & \mu & H \\ t-T & s & h \end{array} \quad (3.c)$$

Finalmente, en los casos en que η no es una constante absoluta, tendremos

$$Q_G = u - \int_0^t \frac{df}{1 + \eta}$$

$$Q_\eta = \int_{r_0}^r \frac{G dr}{2 r^2 (1 + \eta)^2} \int_T^t \frac{G dt}{2 r^2 (1 + \eta)^2} = \int_0^t \frac{G df}{2 (1 + \eta)^2}$$

y resultarán los siguientes sistemas

$$(G, \mu \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} E & \eta & H \\ t-T & \frac{G}{2} \int_0^t \frac{df}{(1 + \eta)^2} & h \end{array} \quad (3.d)$$

$$(G, E \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} \mu & \eta & H \\ s & \frac{G}{2} \int_0^t \frac{df}{(1 + \eta)^2} & h \end{array} \quad (3.e)$$

$$(E, \mu \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} G & \eta & H \\ u - \int_0^t \frac{df}{1 + \eta} & \frac{1}{2} \int_0^t \frac{G df}{(1 + \eta)^2} & h \end{array} \quad (3.f)$$

Señalemos finalmente que los sistemas (3.a), (3.b), (3.c), pueden resultar particularmente útiles y en especial el sistema (3.a) para $\eta = 0$, esto es

$$\begin{array}{ccc} E & G & H \\ t-T & g & h \end{array} \quad (3.a_0)$$

Como ahora veremos es éste una variante del sistema de variables de Delaunay, si bien el (3.a₀) es válido para cualquier tipo de movimiento en tanto que el de Delaunay sólo puede aplicarse en los casos de movimiento elíptico.

En efecto, el sistema (3.a) puede transformarse fácilmente al siguiente

$$\begin{array}{ccc} L & G & H \\ l & g + \frac{\eta}{1 + \eta} f & h \end{array} \quad (3.a')$$

donde $l = n(t-T)$ es la anomalía media.

Para demostrarlo, basta ver que, para $\mu = \text{const.}$, se tiene

$$n = \mu^{1/2} a^{-3/2} \quad dn = -\frac{3}{2} \mu^{1/2} a^{5/2} da \quad dl = (t-T) dn + n d(t-T)$$

de donde se deduce que la expresión

$$Ldt - E d(t-T) = (Ln - E) d(t-T) + L(t-T) dn = d \left[\frac{3}{2} \frac{\mu}{a} (t-T) \right]$$

es una diferencial exacta, como pretendíamos.

4. Sistemas canónicos en el caso elíptico

En este caso, para el cual es $E < 0$, es preferible sustituir los parámetros E, μ, μ' , por otros M, L, F , dados por las relaciones

$$2E = -M^2 \quad \mu = ML \quad 2\mu' = 2GF - F^2 \quad (4.1)$$

con lo cual la función generatriz es escribirá

$$S^* = \int_{r_0}^r \sqrt{-M^2 + \frac{2ML}{r} - \frac{(G-F)^2}{r^2}} dr + Gu \quad (4.2)$$

Por otra parte, cuando sea necesario, definiremos estos parámetros por expresiones análogas a las habituales, esto es

$$\begin{aligned} L &= na^2 & M &= na & \mu &= n^2 a^3 \\ F &= \rho na^2 \sqrt{1-e^2} & G &= (1+\rho) na^2 \sqrt{1-e^2} \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde ρ es un nuevo parámetro.

Como en los casos anteriores siguen siendo válidas las relaciones (3.3) y habremos de calcular las nuevas variables Q_L, Q_M, Q_F, Q_G , u otras que nos convenga obtener.

A) Tomemos L, G , como nuevos momentos, M, ρ , como constantes y expresemos F en función de G , por medio de (4.3). Tendremos así

$$F = \frac{\rho}{1+\rho} G \quad (4.4)$$

y las nuevas coordenadas Q_L, Q_G correspondientes a los momentos L, G , en virtud de las fórmulas (2.10), serán

$$Q_L = S_L^* = \int_{r_0}^r \frac{M dr}{r \dot{r}} = M \int_r^t \frac{dt}{r} = \zeta \quad (4.5)$$

$$Q_G = S_G^* + S_F^* F_G = u + \left(-1 + \frac{\rho}{1+\rho} \right) \int_{r_0}^r \frac{(G-F) dr}{r^2 \dot{r}} = g + \frac{\rho}{1+\rho} f \quad (4.6)$$

donde la variable f es ahora definida por la expresión diferencial

$$r^2 df = (G-F) dt \quad (4.7)$$

y se supone que es $f_0 = 0$ para $r = r_0$.

Análogamente se define la variable ζ , para la órbita osculatriz instantánea, por la fórmula

$$\int_T^t \frac{M dt}{r} = \int_0^{\zeta} d\zeta \quad (4.8)$$

y su significado, en el caso del problema de los dos cuerpos, es idéntico al de la anomalía excéntrica.

Con esto quedará establecido el sistema canónico

$$\begin{array}{lll} L & G & H \\ (M, \rho \text{ constantes}) & & \\ & \zeta & g + \frac{\rho}{1 + \rho} f & h \end{array} \quad (4.A)$$

que para $\rho = 0$, se reduce al de Levi-Civita.

B) Considerando F, G , como momentos y E, μ , como constantes (ahora ρ es variable), tendremos

$$Q_F = \int_{r_0}^r \frac{(G-F) dr}{r^2 \dot{r}} = \int_T^t \frac{(G-F) dt}{r^2} = f \quad (6^+)$$

$$Q_G = u - \int_{r_0}^r \frac{(G-F) dr}{r^2 \dot{r}} = u - f = g \quad (01^+)$$

de donde se deduce el sistema canónico

$$\begin{array}{lll} F & G & H \\ (E, \mu \text{ constantes}) & & \\ & f & g & h \end{array} \quad (4.B)$$

Este sistema se reduce fácilmente al siguiente

$$\begin{array}{lll} -n a^2 \sqrt{1-e^2} & (1+\rho) n a^2 \sqrt{1-e^2} & H \\ f & g+f & h \end{array} \quad (4.B_0)$$

que fue propuesto por Hill.

C) Elijiendo los momentos L, G , y tomando a, ρ como constantes, haremos $M = L/a$, de donde

$$\int_{r_0}^r \frac{M dr}{r \dot{r}} - \frac{1}{a} \int_{r_0}^r \frac{M dr}{\dot{r}} + \frac{1}{a} \int_{r_0}^r \frac{L dr}{r \dot{r}} = 2 \int_T^t \frac{M dt}{r} - \int_T^t n dt = 2\zeta - l \quad (4.11)$$

y el sistema canónico será

$$\begin{array}{lll} L & G & H \\ (a, \rho \text{ constantes}) & & \\ & 2\zeta - l & g + \frac{\rho}{1 + \rho} f & h \end{array} \quad (4.C)$$

que para $\rho = 0$, coincide con el sistema propuesto por de Sitter.

D) Análogamente, con los mismos momentos y tomando como constantes el parámetro $p = a(1 - e^2)$ y ρ , resulta el sistema

$$(p, \rho \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} L & G & H \\ l & g + \frac{\rho}{1 + \rho} f + \frac{2(\zeta - l)}{(1 + \rho)\sqrt{1 - e^2}} & h \end{array} \quad (4.D)$$

que para $\rho = 0$ se reduce al sistema de Jekhowsky.

E) Finalmente, haciendo constantes n y ρ , para idénticos momentos, se obtiene el sistema propuesto por Soudan

$$(n, \rho \text{ constantes}) \quad \begin{array}{ccc} L & G & H \\ \frac{1}{2}(3\zeta - l) & g + \frac{\rho}{1 + \rho} f & h \end{array} \quad (4.E)$$

El mismo procedimiento seguido hasta ahora permite obtener nuevos sistemas canónicos, según los momentos y parámetros constantes elegidos. Ahora bien, dado que el proceso ha sido suficientemente desarrollado en las páginas anteriores, nos limitaremos a incluir un cuadro de los sistemas obtenidos, con arreglo a las notaciones que figuran a continuación y todas aquellas que han sido expuestas a lo largo de este artículo:

$$u = g + f \quad g_\eta = g + \frac{\eta}{1 + \eta} f \quad g_\rho = g + \frac{\rho}{1 + \rho} f$$

$$g_2 = g_\rho + \frac{2(\zeta - l)}{(1 + \rho)\sqrt{1 - e^2}} \quad g_1 = g_\rho + \frac{\zeta}{(1 + \rho)\sqrt{1 - e^2}}$$

$$\zeta_1 = \zeta - l \quad \zeta_2 = 2\zeta - l \quad \zeta_3 = 3\zeta - l$$

$$f_e = f\sqrt{1 - e^2} \quad f_1 = \int_0^f \frac{df}{1 + \eta} \quad f_2 = \frac{1}{2} \int_0^f \frac{G df}{(1 + \eta)^2}$$

$U =$ momento angular

$F = \rho U$

$G = (1 + \rho) U$

Constantes elegidas		Cuadro de sistemas canónicos					
a)	η, μ	E	U	H	$t - T$	g_η	h
b)	E, η	μ	U	H	s	g_η	h
c)	U, η	E	μ	H	$t - T$	s	h
d)	U, μ	E	η	H	$t - T$	f_2	h
e)	U, E	μ	η	H	s	f_2	h
f)	E, μ	U	η	H	$u - f$	f_2	h
a')	μ, η	L	U	H	l	g_η	h
A)	M, ρ	L	G	H	ζ	g_ρ	h
B)	E, μ	F	G	H	f	g	h
C)	a, ρ	L	G	H	ζ_2	g_ρ	h
D)	p, ρ	L	G	H	l	g_2	h
E)	n, ρ	L	G	H	$\frac{1}{2} \zeta_3$	g_1	h
F)	M, e	L	G	H	$\zeta - f_e$	u	h

SISTEMAS CANONICOS EN MECANICA CELESTE

G)	ρ, e	M	G	H	$a \zeta_1$	g_1	h
H)	L, e	M	G	H	$a \zeta_1$	u	h
I)	μ, e	E	G	H	$(1-f_e)/n$	u	h
J)	a, e	E	G	H	$(1+f_e)/n$	u	h
K)	n, e	M	G	H	$a(\zeta_3 - 2f_e)$	u	h

Los seis primeros son válidos para un movimiento elíptico, parabólico o hiperbólico y los restantes sólo para un movimiento elíptico.

Aun podrían obtenerse otros sistemas, pero en realidad resultarían equivalentes a alguno de los anteriores.

BIBLIOGRAFIA

- H. ANDOYER (1913), Bull. Astron., 30, 425.
 A. DELAUNAY (1860 y 1867), *Theorie du Mouvement de la Lune*. Mem. Acad. Sci. Paris, núm. 28 y núm. 29.
 G. W. HILL (1913), Astron. J., 27, 171 y Astron. J., 67, 171.
 B. JEKHOWSKY (1916), Bull. Astron., 33, 65.
 T. LEVI-CIVITA (1913), Annali Mat. pura appl., ser. 3, 20, 153.
 W. DE SITTER (1913), Proc. Acad. Sci. Amsterdam, 16, 279.
 A. SOUDAN (1955), Bull. Astron., ser 2, 19, 225, 287.

SOBRE EL PROBLEMA DE RESONANCIA IDEAL*

P O R

MANUEL CALVO

Departamento de Física de la Tierra y del Cosmos
Universidad de Zaragoza

Summary

The Ideal Resonance Problem in the sense of Garfinkel is considered giving an analytical solution in the libration region. The problem is described by new dependent and independent variables and then Hori' theory of perturbations is applied to obtain a solution expanded in powers of the squared root of the small parameter.

1. Introducción

En algunos problemas de Mecánica Celeste, cuando se dan ciertas condiciones particulares, aparece el fenómeno de resonancia. En estos casos no son válidas las técnicas habituales para resolver analíticamente las ecuaciones diferenciales del problema debido a la aparición de pequeños divisores y es necesario hacer un estudio especial en las condiciones de resonancia.

Garfinkel (1966) ha visto que buen número de estos problemas (inclinación crítica, satélite de 24 h.) se pueden reducir a la resolución de un sistema canónico de un grado de libertad dado por las ecuaciones

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial K}{\partial y} \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial x} \quad (1)$$

cuya función hamiltoniana $K(x, y; \epsilon)$ es de la forma

$$K(x, y; \epsilon) = B(x) + 2\epsilon A(x) \text{sen}^2 y \quad (1')$$

donde ϵ es un pequeño parámetro positivo y $A(x)$ es una función positiva. El problema de resonancia aparece asociado con la anulacion de la derivada primera de la función B para algún valor particular de x . Entonces si tratamos de resolver el sistema (1) eliminando la variable angular y del hamiltoniano (1') usando cualquier teoría habitual de perturbaciones (V. Zeipel, Deprit, Hori) los generadores y las ecuaciones de transformación tienen $B'(x)$ como denominador, por lo tanto la solución no resulta válida para x próximo a x_0 .

* Este trabajo fue presentado a las Jornadas Matemáticas Hispano-Lusas de 1973.

Se han propuesto distintos procedimientos para obtener la solución en las proximidades de resonancia, cuya característica común es el proporcionar la solución en potencias de la raíz cuadrada del pequeño parámetro. Garfinkel (1966, 71) aplicó el método de Von Zeipel utilizando una función generatriz desarrollable en serie de potencias de la raíz cuadrada del pequeño parámetro. A. Jupp (1969, 70, 71) usando un sistema de variables propuesto por Poincare para un problema semejante ha visto que el problema es regular al formularlo en dichas variables pudiendo aplicar entonces cualquier teoría de perturbaciones para obtener la solución del problema.

Nuestro trabajo pretende obtener una solución analítica del problema de resonancia en la región de libración. Con este objeto formulamos el problema en unas variables no canónicas que eliminan la singularidad de resonancia y seguidamente empleando una adecuada variable independiente se consigue la forma canónica de las ecuaciones. En estas condiciones aplicamos el método de Hori y se obtiene así una solución del problema; los resultados se desarrollan explícitamente hasta primer orden mostrando la posibilidad de extenderlos a órdenes superiores.

2 Problema normal

Consideremos el problema de resonancia normal (Garfinkel 1966) que está caracterizado por las siguientes condiciones:

- i) Existe un valor constante x_0 tal que $B'(x_0) = 0$.
- ii) $B''(x_0) > 0$.
- iii) Los posibles ceros de $B''(x)$ y $A(x)$ están suficientemente alejados de x_0 de modo que puedan ser ignorados.

Las soluciones de equilibrio del sistema (1) son los valores de x, y que verifican

$$K_x = K_y = 0 \quad (2)$$

hay soluciones de dos tipos

$$y = n\pi, \quad x = x_0 \quad (3)$$

$$y = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad x = x_1 \quad \text{tal que} \quad B(x_1) + 2\epsilon A(x_1) = 0 \quad (4)$$

con n entero. Las soluciones del tipo (3) son centros de libración, mientras que (4) son puntos de ensilladura. En el espacio fásico (x, y) las trayectorias solución alrededor del centro de libración son curvas cerradas cuya ecuación es $K(x, y) = \text{const}$. Estas trayectorias cerradas tienen como límite la que pasa por el punto de ensilladura y separa las regiones de circulación y libración. Por el momento nos limitaremos a órbitas de libración en la región que contiene al punto $(x_0, 0)$. Haciendo los cambios de variable

$$x = x_0 - \sqrt{\epsilon} \tilde{x}, \quad y = \tilde{y}, \quad \nu t = \tau, \quad \nu = \sqrt{\epsilon} \quad (5)$$

la ecuaciones diferenciales en las nuevas variables tienen forma ecanónica con la hamiltoniana

$$\tilde{K} = \nu^{-2} K(x_0 + \sqrt{\nu} \tilde{x}, \tilde{y}) = B(x_0 + \sqrt{\nu} \tilde{x}) - 2\nu^2 A(x_0 + \sqrt{\nu} \tilde{x}) \text{sen}^2 \tilde{y} \quad (6)$$

desarrollando en potencias del parámetro ν y prescindiendo del término constante de la hamiltoniana, tendremos

$$\tilde{K} = \sum_{n \geq 0} \nu^n \left[\left(\frac{B_0^{(n+2)}}{(n+2)!} \right) \tilde{x}^{n+2} + \left(\frac{2A_0^{(n)}}{n!} \right) \tilde{x}^n \text{sen}^2 \tilde{y} \right] \quad (7)$$

por tanto en las variables x, y el sistema tiene por ecuaciones

$$\frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \tilde{y}} \qquad \frac{d\tilde{y}}{d\tau} = -\frac{\partial \tilde{K}}{\partial \tilde{x}} \qquad (8)$$

con la función hamiltoniana \tilde{K} dada por (7)

3. Nuevas variables

Sean δ, ψ nuevas variables definidas por las ecuaciones

$$\begin{aligned} \text{sen } \tilde{y} &= \delta \text{ sen } \psi & \delta > 0 \\ \tilde{x} &= \lambda \delta \text{ cos } \psi \end{aligned} \qquad (9)$$

siendo λ constante positiva cuyo valor se fijará más adelante. Desde (9) se obtiene para δ

$$\delta = (\text{sen}^2 \tilde{y} + \tilde{x}^2/\lambda^2)^{1/2} > 0$$

Fácilmente se aprecian las características geométricas de la transformación: en el plano $(\tilde{x}, \text{sen } \tilde{y})$ las curvas $\delta = \text{constante}$ son elipses y las $\psi = \text{constantes}$ rectas pasando por el origen.

En primer lugar calcularemos las ecuaciones diferenciales en las nuevas variables δ, ψ . Derivando las expresiones (9) y despejando

$$\frac{d\delta}{d\tau} = \text{sen } \psi \cos \psi \frac{d\tilde{y}}{d\tau} + \cos \psi \frac{1}{\lambda} \frac{d\tilde{x}}{d\tau} \qquad (10)$$

$$\delta \frac{d\psi}{d\tau} = \cos \psi \cos \psi \frac{d\tilde{y}}{d\tau} - \text{sen } \psi \frac{1}{\lambda} \frac{d\tilde{x}}{d\tau}$$

pero

$$\frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \frac{\partial K}{\partial \tilde{y}} = \frac{\cos \psi}{\delta} \left[\delta \text{ sen } \psi \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \delta} + \cos \psi \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \psi} \right]$$

$$\frac{d\tilde{y}}{d\tau} = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{x}} = -\frac{1}{\lambda \delta} \left[\delta \cos \psi \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \delta} - \text{sen } \psi \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \psi} \right]$$

La función \tilde{K} se supone expresada en función de δ, ψ mediante (9). Sustituyendo estas expresiones en (10) y simplificando se tiene

$$\frac{d\delta}{d\tau} = \frac{\cos \tilde{y}}{\lambda \delta} \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \psi} \qquad (11)$$

$$\frac{d\delta}{d\tau} = -\frac{\cos \tilde{y}}{\lambda \delta} \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \psi}$$

A la vista de estas ecuaciones parece natural introducir una nueva variable independiente s mediante

$$\frac{ds}{d\tau} = \frac{\cos \psi}{\lambda \delta} = \frac{\sqrt{1 - \delta^2 \sin^2 \psi}}{\lambda \delta} \quad (12)$$

con la condición $s = 0$ para $\tau = 0$. Entonces las ecuaciones (11) quedan

$$\frac{d\delta}{ds} = \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \psi} \quad \frac{d\psi}{ds} = -\frac{\partial \tilde{K}}{\partial \delta} \quad (13)$$

Para obtener la función hamiltoniana en las variables δ, ψ basta sustituir (9) en (7) y así tendremos

$$\tilde{K}(\delta, \psi) = \sum v^n \tilde{K}_n = \sum v^n \cos^n \psi \delta^{n+2} (\alpha_n \cos^2 \psi + \beta_n \sin^2 \psi) \quad (14)$$

donde α_n, β_n son constantes dadas por

$$\alpha_n = \frac{B_0^{(n+2)} \lambda^{n+2}}{(n+2)!} \quad \beta_n = \frac{A_0^{(n)} \lambda^n}{n!} \quad (15)$$

Elegiremos λ de modo que el término de orden cero del hamiltoniano dependa exclusivamente de δ

$$\tilde{K}_0 = \delta^2 (\alpha_0 \cos^2 \psi + \beta_0 \sin^2 \psi) = \delta^2 \left[\frac{B_0^{(2)}}{2} \lambda^2 \cos^2 \psi + A_0 \sin^2 \psi \right]$$

luego deberemos tomar

$$\lambda^2 = \frac{2A_0}{B_0^{(2)}} > 0 \quad (16)$$

con lo cual $\tilde{K}_0 = A_0 \delta^2$. Al sistema (13) con el hamiltoniano (14) le aplicaremos el método de Hori para eliminar la variable ψ .

4. Aplicación del método de Hori

En este método se emplean transformaciones de la forma

$$\delta = \bar{\delta} + \sum_{n \geq 0} \frac{v^n}{n!} L_s^{(n)} \bar{\delta} \quad (17)$$

$$\psi = \bar{\psi} + \sum_{n \geq 0} \frac{v^n}{n!} L_s^{(n)} \bar{\psi}$$

donde la función generatriz $S = S(\bar{\delta}, \bar{\psi}; v)$ se expresa como una serie de potencias en el pequeño parámetro

$$S = \sum_{n \geq 0} v^n S_{n+1}(\bar{\delta}, \bar{\psi}) \quad (18)$$

y L_S es el operador de Lie definido por

$$L_S f(\bar{\delta}, \bar{\psi}) = L_S^{(1)} f = (f; S) = \frac{\partial f}{\partial \bar{\delta}} \frac{\partial S}{\partial \bar{\psi}} - \frac{\partial f}{\partial \bar{\psi}} \frac{\partial S}{\partial \bar{\delta}}$$

$$L_S^{(k)} f = L_S(L_S^{(k-1)} f)$$

La transformada de una función escalar $f(\delta, \psi)$ por (18) puede obtenerse mediante la fórmula

$$f(\delta, \psi) = f(\bar{\delta}, \bar{\psi}) + \sum_{n \geq 0} \frac{v^n}{n!} L_S^{(n)} f(\bar{\delta}, \bar{\psi}) = f(\bar{\delta}, \bar{\psi}) + v(f; S_1) + v^2 [(f; S_2) + \frac{1}{2}((f; S_1); S_1)] + \dots \quad (19)$$

Supuesto un sistema canónico cuya función hamiltoniana está dada por

$$\tilde{K} = \sum_{n \geq 0} v^n K_n(\delta, \psi)$$

al efectuar la transformación (17) se convierte en otro, cuya función correspondiente $\tilde{K}^* = \tilde{K}$ será de la forma

$$\tilde{K}^* = \sum_{n \geq 0} v^n \tilde{K}_n^*(\bar{\delta}, \bar{\psi})$$

las funciones $\tilde{K}_i, \tilde{K}_i^*, S_i$ en los primeros órdenes están relacionados por las ecuaciones:

Orden 0: $\tilde{K}_0 = \tilde{K}_0^*$

Orden 1: $(\tilde{K}_0; S_1) + \tilde{K}_1 = \tilde{K}_1^*$

Orden 2: $(\tilde{K}_0; S_2) + (\tilde{K}_1; S_1) + \frac{1}{2}((\tilde{K}_0; S_1); S_1) + \tilde{K}_2 = \tilde{K}_2^*$

En nuestro problema las funciones \tilde{K}_i de acuerdo con (14) y (16) están dadas por

$$\tilde{K}_0 = A_0 \delta^2 \quad (20)$$

$$\tilde{K}_n = \delta^{n+2} \cos^n \psi (\alpha_n \cos^2 \psi + \beta_n \sin^2 \psi)$$

en orden cero se tiene

$$\tilde{K}_0^* = \tilde{K}_0(\bar{\delta}) = A_0 \bar{\delta}^2 \quad (21)$$

Para primer orden elegiremos \tilde{K}_1 de modo que agote los términos seculares de \tilde{K}_1 , por tanto

$$\tilde{K}_1^* = [\delta^3 \cos \psi (\alpha_1 \cos^2 \psi + \beta_1 \sin^2 \psi)]_{\text{sec}} = 0 \quad (22)$$

y S_1 debe ser obtenida como solución de la ecuación en derivadas parciales

$$(\tilde{K}_0; S_1) = -\tilde{K}_1 \quad (23)$$

o bien

$$2 A_0 \delta \frac{\partial S_1}{\partial \psi} = \delta^3 [\eta_1 \cos \psi + \eta_2 \cos 3 \psi] \quad (24)$$

$$\eta_1 = \frac{3 \alpha_1 + \beta_1}{4} \qquad \eta_2 = \frac{\alpha_1 - \beta_1}{4}$$

luego

$$S_1(\bar{\delta}, \bar{\psi}) = \frac{\delta^2}{2A_0} \left[\eta_1 \bar{\psi} + \frac{\eta_2}{3} \bar{\psi}^3 \right] \quad (25)$$

La ecuación de segundo orden puede ser simplificada mediante (23) quedando

$$(\tilde{K}_0; S_2) = -[\frac{1}{2}(\tilde{K}_1; S_1) + \tilde{K}_2] + \tilde{K}_2^* \quad (26)$$

debiendo elegir \tilde{K}_2^* de modo que anule los términos seculares del segundo miembro; con este criterio hechas las oportunas operaciones

$$\tilde{K}_2^* = C_1 \bar{\delta}^4 = \left[\frac{5(\eta_1^2 + \eta_2^2)}{8A_0} + \frac{3\alpha_2 + \beta_2}{8} \right] \bar{\delta}^4 \quad (27)$$

las ecuaciones en las nuevas variables tienen la hamiltoniana

$$\tilde{K}^* = \tilde{K}_0^* + v^2 \tilde{K}_2^* + O(v^2) \quad (28)$$

con las funciones \tilde{K}_0^* , \tilde{K}_2^* dadas por (21) (27). La resolución del sistema canónico correspondiente a la hamiltoniana (28) es inmediata, siendo

$$\begin{aligned} \bar{\delta} &= \text{constante} \\ \bar{\psi} &= \bar{\delta}(-4A_0 - v^2 \delta^2 C_1) s + \bar{\psi}_0 = \bar{\delta} \omega s + \bar{\psi}_0 \end{aligned} \quad (29)$$

Las dos constantes de integración son $\bar{\delta}$, $\bar{\psi}_0$. Por las fórmulas (17) la solución en las variables δ , ψ resulta

$$\begin{aligned} \delta &= \bar{\delta} + v \frac{\partial S_1}{\partial \bar{\psi}} + o(v) = \bar{\delta} + v \frac{\delta^2}{2A_0} [\eta_1 \cos \bar{\psi} + \eta_2 \cos 3\bar{\psi}] + o(v) \\ \psi &= \bar{\psi} - v \frac{\partial S_1}{\partial \bar{\delta}} + o(v) = \bar{\psi} - v \frac{\delta}{3} \left[\eta_1 \bar{\psi} + \frac{\eta_2}{3} \bar{\psi}^3 \right] + o(v) \end{aligned} \quad (30)$$

con $\bar{\delta}$, $\bar{\psi}$ dadas por (29). Las ecuaciones (9), (29) y (30) nos dan de un modo explícito la solución del problema en función de la nueva variable independiente s . Nos falta por último establecer la relación integral entre las variables s y τ ($= vt$) o lo que es más conveniente entre $\bar{\psi}$ y τ , ya que (30) aparece dada de un modo explícito en función de $\bar{\psi}$. Desde (12)

$$\frac{d\tau}{ds} = \frac{\lambda \bar{\delta}}{\sqrt{1 - \bar{\delta}^2 \bar{\psi}^2}}$$

La función del segundo miembro puede ser expresada en las variables canónicas δ , ψ utilizando la fórmula (19) de la transformación de una función escalar, y así tendremos

$$\frac{d\tau}{d\tau} = \frac{\lambda \bar{\delta}}{\sqrt{1 - \bar{\delta}^2 \bar{\psi}^2}} + v \frac{\lambda \bar{\delta}^3 \cos \bar{\psi}}{A_0 (1 - \bar{\delta}^2 \bar{\psi}^2)^{3/2}} \left[\alpha_1 - (4\eta_2 + \delta^2 \alpha_1) \bar{\psi}^2 + \frac{4\eta_2}{3} \bar{\delta}^2 \bar{\psi}^4 \right] + o(v)$$

Por otra parte

$$\frac{d\tau}{ds} = \frac{d\tau}{d\bar{\psi}} \frac{d\bar{\psi}}{ds} = \bar{\delta} \omega \frac{d\tau}{d\bar{\psi}}$$

de ambas se deduce

$$d \left[\frac{\omega}{\lambda} \tau \right] = \frac{d \bar{\psi}}{\sqrt{1 - \bar{\delta}^2 \sin^2 \bar{\psi}}} + \nu \Omega(\bar{\psi}, \bar{\delta}) d \bar{\psi} + o(\nu) \quad (31)$$

donde

$$\Omega(\bar{\psi}, \bar{\delta}) = \frac{\bar{\delta} \cos \bar{\psi}}{A_0 (1 - \bar{\delta}^2 \sin^2 \bar{\psi})^{3/2}} \left[\alpha_1 - (4 \eta_2 + \bar{\delta}^2 \alpha_1) \sin^2 \bar{\psi} + \frac{4 \eta_2}{3} \bar{\delta}^2 \sin^4 \bar{\psi} \right] \quad (32)$$

Las condiciones iniciales son para $\tau = 0$, $\bar{\psi} = \bar{\psi}_0$. La ecuación (31) puede ser integrada completamente, pero en la práctica resulta más conveniente proceder iterativamente de manera parecida al caso de la ecuación de Kepler; para ello observemos que (31) puede escribirse en forma integral

$$\bar{\psi} - \bar{\psi}_0 = \text{am} \left(\frac{\omega}{\lambda} \tau - \nu \int_{\bar{\psi}_0}^{\bar{\psi}} \Omega(\psi, \delta) d\psi, \delta \right) \quad (33)$$

Entonces partiendo del valor aproximado $\bar{\psi}_a$ dado por

$$\bar{\psi}_a - \bar{\psi}_0 = \text{am} \left(\frac{\omega}{\lambda} \tau, \delta \right)$$

y sustituyendo éste en el segundo miembro de (33) se llega rápidamente a una solución suficientemente aproximada.

Para libraciones de pequeña amplitud, la constante $\bar{\delta}$ resulta pequeña, entonces para evitar el manejo de la función amplitud resulta conveniente desarrollar el segundo miembro de (31) en potencias de $\bar{\delta}$ y retener términos hasta el orden que interese.

La aplicación del método puede extenderse a órdenes superiores, daremos algunas características generales de los resultados de órdenes superiores:

a) De acuerdo con (14) \tilde{K}_n ($n \geq 1$) es una expresión en $\cos \psi$ que tiene las potencias $n + 2$ y n exclusivamente, por tanto para n impar su valor medio es nulo y para n par es no nulo, además \tilde{K}_n es siempre una función par $K_n(\psi) = \tilde{K}_n(-\psi)$. La función \tilde{K}_0 sólo depende de δ .

b) S_n es una función de grado $3n$ en $\sin \psi$ o $\cos \psi$ indistintamente. La demostración puede hacerse por inducción: es cierta para $n = 1$; supongámosla cierta para $n - 1$, la ecuación que sirve para determinar S_n es

$$(\tilde{K}_0; S_n) + \dots + \tilde{K}_n = \tilde{K}_n^* \quad (34)$$

en donde los puntos suspensivos indican combinaciones de paréntesis de Poisson cuya suma de subíndices es n . Puede verse que si f_1 es una expresión como máximo de grado p en $\sin \psi$ $\cos \psi$ y f_2 es de grado q el paréntesis de Poisson $(f_1; f_2)$ lo es de grado $p + q$. Mediante esta propiedad se evidencia que los paréntesis de Poisson omitidos en (34) son de grado $3n$ y como K_n es de grado $n + 2$ ($3n$) al integrar (34) y obtener S_n resulta de grado $3n$.

c) S_n es una función impar de ψ , es decir $S_n(\psi) = -S_n(-\psi)$. La demostración puede hacerse también por inducción. La propiedad es satisfecha para $n = 1$, y supuesta cierta hasta $n - 1$, si cambiamos ψ por $-\psi$ en (34) se deduce

$$(\tilde{K}_0; S_n)|_{\psi \rightarrow -\psi} = (\tilde{K}_0; S_n)|_{\psi \rightarrow \psi}$$

de donde resulta la propiedad.

De acuerdo con estos resultados podemos asegurar que las funciones S_n tendrán la forma

$$\begin{aligned} S_1 &= a_1 \operatorname{sen} \psi + a_3 \operatorname{sen} 3 \psi \\ S_2 &= b_2 \operatorname{sen} 2 \psi + b_4 \operatorname{sen} 4 \psi + b_6 \operatorname{sen} 6 \psi \end{aligned}$$

en general cualquier S_n tendrá las frecuencias $3n, 3n-2, \dots$ Por otra parte las funciones \tilde{K}_n^* que se obtienen al tomar los valores medios de los primeros miembros serán nulas para n impar y no nulas en el caso contrario, luego

$$\tilde{K}^*(\bar{\delta}) = \tilde{K}_0^*(\bar{\delta}) + \nu^2 \tilde{K}_2^*(\bar{\delta}) + \dots$$

de esta manera puede asegurarse la forma de la solución al extender el método a órdenes superiores.

REFERENCIAS

- GARFINKEL, B., 1966: *Astron. Jour.* 71, 657-669.
 GARFINKEL, B., JUPP and WILLIAMS: 1971, *Astron. Jour.* 76, 157.
 HORI, G. I.: 1966, *Publ. Astron. Soc. of Japan* 18, 287.
 JUPP, A. H.: 1969, *Astron. Jour.* 74, 35.
 JUPP, A. H.: 1970, *Montly Notices Roy. Astron. Sec.* 148, 187-210.

TRANSFORMACIONES CANONICAS EN OPTIMIZACION DE TRAYECTORIAS*

P O R

V. CAMARENA

Departamento de Física de la Tierra y del Cosmos
Universidad de Zaragoza (España)

Abstract

On define some special canonical transformations increasing the number of variables, giving explicit conditions to retain the hamiltonian form of a system of differential equations. This conditions are applied to obtain the primer vector of Lawden in terms of a special set of orbital elements.

Key-words: Canonical transformations-Optimal trajectories.

1. Transformaciones canónicas

Sean q y p n -vectores del espacio euclídeo n -dimensional E^n asociados con la función hamiltoniana $H = H(q, p, t)$, y sea t el parámetro tiempo. Supongamos que Q y P son m -vectores del espacio E^m ($m > n$), tales que

$$\begin{cases} Q = Q(q, p, t) \\ P = P(q, p, t) \end{cases} \quad (1.1)$$

define una transformación de coordenadas y momentos de clase C^2 ; y que además verifica las condiciones del teorema de las funciones implícitas, de forma que la transformación (1.1) sea inversible. Es decir,

$$\begin{cases} q = q(Q, P, t) \\ p = p(Q, P, t) \end{cases} \quad (1.2)$$

y donde las Q y P verifican p relaciones de ligadura

$$\Phi_j(Q, P, t) = 0, \quad j = 1, \dots, p \quad (1.3)$$

Lo cual equivale a suponer que la transformación (1.1) es inversible para los (P, Q) pertenecientes a la variedad V_{2m} , engendrada por las funciones $\Phi_j(Q, P, t) = 0$, $j = 1, \dots, p$. Precisemos un poco más estas hipótesis.

* Este trabajo fue presentado a las II Jornadas Matemáticas Hispano-Lusas. Madrid, abril de 1973.

Sea $x = (q, p)$ un elemento del conjunto $X \subset E^{2n}$, e $y = (Q, P) \in Y \subset E^{2m}$ ($m > n$) su imagen por la aplicación $f: X \rightarrow Y$ definida por la relación

$$y = y(x, t)$$

Entonces, si suponemos que f es inyectiva existe una aplicación $g: Y \rightarrow X$ tal que

$$(gof) = 1_X \quad (\text{identidad en } X)$$

y recíprocamente. Si además suponemos que tanto f como g son funciones diferenciables, podemos aplicar el teorema de derivación de las funciones compuestas y obtenemos

$$J_f J_g = I_{2n} \tag{1.4}$$

donde I_{2n} es la matriz unidad en E^{2n} , $J = \partial y / \partial x = y_x$ e $J_f = \partial x / \partial y = x_y$ son las respectivas matrices jacobianas de las transformaciones asociadas a f y g .

1.1. Definición

Diremos que la transformación (1.1) es canónica si conserva la forma hamiltoniana de las ecuaciones del movimiento. Es decir, si para toda función hamiltoniana $H(q, p, t)$ existe una función escalar $K(Q, P, t)$ tal que el sistema canónico

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{1.5}_1$$

se transforme en este otro

$$\dot{Q} = \frac{\partial K}{\partial P} \qquad \dot{P} = -\frac{\partial K}{\partial Q} \tag{1.5}_2$$

Consideremos la transformación $x = x(y, t)$ dada por (1.2), y supongamos que el jacobiano J_f de dicha transformación sea de rango máximo $2n$. Si $H = H(q, p, t)$ es el hamiltoniano del sistema en las variables x , las ecuaciones canónicas del citado sistema dinámico son:

$$\begin{cases} \dot{q}^i = \{H, q^i\} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = \{H, p_i\} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n \tag{1.6}$$

donde $\{H, q^i\}$ y $\{H, p_i\}$ son los paréntesis de Poisson de los argumentos que figuran en su interior.

Recordemos que el paréntesis de Poisson $\{f, g\}$ de un par de funciones f y g , dependientes de x , viene dado por la expresión:

$$\{f, g\} = \sum_{i, k} G_{ik} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_k} \tag{1.7}$$

$$i, k = 1, 2, \dots, 2n$$

donde las G_{ik} son los elementos de la matriz G_n dada por la fórmula

$$G_n = \begin{pmatrix} O_n & I_n \\ -I_n & O_n \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

siendo O_n e I_n las matrices nula y unidad en E^n .

Nuestro objetivo es encontrar las condiciones bajo las cuales la transformación (1.2) transforma el sistema hamiltoniano (1.6) en el

$$\begin{cases} \dot{Q}^j = \{K, Q^j\} = \frac{\partial K}{\partial P_j} \\ \dot{P}_j = \{K, P_j\} = -\frac{\partial K}{\partial Q^j} \end{cases} \quad j = 1, \dots, m \quad (1.9)$$

1.2. Teorema

Si $Q(t), P(t)$ es una solución del sistema canónico (1.9), que pertenece a la variedad V_{2m} , engendrada por las p relaciones de ligadura $\Phi_j(Q, P, t) = 0, j = 1, \dots, p$, entonces supuesto que se verifican, sobre dicha variedad, las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} \{q^i, q^k\}(t) &= \{p_i, p_k\}(t) = 0 \\ \{p_i, q^k\}(t) &= \delta_i^k \end{aligned} \quad (1.10)$$

las funciones $q(t)$ y $p(t)$ obtenidas de (1.2), teniendo en cuenta las soluciones de (1.9), verifican el sistema canónico antiguo (1.6).

Dem.: Puede comprobarse fácilmente que las condiciones (1.10) equivalen a que la matriz jacobiana verifique la relación:

$$J_t G_m J_t' = G_n \quad (1.11)$$

donde $(\cdot)'$ indica la traspuesta de una matriz.

A una matriz que verifique la (1.11) le llamaremos g -simplética.

Comprobemos, por otra parte, que los paréntesis de Poisson son invariantes; es decir, que para dos funciones f y g diferenciables se verifica

$$\{f, g\}_{p, q} = \{f, g\}_{p, q} \quad (1.12)$$

En efecto, se tiene

$$\begin{aligned} \{f, g\}_{p, q} &= \sum_{j, k} G_{jk} \frac{\partial f}{\partial y_j} \frac{\partial g}{\partial y_k} = \sum_{j, k} G_{jk} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial y_j} \frac{\partial g}{\partial y_h} \frac{\partial y_h}{\partial x_k} \\ &= \sum_{i, k} (J_t)_{ij} G_{jk} (J_t')_{kh} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_h} \end{aligned}$$

y como por la (1.11) se verifica que

$$(J_t)_{ij} G_{jk} (J_t')_{kh} = G_{ih}$$

resulta

$$\{f, g\}_{p, q} = \sum_{i, h} G_{ih} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_h} = \{f, g\}_{p, q}$$

De esta igualdad, y del hecho de que $K(Q(q, p, t), P(q, p, t), t) = H(q, p, t)$ para los $y = (Q, P)$ pertenecientes a la variedad V_{2m} , se deducen las conclusiones del teorema.

1.2. Teorema-bis

Si $q(t), p(t)$ es una solución del sistema canónico (1.6); entonces, si se verifican las condiciones

$$\begin{aligned} \{Q^i, Q^k\}(t) &= \{P_i, P_k\}(t) = 0 \\ \{P_i, Q^k\}(t) &= \delta_i^k \end{aligned} \tag{1.13}$$

las $Q(t)$ y $P(t)$ obtenidas de (1.1), que verifican las relaciones de ligadura (1.3), son soluciones del sistema canónico (1.9).

Dem.: En efecto, las condiciones (1.13) son equivalentes a que la matriz jacobiana J verifique la relación

$$J G_n J^t = G_m \tag{1.14}$$

lo cual equivale a decir, según la nomenclatura utilizada antes, que la matriz J es f -simplética. Y procediendo de forma similar a la del teorema anterior, se demuestra la invariancia de los paréntesis de Poisson; en el sentido de que

$$\{f, g\}_{p, n} = \{f, g\}_{p, o}$$

cualesquiera que sean las funciones diferenciables f y g .

Teniendo en cuenta este hecho, y la forma del sistema canónico (1.6) se deducen las conclusiones de este teorema.

Resumiendo todo cuanto llevamos dicho en este párrafo, podemos afirmar: que la transformación $y = y(x, t)$ de E^{2n} en la variedad V_{2n} es canónica, si la matriz jacobiana J es f -simplética; mientras que la transformación $x = x(y, t)$ de V_{2n} en E^{2n} es canónica, si la matriz J_1 es g -simplética. Vemos pues, que las condiciones clásicas de transformación canónica se generaliza al caso de transformaciones $y = y(x, t)$ de E^{2n} en E^{2m} ($m > n$) con relaciones de ligadura entre las y , exigiendo que las matrices jacobianas J y J_1 sean f y g -simpléticas respectivamente.

1.3. Teorema

Una condición suficiente para que la transformación $y = y(x, t)$ de $X \subset E^{2n}$ en la variedad $V_{2n} \subseteq E^{2m}$ (engendrada por las funciones $\Phi_j(y, t) = 0, j = 1, \dots, p$) sea canónica, es que

$$\sum_{i=1}^n p_i dq^i - H dt = \sum_{i=1}^n P_i dQ^i - K dt + dS \tag{1.15}$$

donde

$$K = H(q(Q, P, t), p(Q, P, t), t) + \sum_{k=1}^p \lambda_k \Phi_k + \frac{\partial S}{\partial t} \tag{1.16}$$

es la nueva función hamiltoniana

$$S = S(q, Q, t)$$

es la denominada función generatriz de la transformación, y los λ_k son multiplicadores a determinar.

Dem.: Es bien conocido, que las trayectorias $q^i(t), p_i(t); i = 1, \dots, n$ solución del sistema canónico

$$\begin{cases} \dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{cases} \quad i = 1, \dots, n \tag{1.17}$$

son aquellas que verifican

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left[\sum_{i=1}^m p_i \dot{q}^i - H(p, q, t) \right] dt = 0 \quad (1.18)$$

Supongamos ahora que se efectúa la correspondiente transformación $y = y(x, t)$, explicitada por las relaciones siguientes:

$$\begin{cases} P_i = P_i(q, p, t) & i = 1, \dots, m \\ Q^i = Q^i(q, p, t) \\ O = \Phi_k(Q, P, t) & k = 1, \dots, p \end{cases} \quad (1.19)$$

Entonces, si esta transformación es tal que se verifica la (1.15), o bien el siguiente par de relaciones equivalentes

$$\delta S = \sum_{i=1}^m p_i \delta q^i - \sum_{j=1}^m P_j \delta Q^j \quad (1.20)$$

$$K = \frac{\partial S}{\partial t} + H \left(= H \text{ si } \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \right)$$

(resultantes de la (1.15), tomando t como variable independiente), dicha transformación es canónica. Es decir, el problema variacional

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m P_j dQ^j - K(P, Q, t) dt = 0 \quad (1.21)$$

es equivalente al (1.18). Lo cual significa que las ecuaciones que verifican (1.21) son las mismas que verifican (1.18).

En efecto,

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\sum_{j=1}^m P_j \dot{Q}^j - K \right) dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m \left(\delta P_j \dot{Q}^j + P_j \delta \dot{Q}^j - \frac{\partial K}{\partial Q^j} \delta Q^j - \frac{\partial K}{\partial P_j} \delta P_j \right) dt$$

Ahora bien, si integramos por partes, el término

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m P_j \delta \dot{Q}^j &= \sum_{j=1}^m P_j \delta Q^j \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m \dot{P}_j \delta Q^j \\ &= - \int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m \dot{P}_j \delta Q^j \quad (\text{por ser los extremos fijos}) \end{aligned}$$

Luego nos queda

$$\int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m \left[\delta P_j \left(\dot{Q}^j - \frac{\partial K}{\partial P_j} \right) - \delta Q^j \left(\dot{P}_j + \frac{\partial K}{\partial Q^j} \right) \right] dt = 0 \quad (1.22)$$

Y como esta condición se debe verificar para variaciones δP_j y δQ^j arbitrarias, que cumplan las relaciones de ligadura $\Phi_k(Q, P, t) = 0$; $k = 1, \dots, p$; tendremos

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial P_j} \delta P_j + \frac{\partial \Phi_k}{\partial Q^j} \delta Q^j \right) = 0; \quad k = 1, \dots, p = 2r \quad (1.23)$$

Así pues, elegimos las variaciones ($\delta Q^1, \dots, \delta Q^n, \delta P_1, \dots, \delta P_n$) como independientes, las $\delta Q^{n+i}, \delta P_{n+i}; i = 1, \dots, p/2$ quedan determinadas por las relaciones (1.23). Con todo ello podemos escribir

$$\int_{t_0}^{t_1} \sum_{j=1}^m \left[\delta P_j \left(\dot{Q}^j - \frac{\partial K}{\partial P_j} - \sum_{k=1}^p \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial P_j} \right) - \delta Q^j \left(\dot{P}^j + \frac{\partial K}{\partial Q^j} + \sum_{k=1}^p \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial Q^j} \right) \right] dt = 0$$

Si elegimos los $\lambda_k (k = 1, \dots, p)$ de forma que los coeficientes de δP_{n+i} y δQ^{n+i} ($i = 1, \dots, r$) sean nulos, entonces también los coeficientes de las δP_j y $\delta Q^j (j = 1, \dots, n)$ son nulos. Con lo cual resulta el siguiente sistema canónico, en las nuevas variables

$$\begin{cases} \dot{Q}^j = \frac{\partial K}{\partial P_j} + \sum_{k=1}^p \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial P_j} & j = 1, \dots, m \\ \dot{P}^j = -\frac{\partial K}{\partial Q^j} - \sum_{k=1}^p \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial Q^j} & m = n + r \end{cases} \quad (1.24)$$

2. Transformaciones canónicas e invariantes integrales

El propósito de este párrafo es dar otra demostración de 1.3-Teorema tomando como base el cálculo exterior y la teoría de invariantes integrales de E. Cartan; si bien en nuestro estudio nos hemos apoyado, más bien, en el libro de H. Flanders (Differential Forms, Academic Press, 1963).

Espacios de estados y de las fases

Supongamos un sistema dinámico holónomo con un número finito de grados de libertad. El *espacio de posición* es una variedad n -dimensional M supuesto que n es el número de grados de libertad del sistema.

Consideremos las cartas locales (U, q) de M , cuyas coordenadas son

$$q = (q^1, \dots, q^n)$$

En un punto $A \in U$, un vector covariante p es una 1-forma α en A , dado por sus componentes $p = (p_1, \dots, p_n)$ de forma que

$$\alpha = \sum_{i=1}^n p_i dq^i$$

Si $(Q^1, \dots, Q^m), m > n$, es otro sistema de coordenadas válido en A , donde suponemos que entre las Q^j existen r relaciones de ligadura de la forma

$$\Phi_k(Q) = 0, \quad k = 1, \dots, r \quad (2.1)$$

$$Q = (Q^1, \dots, Q^m)$$

Entonces, las componentes del mismo vector covariante respecto del sistema coordinado (Q^j) son:

$$P_j = \sum_{i=1}^n p_i \frac{\partial q^i}{\partial Q^j} \quad (2.2)$$

$$j = 1, \dots, m$$

El conjunto de todos esos vectores covariantes, en todo M , constituye el $2n$ -dimensional espacio fásico P , de forma que a cada $U \subset M$, con coordenadas locales (q^i) , le corresponde el entorno coordinado $U \times R^n$ con coordenadas locales

$$(q^i, p_i), \quad i = 1, \dots, n$$

Así pues, la 1-forma $\alpha = \sum_{i=1}^n p_i dq^i$ sobre P es independiente de las coordenadas. Además

$$d\alpha = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq^i \tag{2.3}$$

donde d indica la diferencial exterior de la 1-forma α .

Llamaremos espacio de estados al conjunto $E = P \times E^1$. Es decir, un $(2n + 1)$ -dimensional espacio, cuyas coordenadas locales son:

$$(q^i, p_i, t), \quad i = 1, \dots, n$$

2.1. Definición

Una s -forma diferencial α sobre el espacio de estados E , se dice que es un invariante integral; si para cada familia de trayectorias p -paramétricas dadas por una aplicación

$$\Psi \begin{cases} q^i = q^i(x_1, \dots, x_p, t) \\ p_i = p_i(x_1, \dots, x_p, t) \end{cases}$$

$\psi^*(\alpha)$ es una s -forma diferencial sobre el espacio de las $x = (x_1, \dots, x_p)$ tan sólo. Y donde con $\psi^*(\alpha)$ denotamos la imagen de la s -forma diferencial α por la aplicación ψ , que se denomina imagen traspuesta de α por ψ . Sea $H = H(q^1, \dots, q^n; p_1, \dots, p_n, t)$ una función definida en el espacio de estados E , y que no es más que la llamada hamiltoniana del movimiento. Las ecuaciones canónicas del movimiento de nuestro sistema holónomo son

$$\begin{cases} \dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n \tag{2.4}$$

y que representan, como sabemos, las ecuaciones características de la 2-forma diferencial exterior dw , dada por la expresión

$$dw = \sum_{i=1}^n dp_i dq^i - dH dt \tag{2.5}$$

En estas condiciones, puede verse, que dw representa un invariante integral asociado al sistema canónico en las coordenadas (q, p) . Además, dicho invariante integral dw determina completamente las ecuaciones del movimiento, en la forma siguiente:

Si

$$\begin{cases} \dot{q}^i = f^i(q, p, t) \\ \dot{p}_i = g_i(q, p, t) \end{cases} \quad i = 1, \dots, n \tag{2.6}$$

es un sistema de ecuaciones sobre una región del espacio de estados E , y este sistema posee el invariante integral dw , dado por la (2.5), entonces

$$\begin{cases} f^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ g_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{cases} \quad (2.7)$$

Supongamos ahora que en lugar de utilizar el sistema coordinado (q, p) utilizamos el sistema (Q, P) , donde las Q y P vienen relacionadas con las (q, p) anteriores mediante una transformación del tipo (1.19). Y supongamos además que $dW = \sum_{j=1}^m dP_j dQ^j - dKdt$, donde $K \equiv H$ en virtud de las ecuaciones de transformación. Procediendo de forma similar, al caso anterior, obtenemos como ecuaciones canónicas asociadas al invariante integral dW las siguientes:

$$\begin{cases} \dot{Q}^j = \frac{\partial K}{\partial P_j} + \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial P_j} = \frac{\partial K}{\partial P_j} \\ \dot{P}_j = -\frac{\partial K}{\partial Q^j} - \sum_{k=1}^r \lambda_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial Q^j} \\ j = 1, \dots, m \quad (m = n + r) \end{cases} \quad (2.8)$$

Con todo esto, ya podemos dar el siguiente

2.2. Teorema

Una condición suficiente para que la transformación (1.19) sea canónica es, que dada una función hamiltoniana H en las coordenadas (q, p) , existan: una función escalar $K = K(Q, P, t)$ en las coordenadas (Q, P) , y una función $S = S(q, Q, t)$ tales que

$$W - w = \left(\sum_{j=1}^m P_j dQ^j - Kdt \right) - \left(\sum_{i=1}^n p_i dq^i - Hdt \right) = dS \quad (2.9)$$

donde K viene dado por la misma expresión (1.16) de (1.3)-Teorema.

Dem.: Se basa en el hecho de que el invariante integral dw no depende del sistema de coordenadas locales utilizado, con lo cual: de la relación $dW = dw$ y aplicando el inverso del Teorema de Poincaré, se concluye la existencia de la S tal que

$$W - w = dS$$

3. Aplicación al caso de Optimización de Trayectorias

En el caso particular de un problema de Optimización de Trayectorias $(R-1)$ el hamiltoniano H , en las coordenadas (q, p) , viene dado por la relación:

$$H = \sum_{i=1}^n p_i f^i(q, u, t) \quad (3.1)$$

donde u es el r -vector control y $f^i(q, u, t) = \dot{q}^i$, $i = 1, \dots, n$; representa el sistema de ecuaciones diferenciales de estado de nuestro sistema controlado.

Si $Q = (Q^j)$, $j = 1, \dots, m$ ($m > n$) es el nuevo vector de estado, definido por la transformación

$$\begin{aligned} Q^j &= Q^j(q) \\ j &= 1, \dots, m = n + 2 \end{aligned} \tag{3.2}$$

con las relaciones de ligadura

$$\Phi_k(Q) = 0, \quad k = 1, 2 \tag{3.3}$$

el nuevo hamiltoniano K , en las coordenadas (Q, P) , es

$$K = \sum_{j=1}^{n+2} P_j F^j(Q, u, t) \tag{3.4}$$

donde $F^j(Q, u, t) = \dot{Q}^j$ son las nuevas ecuaciones diferenciales de estado, y P_j los nuevos momentos conjugados, relacionados con los p_i mediante las relaciones de transformación:

$$p_i = \sum_{j=1}^{n+2} P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} \quad i = 1, \dots, n \tag{3.5}$$

Si sustituimos (3.1) y (3.4) en la condición suficiente de transformación canónica (2.9), obtenemos que la función $S = \sum_{k=1}^2 \lambda_k \Phi_k$ define la función generatriz de la transformación de coordenadas y momentos dada por las relaciones (3.2) y (3.5) con las relaciones de ligadura (3.3).

Determinación del vector primer de Lawden

Supongamos que nuestro sistema evolutivo controlado sea un cohete que se mueve en un campo gravitatorio central newtoniano $\vec{g} = -\mu \vec{r}/r^3$, y que dicho cohete está dotado de un sistema de propulsión de los denominados S_1 , es decir con velocidad de eyección constante. Dicho sistema le proporciona una aceleración de empuje $\vec{\gamma}$, en virtud del principio de acción y reacción. Evidentemente, el estado del cohete puede caracterizarse en cada instante $t \in [t_0, t_1]$ por el vector de estado $\vec{q}(C, \vec{r}, \vec{V})$ donde \vec{r} y \vec{V} representan la posición y la velocidad del vehículo, y C es la llamada velocidad característica, dada por la relación

$$C = \int_{t_0}^t \gamma dt$$

De acuerdo con todo esto, las ecuaciones de estado del cohete son:

$$\begin{cases} \dot{\vec{r}} = \vec{V} \\ \dot{\vec{V}} = -\mu \frac{\vec{r}}{r^3} + \vec{\gamma} \\ \dot{C} = \gamma \end{cases} \tag{3.6}$$

y el sistema adjunto correspondiente

$$\begin{cases} \dot{\vec{p}}_r = -\frac{\mu}{r^3} \left[\frac{(\vec{p}_v \cdot \vec{r})}{r^2} \vec{r} - \vec{p}_v \right] = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \\ \dot{\vec{p}}_v = -\vec{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial \vec{V}} \\ \dot{p}_c = -\frac{\partial H}{\partial C} \end{cases} \quad (3.7)$$

donde el hamiltoniano variacional H está dotado por la expresión:

$$H = (\vec{p}_r \cdot \vec{V}) - \frac{\mu}{r^3} (\vec{p}_v \cdot \vec{r}) + (\vec{p}_v \cdot \vec{\gamma}) + p_c \gamma \quad (3.8)$$

El vector de control, en este caso, es la aceleración de propulsión, y el funcional a minimizar C_1 (velocidad característica en el instante t_1).

Así pues, las trayectorias óptimas serán aquellas, que partiendo en el instante t_0 del punto $\vec{q}_0(\vec{r}_0, \vec{V}_0, C_0)$ de E^7 pasan, en el instante t_1 , por el punto $\vec{q}_1(\vec{r}_1, \vec{V}_1, C_1) \in E^7$ y hacen mínima la C_1 .

Puede verse en la (R-1), que en este caso, las condiciones necesarias de optimalidad son:

(i) Cuando el motor del cohete actúa y $|\vec{p}_v| \neq 0$, la aceleración de propulsión tiene la dirección y sentido del vector «primer» \vec{p}_v (nombre propuesto por Lawden).

(ii) Una trayectoria óptima sólo puede estar formada por arcos de los tres tipos siguientes:

NT — Arco balístico con $\gamma = 0$ y $k = |\vec{p}_v| + p_c < 0$.

MT — Arco propulsado con $\gamma = \gamma_{\max}$ y $k > 0$.

IT — Arco singular con γ cualquiera y $k = 0$.

(iii) En los puntos de unión de arcos distintos \vec{p}_v , \vec{p}_r y p_c son funciones continuas. Asimismo es continuo el hamiltoniano H ; y si γ es discontinua se verifica que $k = 0$.

Notemos, que la determinación explícita del vector primer \vec{p}_v , es de importancia capital, ya que dicho vector da la orientación de la aceleración de propulsión sobre una trayectoria óptima.

Nosotros vamos a tratar de determinar \vec{p}_v sin necesidad de integrar el sistema adjunto (3.7). Para ello, formularemos el mismo problema de optimización de las trayectorias de un cohete, pero con un número superabundante de variables relacionadas entre sí por condiciones de ligadura. Realizaremos una transformación canónica en la forma expresada por las relaciones (3.2) y (3.5), y con ello determinaremos la expresión general de \vec{p}_v .

Si en lugar del vector de estado $\vec{q}(\vec{r}, \vec{V}, C)$ consideramos el $\vec{Q}(\vec{E}, \vec{h}, e, l_0, C)$ donde es $E = V^2/2 - \mu/r$ la energía de la órbita osculatriz a la trayectoria en cada instante.

$\vec{h} = (\vec{r} \wedge \vec{V})$ el momento cinético.

$\vec{e} = (\vec{V} \wedge \vec{h})/\mu - \vec{r}/r$ el vector perigeo, de módulo la excentricidad e y dirección la del periastro P .

$l_0 = -nT = l - nt$ anomalía media de la época.

n , a , l y T denotan las magnitudes movimiento medio, semieje mayor, anomalías media y el instante de paso por el periastro, respectivamente.

Notemos que todos estos elementos orbitales se refieren a la órbita kepleriana osculatriz a la trayectoria en cada instante. Además, todos ellos son integrales del movimiento kepleriano osculador, de ahí que en el caso de trayectorias que consten exclusivamente de arcos balísticos unidos por puntos de impulsión (trayectorias impulsivas) el vector estado \tilde{Q} es constante.

Entre las ocho componentes del vector de estado \tilde{Q} existen las relaciones de dependencia

$$\Phi_1(\tilde{Q}) = \vec{h} \cdot \vec{e} = 0 \quad \Phi_2(\tilde{Q}) = e^2 - 1 - 2 \frac{E h^2}{\mu^2} = 0 \quad (3.9)$$

que reducen a 6 el número de elementos orbitales independientes.

Las ecuaciones de estado en estas nuevas variables son:

$$\begin{cases} \dot{E} = (\vec{V} \cdot \vec{\gamma}) \\ \dot{\vec{h}} = \vec{r} \wedge \vec{\gamma} \\ \dot{e} = \frac{1}{\mu} [\vec{\gamma} \wedge \vec{h} + V \wedge (r \wedge \vec{\gamma})] \\ \dot{l}_0 = \frac{1}{na^2} (-2r + 3tV) \cdot \vec{\gamma} - \frac{b}{ape} (p \cdot e) \end{cases} \quad (3.10)$$

donde \vec{p} representa el vector periastro, dado por la relación:

$$\vec{p} = p \frac{(\vec{h} \wedge \vec{e})}{he} \quad p = |\vec{p}|$$

y b es el semieje menor de la órbita osculatriz.

Si formamos el nuevo hamiltoniano, según lo que hemos visto en los párrafos anteriores, éste será:

$$K = p_E \dot{E} + (\vec{p}_h \cdot \dot{\vec{h}}) + (\vec{p}_e \cdot \dot{e}) + p_{l_0} \dot{l}_0 + p_c \dot{C} + \lambda_1 \Phi_1 + \lambda_2 \Phi_2$$

y donde los momentos nuevos verifican el sistema de ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \dot{p}_E &= -\frac{\partial K}{\partial E} & \dot{\vec{p}}_h &= -\frac{\partial K}{\partial \vec{h}} \\ \dot{\vec{p}}_e &= -\frac{\partial K}{\partial \vec{e}} & \dot{p}_{l_0} &= -\frac{\partial K}{\partial l_0} \\ \dot{p}_c &= -\frac{\partial K}{\partial C} \end{aligned}$$

siendo constantes en el caso de trayectorias impulsivas.

Para determinar la expresión del primer \vec{p}_v , aplicamos la (3.5), que en nuestro caso se escribe en la siguiente forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \vec{p}_r \\ \vec{p}_v \end{pmatrix} = (p_E, p_h, p_e, p_{l_0}) \begin{pmatrix} \frac{\partial Q}{\partial r} \\ \frac{\partial Q}{\partial \vec{V}} \end{pmatrix}$$

donde hemos puesto $Q = (E, \vec{h}, \vec{e}, l_0)$, excluyendo la C ya que ésta no se modifica en el cambio de coordenadas.

Efectuando los cálculos correspondientes, obtenemos para el vector primer \vec{p}_v la expresión:

$$\vec{p}_v = p_E \vec{V} + p_h \wedge r + h \wedge \lambda + r \wedge (V \wedge \lambda) + \frac{p_{l_0}}{na^2} (-2r + 3tV) \quad (4.11)$$

donde

$$\lambda = \frac{\vec{p}_e - \alpha \vec{p}}{\mu} \quad \alpha = \frac{p_{l_0}}{be}$$

Notemos, que el vector primer \vec{p}_v depende, en el caso de trayectorias impulsivas, de ocho parámetros (p_E, p_h, p_e, p_{l_0}), y como sabemos tan sólo deberían figurar 6, por ser \vec{p}_v solución de una ecuación diferencial vectorial de segundo orden. No obstante, puede verse ($R-1$) que entre los 8 parámetros existen dos relaciones de ligadura, correspondientes a las (3.9), que nos reducen a 6 el número de los parámetros independientes.

BIBLIOGRAFIA

- 1 V. CAMARENA: Rev. Acad. Ciencias de Zaragoza, serie 2.^a, XXVII, núm. 4, 367-454 (1972).
- 2 H. FLANDERS: *Differential Forms*. Academic Press, New York (1963).
- 3 W. F. POWERS; B. D. TAPLEY: A. I. A. A. Journal, vol. 7, núm. 3, 394-399, (1969).

ON OBTAINING ANALYTICAL EXPRESSIONS FOR LEVEL - CROSSING SPECTROSCOPY

by

M. A. REBOLLEDO y E. BERNABÉU

Departamento de Física Fundamental, Cátedra de Óptica
Universidad de Zaragoza (España)

Abstract

We present a method of obtaining simple analytical expressions of the energies and wave functions which intervene in the calculation of experimental signals of detection of hyperfine magnetic sublevel-crossings. These analytical expressions are polynomials whose variable is the applied magnetic field and they are obtained by applying the theory of stationary perturbations. The number of perturbations necessary to make the calculations with definite accuracy is obtained systematically and simply.

This method is applied to the level crossings of the state $6^2P_{3/2}$ of Cs^{133} , polynomials of a very low degree for the energies and the wave functions of the sublevels which cross being obtained and it is shown that the proposed method considerably reduces the calculation time of level-crossing signals.

1. — Introduction

In atomic level-crossing spectroscopy the intensity of resonant fluorescence which the atoms studied emit is detected, in function of the magnetic or electric field to which these atoms are submitted. To obtain information from these experimental results it is necessary to adjust them to the theoretical signals, which is usually done by means of a least-squares method. In this way values of lifetimes of the levels which cross, structure constants, Landé factors etc. are obtained.

To calculate the theoretical signals it is necessary to know the energies, wave functions and transition probability amplitudes for the magnetic or electric sublevels which intervene in the experiment, in function of the applied external field. This is generally done by means of a diagonalization method and it is necessary to repeat the calculations for all the values of the external field which intervene in the adjustment.

As the diagonalization is realised by means of iterative processes and adjustment by a least-squares method should be realised in numerical and therefore iterative form, the time necessary for the realisation of the adjustment could be excessive.

For this reason, we have thought of the possibility of obtaining simple analytical expressions of the energies and wave functions which would shorten the necessary calculation time on being used in the adjustment.

The object of this paper is the presentation of a method of obtaining, systematically and with established precision, simple analytical expressions of the energies and wave functions of hyperfine magnetic sublevels, which would permit the reduction of the cal-

culation time of theoretical signals of hyperfine magnetic sublevel-crossings. For this we have used the stationary perturbation theory. At the end we present various examples which show the improvements obtained with the proposed method.

2. — Summary of the stationary perturbation theory

Let H_0 be the hamiltonian of a system of which we know the energies and wave functions and let us represent n as the set of quantum numbers which define a state. If this system is subjected to a perturbation, so that the new hamiltonian is $H = H_0 + V$, the energies and wave functions can be obtained by means of the stationary perturbation theory. If we call the set of quantum numbers which define a state of the perturbed system nl , we can write¹⁾,

$$E^{(nl)} = \sum_{K=0} E^{(nl)}, \quad (1)$$

$$|nl\rangle = \sum_{K=0} |nl\rangle_K = \sum_{n'l'} |n'l'\rangle \sum_{K=0} \langle n'l' | nl \rangle_K, \quad (2)$$

$$E_0^{(nl)} = E_0^{(n)}, \quad (3)$$

$$E_1^{(nl)} = \langle nl | V | nl \rangle, \quad (4)$$

$$E_K^{(nl)} = \sum_{n' \neq n} \sum_{n'l'} \langle nl | V | n'l' \rangle \langle n'l' | nl \rangle_{(K-1)} - \sum_{\lambda=2}^{K-2} E_{\lambda}^{(nl)} \langle nl | nl \rangle_{(K-\lambda)} \quad (5)$$

$$\langle n'l' | nl \rangle_0 = \delta(n'l', nl), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \langle n'l' | ln \rangle_K &= \sum_{\lambda=1}^{K-1} \frac{E_{\lambda}^{(nl)} \langle n'l' | nl \rangle_{(K-\lambda)}}{E_0^{(n')} - E_0^{(n)}} + \\ &+ \sum_{n''} \frac{\langle n'l' | V | n''l'' \rangle \langle n''l'' | nl \rangle_{(K-1)}}{E_0^{(n)} - E_0^{(n')}} \quad (n' \neq n), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle n'l' | nl \rangle_K &= \sum_{\lambda=1}^{K-1} \frac{E_{\lambda+1}^{(nl)} \langle n'l' | nl \rangle_{(K-\lambda)}}{E_1^{(n'l')} - E_1^{(nl)}} + \\ &+ \sum_{n''l''} \frac{\langle n'l' | V | n''l'' \rangle \langle n''l'' | ln \rangle_K}{E_1^{(nl)} - E_1^{(n'l')}} \quad (l' \neq l), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\langle nl | nl \rangle_K = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^{K-1} \sum_{n'l'} \langle n'l' | nl \rangle_{\lambda} \langle n'l' | nl \rangle_{(K-\lambda)}. \quad (9)$$

3. — Method of obtaining analytical expresions. Precision equations

Let a set of atoms be under the influence of an external magnetic field \mathbf{B} . We shall consider only the case in which the couplings LS and JI are not broken for $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ and these is appreciable interaction between the hyperfine magnetic sublevels of a term for $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$. If we take the energy of this term as zero, the hamiltonian of the system will be the sum of the fine and hyperfine structure hamiltonians, H^f and H^{hf} , and of the hamiltonian of interaction of the atoms with the external magnetic field, $H^{mg}(\mathbf{B})$,

$$H = H^f + H^{hf} + H^{mg}(\mathbf{B}). \quad (10)$$

Let us suppose that we have detected experimentally level-crossings for $B = 0$ (Hanle effect) corresponding to an element of the periodical system. To evaluate the signal theoretically, in function of the applied magnetic field, we can use the expressions given by Franken², in which the energies and wave functions of the magnetic sublevels of the atom intervene. The calculation of the energies and wave functions can be made by means of the stationary perturbation theory (expressions (1) to (9)). Taking

$$H_0 = H^I + H^{II} \quad (11)$$

as unperturbed hamiltonian and

$$V = H^{III}(B) \quad (12)$$

as perturbation.

As observed in § 2, the K order perturbation for the energy is a polynomial in whose terms intervene some products of K elements of the V matrix divided by $K-1$ products of the energy differences of the unperturbed states. Therefore, if we realise the calculations on the base of eigenstates of H_0 , $\{ | \gamma J I F M_F \rangle \}$, as on this base the matrix elements of H_0 do not depend on B and the V matrix elements are directly proportional to B , the expression (1) takes the form

$$E^{(nl)} = a_0 + \sum_{K=1} a_K B^K, \quad (13)$$

in which a_K ($K = 0, 1, \dots$) are coefficients independent of B . Analogously, as the K order perturbation of any component of a wave function is a polynomial in whose terms intervene some products of K elements of the V matrix elements divided by K products of the energy differences of the unperturbed states, we can write

$$|nl\rangle = | \alpha \rangle_0 + \sum_{K=1} | \alpha \rangle_K B^K, \quad (14)$$

in which $| \alpha \rangle_K$ ($K = 0, 1, \dots$) do not depend on B . In this way the energies and the components of the wave functions are expressed as polynomials whose variable is B .

If the level-crossings whose signals we wish to calculate take place for a value $B_0 \neq 0$ of the external magnetic field, the previous method can also be used to obtain analytical expressions of the energies and wave functions. However, it could happen that if B_0 is strong, for the dominion of values of B necessary in the experiment, many terms in (13) and (14) could be necessary, if we wish to make the calculation accurately or even the sums could happen to be non-convergent.

In these cases the hamiltonian H can be obtained as the sum of an unperturbed hamiltonian H_0 and a perturbation V , in the form

$$H_0 = H^I + H^{II} + H^{III}(B_0), \quad (15)$$

$$V = H^{III}(B - B_0). \quad (16)$$

In order to realize the calculations on a base in which H_0 is diagonal it is necessary to calculate its eigenvalues and eigenvectors by means of a diagonalization method. It might appear a priori that we have the same inconvenience we are trying to avoid, which is the use of a diagonalization method. This is not the case, since that which considerably lengthens the calculation time is realizing a diagonalization process for each value of B and in the case we are dealing with it is only necessary to diagonalize for $B = B_0$. Reasoning as in the first case, we find that the energies and components of the wave functions can be obtained, as polynomials whose variable is $B - B_0$ in the form

$$E^{(nl)} = b_0 + \sum_{K=1} b_K (B - B_0)^K, \quad (17)$$

$$|ln\rangle = | \beta \rangle_0 + \sum_{K=1} | \beta \rangle_K (B - B_0)^K \quad (18)$$

The expressions (13) and (17) are analogous, as are (14) and (18). Therefore we can write them in a unified manner defining the variable X , as B for the expressions (13) and (14) as $B - B_0$ for (17) and (18). In this way the energies and wave functions of H can be written, adding to the corresponding energies and wave function of H_0 , the perturbations $E_{(p)}$ and $|\psi\rangle_{(p)}$, being

$$E_{(p)} = \sum_{K=1}^{\infty} \epsilon_K X^K, \quad (19)$$

$$|\psi\rangle_{(p)} = \sum_{K=1}^{\infty} |\psi\rangle_K X^K. \quad (20)$$

The calculation of the values of ϵ_K and $|\psi\rangle_K$ can be realized by means of a computer using the formulae (1) to (9) and the expressions of the matrix elements³⁾ of H_0 and V , but the most important problem which arises is knowing how many terms are necessary in (19) and (20), when B covers a definite interval and the calculations are to be made with an established accuracy. As there is no reason to believe that the number m of perturbations necessary grows with X , in which case it would be enough to calculate m for the highest value of X , we can choose from two solutions: calculate which number of perturbations is necessary for each of the values of X which intervene in the adjustment between the theoretical and the experimental signal, or realize a theoretical study of the problem which would m to be obtained systematically. It is obvious that the first solution contradicts the idea of saving calculation time, therefore we shall use the second solution.

It would be ideal to be able to calculate systematically for what intervals of values of X the perturbations of an order greater than m (with m variable) can be disregarded, if the calculations of $E_{(p)}$ and $|\psi\rangle_{(p)}$ with error less than one given are to be realized. In this way it would be enough to find a value of m for which these intervals contain the variation interval of X in the experiment. The solution of this problem is in principle complicated, so we shall use another much simpler method the usage of which will be explained later. We are going to tackle the problem, in the case of the energies, by calculating the interval of values of X for which, when the perturbation of order $m+1$ is disregarded, relative error is made, $e_m(X)$, whose absolute value is less than or the same as $|e|$. For this, bearing in mind that

$$e_m(X) = \frac{\epsilon_{m+1} X^m}{\sum_{K=1}^m \epsilon_K X^{K-1}}, \quad (21)$$

it is necessary to find the roots of the equation

$$\epsilon_{m+1} X^m - e \sum_{K=1}^m \epsilon_K X^{K-1} = 0, \quad (22)$$

with $e = \pm |e|$, the values of X which we are looking for being those which make the first member of this equation (precision equation) negative or null.

The general study of the number of real roots which precision equations can have is a very complex problem if it is realized analytically, but it can be easily solved using a qualitative analysis. As all the perturbations of any order can be disregarded, for $X = 0$, it is evident that, by continuity, at least in the neighborhood of this point the perturbation of the order $m+1$ can be disregarded, committing a relative error less than e . As the numerator of (21) is a monomial of m degree and when X grows bigger it grows in absolute value quicker than the absolute value of the denominator (which is a polynomial of degree $m-1$), these will always be at least two values of X different from zero (one positive and the other negative) belonging to the interval $(-\infty, +\infty)$, for which $|e_m(x)| = |e|$, so that the equations (22) with $e = \pm |e|$ always give at least

two real roots, one positive and the other negative. The real roots of (22) correspond to the intersection points of the curves $\pm P_m(X)$ and $E_m(X)$, being

$$P_m(X) = |\varepsilon_{m+1} X^m / e| \quad (23)$$

and

$$E_m(X) = \sum_{k=1}^m \varepsilon_k X^{k-1}, \quad (24)$$

so that as $E_m(0) = 0$ there is always a root for $X = 0$. The number of positive real roots depends on whether or not $E_m(X)$ cuts the X axis for $X > 0$. If it does not cut it (fig. 1-a) there will always be one point of intersection between $E_m(X)$ and $P_m(X)$ or $-P_m(X)$ as we have shown, and only one because $P_m(X)$ is growing and grows more quickly than $|E_m(X)|$. Let us now suppose that $E_m(X)$ cuts the X axis for $X = X_m$ (Fig. 1-b, 1-c and 1-d). For positive values of X very close to zero $|e_m(X)|$ should be less than $|e|$ and therefore $P_m(X) < |E_m(X)|$, so that as $P_m(X)$ grows more quickly than $|E_m(X)|$, there will be one point of intersection between $E_m(X)$ and $P_m(X)$ or $-P_m(X)$ for $X < X_m$, and only one for this reason.

For $X > X_m$ there may not be points of intersection (fig. 1-b), but if there are there will be two of them (fig. 1-c), also owing to the fact that $P_m(X)$ grows more quickly than $|E_m(X)|$, or one when the curves are tangents (fig. 1-d).

We then see that (22) can have a positive root for one sign of e and none, one or two for the other sign. These conclusions are also valid for the negative roots. Therefore, although the precision equations are of an elevated degree, it is very easy to obtain their real roots.

If we call ν a number of the order of magnitude of the matrix elements of V and ΔE a number of the order of magnitude of the difference between the energies of two contiguous states of the unperturbed hamiltonian from (5), (6), (7), (8) and (9)

$$E_k^{(nl)} \sim \frac{\nu^k}{(\Delta E)^{k-1}}, \quad \langle n'l' | nl \rangle_k \sim \frac{\nu^k}{(\Delta E)^k} \quad (25)$$

is deduced, from which, bearing in mind (1) and (2), it follows that if in the developments of the energies and wave functions we disregard the perturbations of the order $m + 1$, the relative error committed is of the same order for both. However, precision equations can also be obtained for the components of the wave functions, in the same way as for the energies and with the same conclusions for the roots.

4. — Practical application of the method

As we have seen in the previous paragraph, once we know the number of perturbations necessary for the sufficiently accurate calculation of the energies and wave function, it is necessary to determine E_k and $|\psi\rangle_k$, the calculation of which can be made by means of a computer, simply and with no need to resort to iterative methods. The most complicated problem is the obtaining of the roots of the precision equations. For $m = 1$ and $m = 2$ the solutions from (22) are immediate. For $m > 2$ it is necessary to obtain the roots by much lengthier methods, for which, despite the small number of real roots, the calculation time of the number of necessary perturbations could lengthen considerably. However, thanks to the knowledge we have acquired in the previous section of precision equation roots, we can avoid their calculation and the method of determination of the number of necessary perturbation remains systematic.

For this let us bear in mind that if, in the experiment of level-crossings, X takes values greater than X_m (fig. 1-b, 1-c and 1-d) polynomial expressions for the energies

and components of the wave functions cannot be obtained, so that a relative error less than ϵ in all the variation interval of X is committed. In fact, in the cases 1-b and 1-d $e_m(X) > \epsilon$ for $X > X_1$ (we do not take the point X_2 of case 1-d into account as it is an isolated point) and X_1 is always less than X_m no matter how big m is. In case 1-c $e_m(X) > \epsilon$ in the interval (X_1, X_2) and for $X > X_3$. From all this it is evident that there is no point in finding the roots X_2 and X_3 , so that the problem is made simpler.

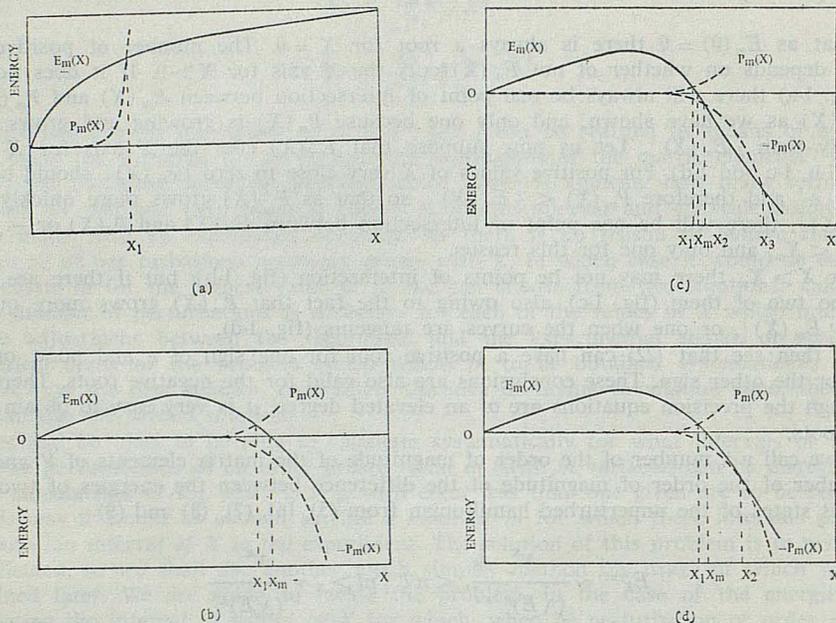


Fig. 1

It is not necessary to find the root X_1 , (also including case 1-a), as if $e_m(X) < \epsilon$ for a definite value of $X < X_1$, it is also certain for all the values of X less than this as we have previously seen. Then, if the greatest value that X takes in the experiment is $X_M (< X_m)$ in the cases where $E_m(X)$ cuts the axis, it is enough to demand that the program of calculation of the analytical expressions, at the same time that it calculates the values of E_m and $|\psi\rangle_m$ in the process of adjustment between the theoretical and experimental signals, calculate the relative error which would be made when the perturbation of that order, for $X = X_M$, is disregarded. In principle one might think of limiting the degree of the polynomial expression to the smallest value of m which fulfils the condition $e_m(X_M) < \epsilon$, but this would not be correct as it is necessary to verify also what happens on disregarding the perturbations of an order superior to $m + 1$. For this, and owing to the general descending tendency of the values of the perturbations as m increases, it is enough to calculate some perturbations of an order superior to $m + 1$ and demand that the program fix the degree of the polynomial expression on one value of K so that the sum of the perturbations immediately superior to K divided by the value of the polynomial for $X = X_M$ to be inferior to $\bar{\epsilon}$. We shall illustrate this later with some examples. To find out if $X_M < X_m$, in the case of $E_m(X)$ cutting the X axis, it is enough to calculate the value of $E_m(X)$ for X very close to zero and see if it has the same sign as $E_m(X_M)$.

Finally we wish to re-state that, in a level-crossing experiment, it is necessary to realize measurements of the crossing signal for different values of the density of atoms

studied, later extrapolating the results for null density, and for each density it is necessary to make the sufficient number of series of measurements in order to calculate the probable error of the results. As, in the calculations, the values of the energies and wave functions are considered to be independent of the density of atoms (for the values of the density which are normally used in these experiments), it is only necessary to verify the number of necessary perturbations on adjusting the first series of measurements, as the results obtained can be used for the other series. As the number of series of measurements necessary is considerable and the verification process for the number of perturbations necessary is very simple, the time spent on this process is unimportant compared with the adjustment time.

In the event of not being able to obtain polynomial expressions of a finite degree, for the energies and components of the wave functions, in all the interval of variation of X , or if they can be obtained but they are of an excessively high degree, this interval can be divided into various subintervals and the method of perturbations with different values for B_0 be applied in each of them.

To show the advantage of our method over a diagonalization method, we present the results we have obtained applying it to the hyperfine magnetic sublevel-crossings of the level $6^2P_{3/2}$ of Cs^{133} . We have chosen this example as the crossings between the hyperfine magnetic sublevels of this level are measured experimentally and because we consider that the level $6^2P_{3/2}$ of Cs^{133} is one of those which could present most difficulties in the application of a perturbation method, owing to the curvature of its sublevels in function of the external magnetic field (fig. 2). We have used the values $a=50.45$ MHz, $b=0.42$ MHz for hyperfine structure constants⁴⁾ and $g_I = 1.3341$, $g_J = 0$ for the Landé factors⁵⁾.

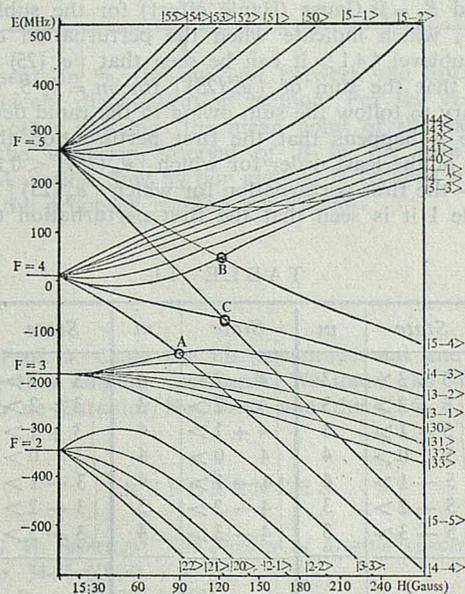


Fig. 2

Using the experimental signals obtained by R. W. Schmieder et al.⁶⁾ for the Hanle effect and the crossings A, B and C (fig. 2) of the level $6^2P_{3/2}$ of Cs^{133} , it can easily be seen that all the information that can be obtained from the crossings is found in the case of

the Hanle effect, in the signal zone obtained when B varies between 0 and 25 Gauss. It is also found that for the crossings A and for the set of crossings B and C (which are seen together) all the information is obtained if one zone of the signal, corresponding to a variation of the magnetic field of 18 Gauss, is taken. Taking this into account, we have obtained analytical expressions of the energies and wave functions of all the sublevels which intervene in the crossings stated earlier, so that the relative error made in the calculation of $E_{(p)}$ is less than 0.1 %, when the magnetic field covers the intervals stated earlier.

TABLE I

m	$ 41\rangle$	$ 31\rangle$	m	$ 41\rangle$	$ 31\rangle$
1	51.3		8	0.0003	0.069
2	2.5	54.1	9		0.19
3	0.36	16.5	10		0.046
4	0.0062	23.1	11		0.023
5	0.0059	2.5	12		0.016
6	0.0056	2.1	13		0.005
7	0.0011	1	14		0.003

Before presenting the results we want to show two examples of how the number of necessary perturbations is determined. In table I the values of $|e_m(X)|$ are shown in %, with $X = 25$ Gauss and $B_0 = 0$ Gauss (Hanle effect) for the sublevels $|F = 4, M_F = 1\rangle$ and $|F = 3, M_F = 1\rangle$, which indicate when the perturbation of order $m + 1$ can be disregarded. For the sublevel $|4,1\rangle$ it can be seen that $|e_m(25)|$ begins to be less than 0.1 % for $m = 4$ and that the sum of $|e_m(25)|$ for $m = 4, 5, 6, 7$ and 8 is less than 0.1 %; it is not necessary to follow the sum owing to the rapid decrease of $|e_m(25)|$ when m grows. In this case it happens that the first perturbation that can be disregarded, that of order 5, is that of the least order for which $|e_m(25)| < 0.1$ %. On the other hand, for the sublevel $|3,1\rangle$ the first perturbation for which $|e_m(25)| < 0.1$ % is that of order 9, while analysing table I it is seen that the first perturbation that can be disregarded is that of order 11.

TABLE II

Crossing	State	m	State	m	State	m	State	m
Hanle ($B_0 = 0$)	$ 5+3\rangle$	3	$ 4+3\rangle$	4	$ 3+3\rangle$	6		
	$ 5+2\rangle$	3	$ 4+2\rangle$	3	$ 3+2\rangle$	11	$ 2+2\rangle$	6
	$ 5+1\rangle$	3	$ 4+1\rangle$	4	$ 3+1\rangle$	10	$ 2+1\rangle$	7
	$ 5-0\rangle$	4	$ 4-0\rangle$	4	$ 3-0\rangle$	8	$ 2-0\rangle$	8
	$ 5-1\rangle$	4	$ 4-1\rangle$	4	$ 3-1\rangle$	9	$ 2-1\rangle$	8
	$ 5-2\rangle$	3	$ 4-2\rangle$	3	$ 3-2\rangle$	10	$ 2-2\rangle$	7
	$ 5-3\rangle$	3	$ 4-3\rangle$	4	$ 3-3\rangle$	5		
A	$ 4-4\rangle \cap 3-2\rangle$	$ 3-2\rangle$	4					
B	$ 5-4\rangle \cap 4-2\rangle$							
and	$ 4-2\rangle$	3	$ 4-3\rangle$	3				
C	$ 5-5\rangle \cap 4-3\rangle$							

ANALYTICAL EXPRESSIONS FOR LEVEL - CROSSING

In table II we present the number m of perturbations necessary to calculate $E_{(p)}$ with an error less than 0.1 %, for the levels previously stated, which are obtained from representations of the hamiltonian of dimension greater than 2×2 . As can be seen, this number is low and the analytical expressions of the energies are very easy. We have not thought it necessary to present the results corresponding to $|\psi\rangle_{(p)}$ as having the wave functions presented 3 or 4 components the table would be excessively complicated and besides, these results show nothing new, since we have already seen that m is of the same order for energies and wave functions.

To show the advantages of the method of analytical expressions we have compared the times necessary for calculation of the energies and wave functions of the sublevels which cross, for Hanle effect and the crossings A , B and C , by means of a diagonalization method of Jacobi and our method of analytical functions. For this we have required, in both cases, the relative error made in the extremes of the variation interval of B to be less than 0.1 % and we have made calculations for the cases where on detecting the crossings signal measurements are made for 10 or 20 different values of the magnetic field.

TABLE III

Crossings	10 points	20 points
Hanle	42 %	22.5 %
A	18.5 %	10 %
A y C	11.5 %	7 %

In table III we present, in %, the quotient between the calculation time with our method and with the Jacobi diagonalization method. For the Hanle effect $B_0 = 0$ has been used and for the other crossings the mean point of the variation intervals of B . Using B_0 centred in the variation interval of B in the case of the Hanle effect ($B_0 = 12.5$ Gauss) the calculation time by our method is reduced by 15 %. It can be seen that the advantages of the proposed method are evident.

Acknowledgments

We are grateful to Prof. J. Casas for his encouragement and interest and to Prof. D. González Alvarez for this valuable comments. We thank the Ministerio de Educación y Ciencia, the Instituto de Estudios Nucleares and the C. S. I. C. for their financial support.

REFERENCES

- 1) E. W. CONDON and G. H. SHORTLEY: *The theory of atomic spectra*. 8rd. edn. Cambridge University Press, pp. 34-35 (1967).
- 2) P. A. FRANKEN: *Phys. Rev.* **121**, 508 (1960).
- 3) M. A. REBOLLEDO and E. BERNABÉU: *Rev. Acad. Ciencias Zaragoza*, **27**, 289 (1972).
- 4) P. VIOLINO: *Can. J. Phys.* **47**, 2095 (1969).
- 5) J. N. DODD and R. W. N. KINNEAR: *Proc. Phys. Soc. (London)* **75**, 51 (1960).
- 6) R. W. SCHMEIDER, A. LURIO, W. HAPPER and A. KHADJAVI: *Phys. Rev.* **2A**, 1216 (1970).

FORMULACION Y ESTUDIO DE UN METODO OPTIMIZACION PARA PROBLEMAS DE DISEÑO DE COMBINACIONES OPTICAS

P O R

S. MAR^{*} y M. QUINTANILLA

Departamento de Optica, Facultad de Ciencias
Universidad de Valladolid

Abstract

The characteristics of mathematical methods of minimization are studied as applied to the problem of designing optical combinations. It is derived an analytical expression which allows the calculation of the optimal step in numerical derivation and several formulations are analysed for the calculation of partial crossed derivatives and their errors. It is studied the most suitable way of using the methods of optimized gradient, acceleration of convergence and minimization parameter by parameter in order to solve the problem of optical combination. Criteria are given for the most effective combination of these three methods. Finally the results are included of a typical example: the correction of a Taylor triplet.

Introducción

Casi todos los problemas de diseño de sistemas ópticos acaban más pronto o más tarde en uno de minimización, para hacer óptimo el comportamiento del sistema en condiciones específicas. Por ello analizamos este problema para poner a punto un método de optimización especialmente construido para el diseño de sistemas ópticos.

Es conocido (1) que, si bien existe desde el punto de vista matemático una axiomática única para minimizar funciones, los procedimientos prácticos varían enormemente, de modo que cada problema concreto tiene su método más adecuado, obtenido en la mayoría de los casos por experiencia, llegando a darse el caso de que procedimientos de gran eficacia y convergencia para un problema se muestran ineficaces para otros.

El método aquí propuesto, por estar especialmente construido para diseño de sistemas ópticos, debe tener en cuenta las peculiaridades propias de este problema, así como las generales de los métodos de optimización. Entre ellas destacamos:

- a) Como peculiaridad común a casi todos los métodos de optimización está el problema del «estacamiento», en el que la convergencia hacia el mínimo llega a ser de extrema lentitud, al cabo de cierto número de iteraciones.
- b) Otra peculiaridad bastante común es la obtención de mínimos locales que imposibilitan el encuentro del mínimo absoluto.

* Este trabajo se ha realizado con la ayuda de una Beca de Iniciación a la Investigación y Formación del Profesorado concedida a S. Mar.

c) En el caso concreto que nos ocupa, las funciones por estar basadas en la marcha de varios rayos a través del sistema, requieren un tiempo de cálculo relativamente alto.

d) Otro problema es que la dependencia, de la función a optimizar, con los parámetros libres no es en la mayoría de los casos explícita y ello obliga al cálculo de las derivadas por el procedimiento de incrementos finitos. En este caso un problema de gran importancia es la determinación de un incremento apropiado para la obtención de las derivadas con suficiente precisión numérica.

Nuestro método tiene en cuenta cada una de estas peculiaridades.

Las funciones a optimizar en el problema del diseño de sistemas ópticos son las llamadas genéricamente funciones de mérito.

Prescindiendo del criterio que se siga para su definición, llamaremos función de mérito a una relación que para cada conjunto de valores de los parámetros libres del diseño (radio, espesores, distancias, focales, pupila, etc.), asigna un valor único relacionado con la calidad del sistema y que se pretende que sea mínimo. Si n es el número de parámetros libres, la función de mérito f será una aplicación de un espacio de n dimensiones (espacio de los parámetros), a la recta real.

$$f: R^n \xrightarrow{f} R$$

Como ya hemos indicado, la valoración de estas funciones requiere un tiempo de cálculo relativamente largo, por ello se ha procurado emplear un procedimiento que extraiga la máxima información con el menor número de evaluaciones de la función, y por lo tanto que seleccione los puntos que «a priori» pueden suministrar dicha información. El método será tanto más eficaz, en tiempo de cálculo, cuantas menos veces evalúe la función, aunque luego realice un análisis más largo de los puntos calculados para obtener la máxima información; por muy largo que sea este análisis siempre será preferible a calcular la función un mayor número de veces.

El método, que basado en estas premisas y que a continuación se detalla, ha sido programado en FORTRAN para un IBM 1130, se ha empleado en todos los problemas de optimización que se nos han presentado, mostrándose siempre de gran eficacia. Su puesta a punto la realizamos con un ejemplo típico, para poder analizar cada uno de los puntos del procedimiento.

Este caso concreto fue la optimización de un Taylor (tripleto Cooke) cuyos datos del anteproyecto están dados en la Tabla I, asimismo se dan los parámetros del sistema corregido.

Como función de mérito se utiliza una estudiada por nosotros (2) dada por:

$$FM = \frac{1}{4} n_k'^2 \sigma_k'^4 \left[\frac{(ESF)^2}{45} + \frac{(AST)^2}{40} + \frac{(CP)^2}{60} - \frac{(ESF)(AST)}{36} + \frac{(ESF)(CP)}{36} - \frac{(AST)(CP)}{30} + \frac{(CRL)^2}{12} \right] + \frac{1}{4} n_k'^2 \sigma_k'^2 \left[\frac{(COMA)^2}{54} + \frac{Y_k'(DIST)^2}{70000} - \frac{Y_k'(COMA)(DIST)}{1125} + \frac{(CRT)^2}{3} \right]$$

donde las aberraciones se calculan a través de las Sumas de Seidel.

Para evitar valores excesivamente pequeños de esta función de mérito, se multiplicó por 10^4

$$f = FM \times 10^4$$

Se toman como parámetros libres $r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, d_1', d_2', s_p$, manteniendo fijas las demás y dando a r_6 el valor adecuado para obtener focal 10.

TABLA I

Focal = 10
 Campo = 0.3640 radianes
 Abertura = $f'/3.5$
 Radio pupila = 1.4286
 Posición objeto = $-\infty$

Sistema inicial					Sistema final	
Radios	Espesores	Indice (f)	Indice (d)	N.º Abbe	Radios	Espesores
3.787					3.8196	
- 86.20	0.55	1.62384	1.61050	46.76	- 54.138	0.55
- 4.321	1.342	1.			- 4.5765	1.0808
	0.2	1.64539	1.62250	28.19		0.2
3.924	1.341	1.			3.4727	1.0667
47.390	0.6	1.62384	1.61050	46.76	14.154	0.6
- 3.457					- 3.8652	
P. diafragma = 0.7555 del vértice 2.ª sup					0.63539 de la 4.ª sup	
P. pupila = 1.433 del vértice 1.ª sup					3.1560 de la 1.ª sup	
FM = 0.143.10 ⁻⁵					0.316.10 ⁻⁷	

V.2. Cálculo de las derivadas

Volviendo al método de minimización nos enfrentamos en primer lugar con el cálculo de las derivadas. En dicho cálculo, por el procedimiento de incrementos finitos con calculadoras, se encuentra el siguiente compromiso.:

a) Para obtener un buen valor de la derivada, matemáticamente interesa que el incremento tienda a cero. Siempre que éste sea finito la derivada obtenida por cociente de incrementos diferirá del valor real en una magnitud E_r , que es conocida como error de truncación. Como se verá, este error tiene aproximadamente una dependencia cuadrática con el valor del incremento de la variable ($\Delta \vec{x}$).

b) Sin embargo, al tender a cero $\Delta \vec{x}$, los valores de la función en el punto \vec{X}_0 y $\vec{X}_0 + \Delta \vec{x}$ llegan a ser muy similares, teniendo gran número de cifras significativas iguales, por lo que la evaluación numérica de su diferencia pierde significado y aumenta fuertemente el error en la derivada. Téngase en cuenta el limitado número de dígitos que reserva una calculadora para el almacenamiento de una magnitud (de 8 a 9, y en algunos casos 16). Este es el error de redondeo, E_r , y en el valor de la derivada primera influye como $1/|\Delta \vec{x}|$ y como $1/|\Delta \vec{x}|^2$ para las derivadas segundas.

En la gráfica 1 se representan ambos errores en función de incremento de la variable, así como su suma que da el error total de la derivada.

La expresión analítica del mínimo error total se obtiene por derivación de la suma de redondeo y truncación.

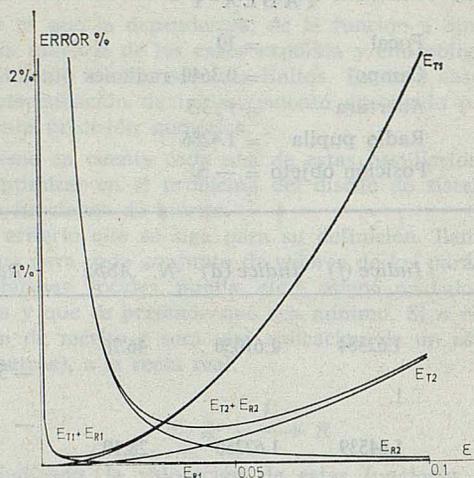


FIG. 1. — Variación de los errores de truncación (E_T), redondeo (E_R) y totales ($E_T + E_R$) con el incremento de derivación, ϵ , para derivadas primeras (sub. 1) y segundas (sub. 2).

Expresión del error de truncación

El error de truncación viene dada por la diferencia entre el valor numérico de la derivada (DP) y el valor exacto.

Desarrollando en serie de Lagrange la función en el punto $\vec{X}_0 + \vec{\epsilon}$ respecto al parámetro i , y operando se obtiene

$$E_T = \frac{1}{3!} \epsilon_i^2 DTR_i$$

donde ϵ_i es el incremento para variable i ,

$$DTR_i = \frac{2}{\epsilon_i^2} [(DP_i)_{2\epsilon} - (DP_i)_\epsilon]$$

$$(DP_i)_\epsilon = \frac{f_+ - f_-}{2 \epsilon_i}$$

derivada primera numérica calculada con incremento ϵ

$(DP_i)_{2\epsilon}$ lo mismo con $2 \epsilon_i$

De modo similar puede procederse con las derivadas segundas;

$$E_T = \frac{2}{4!} \epsilon_i^2 DCR_i$$

donde

$$DCR_i = \frac{4}{\epsilon_i^2} [(DS_i)_{2\epsilon} - (DS_i)_\epsilon]$$

y

$$(DS_i) = \frac{f_+ + f_- - 2f_0}{\epsilon_i^2}$$

derivada segunda numérica calculada con incremento ϵ_i .

Puede apreciarse la dependencia cuadrática con el incremento tanto para las derivadas primeras como segundas.

Expresión del error de redondeo

Este error nace de la limitación en los dígitos almacenados por la calculadora. En el cálculo de la función se obtiene como resultado una cantidad con un número de cifras limitado. Sin embargo, ni siquiera todas estas cifras son correctas, ya que en las sucesivas operaciones hasta la obtención de la función se ha ido incrementando poco a poco el error en las últimas cifras; llegando éstas, en la mayoría de los casos, a ser totalmente aleatorias. La estimación del número de cifras correctas de un resultado numérico de modo riguroso resulta un problema muy complejo, en el que intervienen factores tales como: el número de operaciones realizadas, la propia organización de la calculadora, su C. P. U. (Central Processing Unity), las subrutinas propias del sistema, y de modo muy importante la programación del problema, etc. Por todo ello, la estimación de este número de cifras correctas suele estar basado en la experiencia, dando como error relativo en tanto por uno $r = 0.5 \times 10^{-n+1}$, donde n es el número de cifras correctas en la evaluación de la magnitud determinada. La calculadora con la que hemos trabajado reservaba aproximadamente 9 cifras decimales para cada número y hemos estimado entre 5 ó 6 el número de cifras correctas, por ello tomamos $r = 10^{-5}$.

En general, el error de redondeo absoluto en el cálculo de la derivada primera puede estimarse como

$$E_r = \text{Error Abs.} \left(\frac{f_+ - f_-}{2\epsilon} \right) = \frac{1}{2\epsilon} \text{Error Abs.} (f_+ - f_-) =$$

$$= \frac{1}{2\epsilon} (rf_+ + rf_-) \approx \frac{\bar{f}r}{\epsilon}$$

donde \bar{f} es el valor medio de f_+ y f_- ; y de modo similar, se obtiene que el error para la derivada segunda está expresado aproximadamente por

$$E_r = \frac{4\bar{f}r}{\epsilon^2}$$

Donde aparece la dependencia con $1/\epsilon$ y $1/\epsilon^2$ en el error de redondeo de las derivadas primera y segunda respectivamente.

Estimación del incremento óptimo

El incremento óptimo se obtiene por derivación de la suma de los errores de redondeo y truncación, lo implica un error mínimo en la valoración numérica de la derivada.

Al derivar y despejar se obtiene, para derivadas primeras:

$$\varepsilon_{\text{opt}} = \left(\frac{3 \bar{f} r}{DTR} \right)^{1/3}$$

y para las segundas

$$\varepsilon_{\text{opt}} = \left(\frac{48 \bar{f} r}{DCR} \right)^{1/4}$$

como valores óptimos de los incrementos.

Ante estas expresiones de los ε_{opt} hay que considerar las siguientes cuestiones:

1) Precisión con la que deben calcularse estos valores, es decir, los intervalos de ε , en torno al valor óptimo, en los que el error de las derivadas no excede a una magnitud razonable.

2) Como se dispone de dos valores de ε_{opt} , uno para derivadas primeras y otro para segundas, ésto obligaría a calcular la función en puntos distintos para la obtención de las derivadas primeras y para las segundas, con el consiguiente aumento de cálculo.

Para analizar el primer punto se estudió el comportamiento de los errores de redondeo, truncación y total, tanto para derivadas primeras como segundas, frente al incremento de la variable.

En la gráfica 1 se representan estos errores para el primer parámetro libre del sistema elegido.

Tomando como cotas máximas de error para la derivada primera 1 % y para la derivada segunda 2 %, puede apreciarse que cualquier valor de ε comprendido entre 0.008 y 0.07 nos daría valores de las derivadas dentro de los errores exigidos. Puede observarse que estos valores difieren en un orden de magnitud y, análogamente, sucede para los demás parámetros; lo que nos permite afirmar que el valor de ε no es muy crítico y solamente su orden de magnitud es significativo.

Normalmente dentro de este intervalo, en el que las derivadas tienen errores tolerables, se encuentran ambos ε_{opt} , y esta circunstancia nos permite resolver el segundo problema definiendo un único ε_{opt} combinación de los anteriores. Por lo tanto sólo será necesario calcular la función en dos puntos y a partir de ellos pueden obtenerse las derivadas tanto primeras como segundas, por lo que se reduce a la mitad el número de puntos donde hay que evaluar la función.

Nosotros hemos tomado como combinación el 75 % de $\varepsilon_{\text{opt}}^1$ de derivadas primeras más el 25 % de segundas, basados en la idea de que las derivadas primeras juegan un papel más importante en la minimización que las segundas. Se han probado también (50 % $\varepsilon_{\text{opt}}^1$ + 50 % $\varepsilon_{\text{opt}}^2$) y (25 % $\varepsilon_{\text{opt}}^1$ + 75 % $\varepsilon_{\text{opt}}^2$) así como llevar por separado $\varepsilon_{\text{opt}}^1$ y $\varepsilon_{\text{opt}}^2$; las diferencias que se encuentran en cada caso para las derivadas primeras y segundas no eran muy significativas, pero sí en las derivadas cruzadas que, como veremos más adelante, mejoran con el primer criterio; por todo ello definimos:

$$\varepsilon_{\text{opt}} = \frac{3}{4} \varepsilon_{\text{opt}}^1 + \frac{1}{4} \varepsilon_{\text{opt}}^2$$

Como ya hemos indicado en la evaluación de ε_{opt} es necesario estimar *DTR* o *DCR*, y para ello deben calcularse las derivadas primeras y segundas que a su vez necesitan de

FORMULACION Y ESTUDIO DE UN METODO OPTIMIZACION PARA PROBLEMAS DE DISEÑO

un valor de ϵ . Por esto se comienza el cálculo con un ϵ arbitrario y se realizan las siguientes evaluaciones:

$$\epsilon \longrightarrow f_+, f_-, f_{2+}, f_{2-} \longrightarrow (DP), (DS) \longrightarrow (DTR), (DCR) \longrightarrow \epsilon_{opt}$$

repetiéndose el cálculo con el nuevo ϵ_{opt} , si las derivaciones no tienen la precisión suficiente. Normalmente dos pasadas suelen ser suficientes, como se muestra en la tabla II.

TABLA II

ϵ	DP	DS	DTR	DCR	ϵ_{opt}
1.º paso 0.3787	-0.07918	0.3807	-1.093	-3.049	0.02731
2.º paso 0.02731	-0.06008	0.3532	-0.748	-2.225	0.01842
3.º paso 0.01842	-0.06003	0.3531	-0.749	-2.420	0.01814
4.º paso 0.01814	-0.06003	0.3531	-0.748	-2.457	0.01811
5.º paso 0.01811	-0.06003	0.3531	-0.747	-2.286	0.01829

Con el valor de ϵ_{opt} , obtenido en el primer cálculo, se pueden ya evaluar derivadas con precisión superior a la deseada, sólo en algunos casos serán necesarias dos pasadas para obtener la exactitud deseada en las derivadas.

Para iniciar el cálculo debe tomarse un ϵ cualquiera, preferentemente grande, ya que el error de truncación es menos perjudicial que el de redondeo, debido a la aleatoriedad de este último. Nosotros hemos tomado $\epsilon_i = x_i/10$. En los demás pasos ya no es necesaria esta elección arbitraria, pues se tomó como ϵ el evaluado anteriormente.

Dado que el cálculo de los ϵ_{opt} exige la evaluación de la función en cuatro puntos por parámetro (con el consiguiente aumento en el tiempo de cálculo) es conveniente realizarlo el menor número de veces en el camino hacia el mínimo.

La estimación de ϵ_{opt} es de gran importancia en el caso de diseño de sistemas ópticos. Cuando la función de mérito depende fuertemente de un parámetro, el ϵ_{opt} asociado será pequeño (3).

La dificultad de las distintas dependencias de la función con las variables se salva utilizando en la derivación un ϵ_{opt} para cada variable.

Algunos autores suelen utilizar un ϵ común para radios, otro para distancias, otro para espesores, etc. En los cálculos realizados por nosotros esta hipótesis llevaría fuertes errores en la evaluación de las derivadas, pues como muestra la tabla III los ϵ_{opt} para distintos radios son de orden muy diferente. No obstante, las diferencias entre los ϵ_{opt} de una variable, en las distintas iteraciones, no se hacen muy significativas si el número de éstas no es muy elevado. Esto unido a no ser muy crítico el valor de ϵ_{opt} y a lo costoso de su obtención, aconseja no recalcularlo sino de un modo muy esporádico. Nosotros hemos tomado como criterio recalcular los ϵ_{opt} cuando la función de mérito se ha

TABLA III

Iteración	Función	$\epsilon_{opt}(r_1)$	$\epsilon_{opt}(r_2)$	$\epsilon_{opt}(r_3)$	$\epsilon_{opt}(d_1')$	$\epsilon_{opt}(s_p)$
1	0.014277	0.0183	2.18	0.0349	0.0291	0.0833
2	0.00740	0.0171	1.83	0.0276	0.0209	0.0764
3	0.00699	0.0173	1.79	0.0289	0.0246	0.0773
6	0.00182	0.0174	2.02	0.0197	0.0117	0.0957
15	0.00032	0.0065	0.34	0.0107	0.0056	0.1785

reducido en un orden de magnitud; para tales variaciones (como puede apreciarse en la tabla III, iteración 6 y 15) la nueva posición en el espacio de los parámetros está tan alejada de la anterior que las modificaciones en el valor de ϵ_{opt} son significativas, y por lo tanto deben recalcularse.

Todo lo anterior nos lleva a la conclusión siguiente: los valores de los ϵ óptimos dependen fuertemente de la Relación Implícita entre la Función y la Variable, pero dichos valores para cada variable se mantienen significativos en un amplio margen de variación de la función.

El empleo de ϵ_{opt} como aquí se ha descrito nos ha permitido obtener valores de las derivadas primeras y segundas con errores siempre inferiores al 1 %, utilizando exclusivamente dos puntos por parámetro (f_- y f_+). Sólo en las iteraciones que se recalcularon el ϵ_{opt} se precisan cuatro puntos (f_+ , f_- , f_{2+} , f_{2-}). Si se tiene en cuenta que estos mismos valores de f_+ y f_- deben utilizarse para el cálculo de ambas derivadas (primeras y segundas), y que el f_0 es común para todas las variables, se deduce que solamente son precisos $2n + 1$ valoraciones de la función para obtener las derivadas primeras y segundas.

Derivadas cruzadas

Para el cálculo de las derivadas cruzadas es preciso conocer la función en algunos puntos de un rectángulo con centro el punto x_0 y de lados $2\epsilon_i$, $2\epsilon_j$. Los puntos, además de los ya definidos, le llamaremos $f_{i+,j+}$, $f_{i+,j-}$, $f_{i-,j+}$, $f_{i-,j-}$.

La figura 2 representa la situación relativa de estos puntos y la función asociada a ellos.

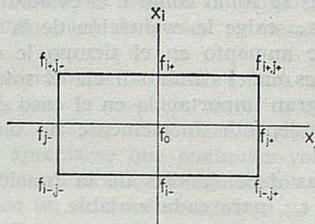


FIG. 2

Conocidos estos valores de la función, son varias las expresiones que permiten el cálculo numérico de las derivadas cruzadas. Como más significativas damos las siguientes indicando los errores de truncación para cada una de ellas:

1)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{f_{i+,j+} - f_{i+,j-} - f_{i-,j+} - f_{i-,j-}}{4 \epsilon_i \epsilon_j} + (E_t)_1$$

$$(E_t)_1 = \frac{1}{6} \frac{\partial^4 f}{\partial x_i^3 \partial x_j} \epsilon_i^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^4 f}{\partial x_i \partial x_j^3} \epsilon_j^2$$

2)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{f_{i+,j+} + f_{i+,j-} + f_{i-,j+} + f_{i-,j-} - f_{i+,j-} - f_{i-,j+} - 2f_0}{2 \epsilon_i \epsilon_j} + (E_t)_2$$

$$(E_t)_2 = (E_t)_1 + \frac{1}{4} \frac{\partial^4 f}{\partial x_i^2 \partial x_j^2} \epsilon_i \epsilon_j$$

3)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{f_{i+, j+} - f_{i+} - f_{j+} + f_0}{\epsilon_i \epsilon_j} + (E_i)_3$$

$$(E_i)_3 = (E_i)_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2 \partial x_j} \epsilon_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \epsilon_j$$

Como puede apreciarse los errores van aumentando desde la 1) hasta la 3); sin embargo, recordando que las funciones f_{i+} , f_{i-} , f_{j+} , f_{j-} ya han sido evaluadas para el cálculo de las derivadas primeras y segundas, se puede observar que la primera fórmula requiere el cálculo de la función en cuatro nuevos puntos, la segunda en dos y la tercera en uno. Este compromiso entre precisión y tiempo de cálculo requiere una solución distinta según los problemas concretos.

En el caso de optimización de funciones de mérito para sistemas ópticos, la primera fórmula queda normalmente descartada por el elevado número de cálculos de la función $n(n-1)$

derivadas cruzadas distintas. La segunda es la más indicada para casos en los que se requiere gran precisión; ya que sin ser excesivo el número de evaluaciones de la función, su error, al igual que en el primer caso, es de orden dos en ϵ y por lo tanto muy pequeño.

La tercera presenta errores de orden uno en ϵ y por ello más fuertes que en los casos anteriores. En nuestro problema hemos probado estas dos últimas, obteniéndose diferencias de 2 ó 3 % en los valores de las derivadas cruzadas, y por ello elegimos la tercera expresión a causa de la mayor rapidez en su evaluación.

El ϵ_{opt} para las derivadas cruzadas, como puede observarse de las expresiones del error de truncación, tiene una dependencia cruzada en los ϵ lo que dificulta la obtención de un ϵ_{opt} sin excesivas evaluaciones de la función. Como indicábamos en el apartado anterior, hemos probado con los ϵ_{opt} de las derivadas primeras, con los de las segundas y con los definidos por combinación de ellos, dando los mejores resultados para la relación:

$$\epsilon_{opt} = \frac{3}{4} \epsilon^1_{opt} + \frac{1}{4} \epsilon^2_{opt}$$

Esta utilización de un ϵ_{opt} común para todas las derivadas ha permitido hacer uso de los mismos valores de la función para obtener todas las derivadas.

La tabla IV da el número de evaluaciones de la función para los distintos cálculos.

TABLA IV

<i>n</i> : número de parámetros Cálculo de	Número de evaluaciones de la función
Derivadas primeras	$2n + 1$
Derivadas primeras, segundas y cruzadas.	$2n + 1 + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n^2}{2} + \frac{3}{2}n + 1$
Derivadas primeras y ϵ óptimos	$4n + 1$
Derivadas primeras segundas, cruzadas y ϵ óptimos	$4n + 1 + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n^2}{2} + \frac{7}{2}n + 1$

Extrapolación de Richardson

Hay casos en los que se precisan valores más exactos de las derivadas y esto puede conseguirse por el método de extrapolación de RICHARDSON (4). Este procedimiento eleva el número de cálculos de la función, y sólo deberá emplearse en zonas de convergencia difícil, o también cuando se calculan los ϵ_{opt} que obligan a cuatro evaluaciones de la función y permite aprovechar estos valores para obtener mayor precisión en las derivadas.

Cuando se dispone de 5 puntos ($f_0, f_+, f_{2+}, f_-, f_{2-}$) necesarios para el cálculo de los ϵ_{opt} , puede obtenerse:

$$G_0^0 = (DP)_{2\epsilon_{opt}} \quad \text{o bien} \quad G_0^0 = (DS)_{2\epsilon_{opt}}$$

$$G_1^0 = (DP)_{\epsilon_{opt}} \quad \text{o bien} \quad G_1^0 = (DP)_{\epsilon_{opt}}$$

y con ello

$$G_1^1 = \frac{16}{15} G_1^0 - \frac{1}{15} G_0^0$$

Los valores de G_1^1 tienen normalmente errores inferiores al 0.1 %. En los pasos en los que se calcula el ϵ_{opt} , aprovechando los 5 valores de la función, se pueden obtener unos buenos valores de las derivadas.

En el cálculo inicial de los ϵ_{opt} el valor de G_1^1 puede servir para calibrar la calidad del ϵ_{opt} obtenido; G_1^1 puede tomarse aproximadamente como valor exacto de la derivada, si G_1^0 difiere en más del 1 % de G_1^1 deberá recalcularse ϵ_{opt} , de este modo se tiene una gran seguridad de disponer de un buen valor de ϵ_{opt} inicial.

Método del gradiente optimizado

Resuelto el problema de cálculo de las derivadas con precisión analizaremos el método de optimización.

Prácticamente, todos los criterios de minimización están basados en incrementar las variables en la dirección contraria al gradiente \vec{G} en cantidades definidas por un coeficiente:

$$\vec{\delta x} = -\lambda \vec{G}$$

La obtención de λ diferencia unos métodos de otros.

En el caso del gradiente optimizado se calcula un λ tal que la disminución del valor de la función sea máximo, es decir que $\delta f(\vec{\delta x})$ sea máxima.

Existen varios procedimientos para el cálculo de λ , de modo que f sea un extremal. Los más usuales suelen ser:

1. — Desarrollando δf hasta orden 2.º se obtiene:

$$\delta f = \vec{G} \cdot \vec{\delta x} + \frac{1}{2} \vec{\delta x} \cdot D \cdot \vec{\delta x}$$

donde D es la matriz de las derivadas segundas. Dado que $\vec{\delta x} = -\lambda \vec{G}$, puede sustituirse $\vec{\delta x}$ en la expresión anterior y derivando respecto a λ se obtiene

$$\lambda_{opt} = \frac{\vec{G} \cdot \vec{G}}{\vec{G} \cdot D \cdot \vec{G}}$$

FORMULACION Y ESTUDIO DE UN METODO OPTIMIZACION PARA PROBLEMAS DE DISEÑO

Este procedimiento en el caso óptico tiene el inconveniente del cálculo de D , obligando a obtener la función un número elevado de veces. Además, este procedimiento no tiene en cuenta órdenes superiores que pueden ser de gran importancia.

2. — También puede obtenerse sabiendo que λ_{opt} es aquel que verifica $\vec{G}(\lambda_{opt}) \cdot \vec{G}(0) = 0$, este método es conocido por el nombre de gradientes conjugados.

Para el caso óptimo este sistema es más perjudicial incluso que el anterior, pues en los sucesivos pasos de aproximación para el cálculo de λ_{opt} es preciso calcular \vec{G} con el consiguiente número de cálculos de la función.

3. — Hemos encontrado que el método menos costoso y más seguro es la obtención directa del mínimo de la función $f(\lambda)$ respecto a λ .

$$f(x) = f(\vec{x}_0 + \delta \vec{x}) = f(x_0 - G_0 \lambda)$$

donde la única variable es λ .

Este problema se reduce al cálculo del mínimo de una función de una variable cuya solución puede encontrarse rápidamente por el método del Steepens-Descendt.

En este algoritmo el paso hacia el mínimo viene dado por

$$\delta x = - \frac{f'_\lambda}{f''_\lambda}$$

En nuestro caso:

$$f'_\lambda = \frac{f[\vec{x}_0 - \vec{G}_0(\lambda + d\lambda)] - f[\vec{x}_0 - \vec{G}_0(\lambda - d\lambda)]}{2d\lambda} = \frac{f_{+\lambda} - f_{-\lambda}}{2d\lambda}$$

$$f''_\lambda = \frac{f_{+\lambda} + f_{-\lambda} - 2f_0}{(d\lambda)^2}$$

$d\lambda$ también deberá ser el óptimo para la derivación, por eso en cada paso se calculan inicialmente 5 puntos con el $d\lambda_{opt}$ del paso anterior, y se evalúa de nuevo $d\lambda_{opt}$ para el paso presente.

Dada la fuerte convergencia de este método en una variable y forma de dependencia de $f(\lambda)$ frente a λ , sólo son precisos 2 ó 3 pasos para encontrar el mínimo deseado, lo que exige un reducido número de cálculos de la función.

La tabla V muestra una de las obtenciones del mínimo de $f(\lambda)$ respecto a λ para el sistema que estudiamos.

TABLA V

$(d\lambda_{opt})_{inicial} = 0.0405$			$(d\lambda_{opt})_{actual} = 1.123$			
Iter.	f	f'_λ	f''_λ	$\Delta \lambda$	λ	f_{nueva}
1	0.007397	-0.541×10^{-4}	0.435×10^{-5}	12.42	12.42	0.007008
2	0.007008	-0.111×10^{-4}	0.293×10^{-5}	3.78	16.20	0.00698684
3	0.00698684	-0.0044×10^{-4}	0.270×10^{-5}	0.16	16.36	0.00698680

Como puede apreciarse, la tercera iteración da el valor de λ_{opt} , esto ha exigido 11 cálculos de la función (5 para la primera iteración y 3 para cada una de las siguientes) muy inferior al exigido por el cálculo de la matriz de las derivadas (28 para un caso como el nuestro de 8 parámetros). Para tener seguridad de haber calculado el mínimo se obtuvo una tabla de $f(\lambda)$ frente a λ , observándose un mínimo en el punto solución,

este resultado era previsible dado el valor de la derivada primera (dos órdenes de magnitud inferior al inicial) lo que indicaba la existencia de un mínimo.

El método del gradiente optimizado, así formulado, es de una gran convergencia en los primeros pasos; sin embargo, en seguida se entra en una zona de «estancamientos» (5) donde es conveniente recurrir a procedimientos más sofisticados para salvar este perjudicial fenómeno. La causa de los «estancamientos» es intrínseca al propio método del gradiente, siendo inevitable desde el principio de su utilización. Efectivamente, en el espacio de las variables los puntos de igual valor de la función suelen ser hiperelipsoides con los semiejes muy diferentes, el método del gradiente conduce rápidamente a los extremos de los elipsoides correspondientes a los semiejes mayores, produciéndose en esos momentos el «estancamiento» al intentar ir hacia el mínimo en la dirección de dichos semiejes, cambiando constantemente su dirección como muestra la figura 3.

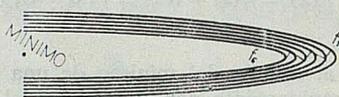


FIG. 3

Aceleración de convergencia

Para salvar el estancamiento definido en el apartado anterior, se utilizan métodos de aceleración:

1. — Algunos de ellos están basados en la obtención por extrapolación de la dirección hacia el mínimo. Sin embargo, este procedimiento suele presentar grandes dificultades por no coincidir los semiejes de los elipsoides con los ejes de coordenadas de nuestras variables y las rotaciones oportunas para conseguir dicha coincidencia suponen una extremada complicación.

2. — Por ello resultan más eficaces los métodos que directamente tienen en cuenta estas circunstancias.

El usado por nosotros se ha mostrado de gran eficacia y está basado en: la deformación de la métrica en el espacio de las variables hasta convertir los hiper-elipsoides en hiper-esferas, téngase en cuenta que si esto se consigue exactamente en un solo paso de gradiente optimizado, se encontraría el mínimo. Sin embargo para simplificar el método se hacen aproximaciones no siempre exactas que si bien producen pasos de gran eficacia no dan exactamente el mínimo.

Si hacemos la hipótesis que las derivadas no van a variar mucho del punto donde nos encontramos al mínimo podemos poner

$$D_m \simeq D$$

$$(\delta x)_{\text{acelerado}} = \lambda' D^{-1} \vec{G}$$

$$\lambda'_{\text{opt}} = 1$$

Sin embargo, esta estimación de λ' al igual que ocurría en el método del gradiente no es muy precisa y resulta más eficaz calcular directamente el mínimo de $f(\lambda')$, pero ahora siguiendo la dirección acelerada.

$$f'(\delta x) = f(x_0 - \lambda' D_0^{-1} G_0)$$

donde \vec{G}_0 y D_0 son las derivadas en el punto \vec{x}_0 en el que nos encontramos, y f pasa a ser

una función de un solo parámetro donde aplicaremos el mismo procedimiento que el expuesto para el gradiente.

El método de aceleración requiere más cálculos que el del gradiente, pero evita el estancamiento por su fuerte convergencia. Debido a que no se tienen en cuenta derivadas de orden superior al segundo no da directamente sobre el mínimo, pero al descolocar del extremo del hiperelipsoide vuelve a ser muy eficaz el método del gradiente; *por ello una combinación adecuada de ambos métodos resulta de una fuerte convergencia y rapidez.*

En principio, los pasos acelerados deben emplearse el mínimo número de veces dado que son más laboriosos de realizar que los de gradiente, sin embargo, como su dirección apunta más directamente hacia el mínimo, que la dirección del gradiente, permite en algunos casos «saltar por encima» de algunos mínimos locales no muy fuertes como ocurre en el ejemplo aquí expuesto. Si se deja al método realizar 15 iteraciones de gradiente antes de una acelerada, como muestra la gráfica 4, entra en un mínimo local del cual resulta imposible salir, aunque se utilicen pasos acelerados u otros métodos.

Normalmente, realizadas las cuatro primeras iteraciones de aproximación al mínimo, se ha empleado un paso acelerado por cada paso de gradiente, obteniéndose el mínimo «absoluto» con un reducido número de iteraciones.

En la gráfica 4 puede observarse la eficacia de los pasos acelerados frente a los de gradiente, cuando aquéllos dejan de ser eficaces es por haber alcanzado el mínimo y el método debe pararse. Es conveniente hacer notar que la diferencia de los valores de la función alcanzada con el método del gradiente y el acelerado parece poco significativa, en la iteración 15. Sin embargo, en valores tan pequeños de la función de mérito, reducir 3 veces su valor representa una importante disminución en sus aberraciones.

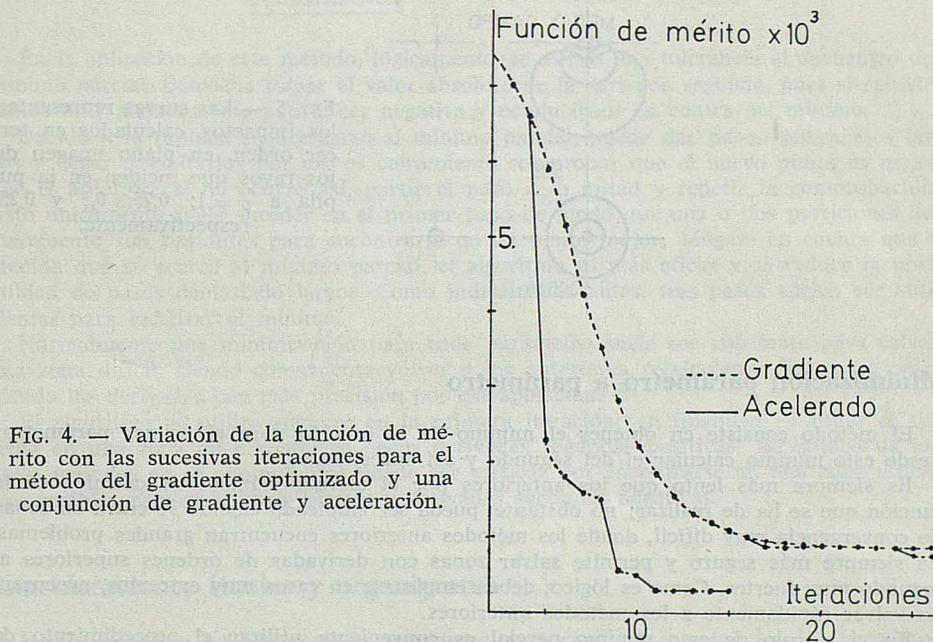


FIG. 4. — Variación de la función de mérito con las sucesivas iteraciones para el método del gradiente optimizado y una conjunción de gradiente y aceleración.

En la tabla VI se muestran las aberraciones en ambos puntos de la iteración 15.

En las gráficas 5 pueden apreciarse las manchas aberrantes para el sistema antes de corregir y después, respectivamente.

TABLA VI

Iteración 15 GRADIENTE	Iteración 15 ACELERADO
$f = 1.07848 \times 10^{-3}$	$f = 0.31581 \times 10^{-3}$
ESF = -0.054	ESF = 0.050
COMA = 0.010	COMA = 0.00037
AST = -0.269	AST = -0.144
C.S. = -0.201	C.S. = -0.186
C.T. = 0.068	C.T. = -0.043
DIST % = 0.18	DIST % = 0.011
CR.L = -0.027	CR.L = 0.014
CRT = 0.0012	CRT = 0.000070
FOCAL = 10.00	FOCAL = 10.00

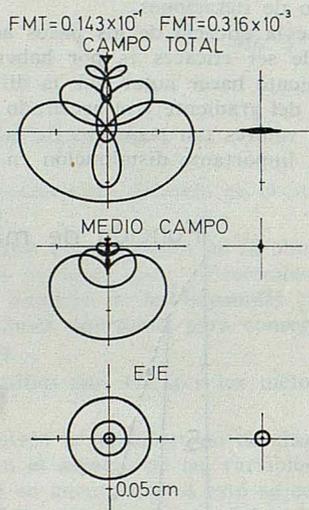


FIG. 5. — Las curvas representan los impactos, calculados en tercer orden, en plano imagen de los rayos que inciden en la pupila a $\rho = 1; 0,75; 0,5$ y $0,25$, respectivamente.

Minimización parámetro a parámetro

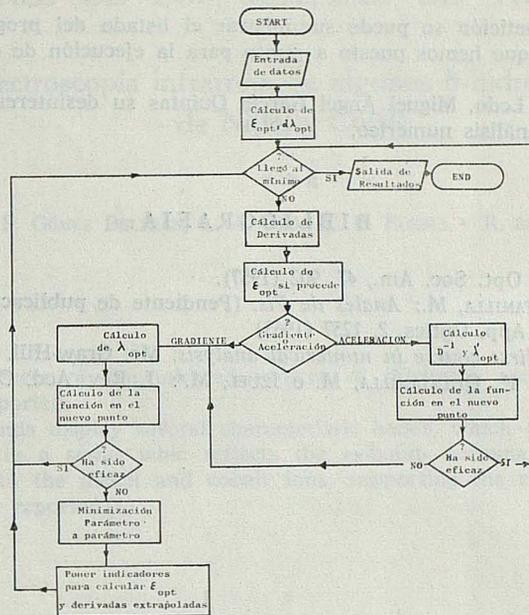
El método consiste en obtener el mínimo de la función para el primer parámetro; desde este mínimo calcular el del segundo y así sucesivamente.

Es siempre más lento que los anteriores por el elevado número de cálculos de la función que se ha de realizar; no obstante, puede ser empleado cuando se entra en zonas de convergencia muy difícil, donde los métodos anteriores encuentran grandes problemas. Es siempre más seguro y permite salvar zonas con derivadas de órdenes superiores al segundo muy fuertes. Como es lógico, deben emplearse en casos muy extremos, procurando volver rápidamente a los métodos anteriores.

En el cálculo de este mínimo parcial es conveniente utilizar el procedimiento de Steepens Descent para cada parámetro por ser el más rápido:

$$x_i = - \frac{f'_i}{f''_i}$$

Para el cálculo de f'_i y f''_i utilizaremos los ϵ_{opt} definidos anteriormente.



En la aplicación de este método, lógicamente, se asigna una tolerancia al encuentro del mínimo parcial. Conviene tomar el valor absoluto de la derivada segunda, pues si estuviésemos muy alejados ésta podría ser negativa y conducirnos en contra del mínimo.

Debido a la rapidez en acercarse al mínimo parcial, puede dar pasos demasiados largos y llegar a «saltarlo» por eso es conveniente comprobar que el nuevo punto es mejor que el anterior; si no ocurre así, partir el paso a la mitad y repetir la comprobación. Esto únicamente suele suceder en el primer paso de modo que una o dos particiones del incremento son bastantes para encontrarse en un punto mejor; téngase en cuenta que a medida que se acerca al mínimo parcial, el algoritmo es más eficaz y se reduce la posibilidad de pasos demasiado largos. Como indicábamos antes, tres pasos suelen ser suficientes para localizar el mínimo.

Normalmente una minimización para cada parámetro suele ser suficiente para salvar una zona difícil, siendo conveniente volver a los anteriores recalculando los ϵ_{opt} y obteniendo las derivadas con más precisión por extrapolación.

El algoritmo se utiliza siempre en la primera iteración; su finalidad es situar el sistema en una zona de mínimo, es decir, derivadas segundas positivas. El empleo de los otros métodos en el punto inicial puede ser ineficaz por encontrarse en una zona difícil, con posibles pendientes muy fuertes y derivadas segundas negativas.

Consideraciones finales y organigrama

Hemos expuesto un conjunto de algoritmos para conducir una función a sus valores óptimos, especialmente aplicados a sistemas ópticos mostrando su ventajas e inconvenientes. Por ello hemos realizado un programa que utiliza dichos algoritmos en diferentes etapas de la aproximación al mínimo, haciendo automático el paso de un método a otro según las características o dificultades en que se encuentra.

Un ejemplo de ello aparece en la gráfica 4. El organigrama general es el que a continuación se detalla.

NOTA. — Bajo petición se puede suministrar el listado del programa en FORTRAN para I. B. M. 1130 que hemos puesto a punto para la ejecución de este método de optimización.

Agradecemos al Lcdo. Miguel Angel García Quintas su desinteresada colaboración en los problemas de análisis numérico.

BIBLIOGRAFIA

1. FEDER, D. P.: J. Opt. Soc. Am., 47, 902 (1957).
2. MAR, S. y QUINTANILLA, M.: *Anales de Fis.* (Pendiente de publicación).
3. SPENCER, G. H.: App. Optics, 2, 1257 (1963).
4. RALSTON, A.: *A first course in numerical analysis*. Mc. Graw-Hill.
5. MONEO, J. R. de F., QUINTANILLA, M. e IZUEL, M.: J. Rev. Acd. Ciencias, Zaragoza, 22 (1967).

ESTUDIO DE ALGUNOS «OXINATOS» COMPLEJOS DE IONES DE LOS METALES DE TRANSICION

III. — Espectroscopía infrarroja de algunos 8-hidroxiquinoleinatos de Ni(II) y Co(II)

P O R

F. GÓMEZ BELTRÁN, L. A. ORO, M. P. PUEBLA y R. DE VAL

Abstract

The main features of the infrared spectra of thirty-one nickel(II) and cobalt(II) «oxinates» are reported.

These compounds display several characteristic bands, which allow us to order the chelating agents in a series which reflects the « π -bond» forming power of the atoms directly bonded to the nickel and cobalt ions, supporting the chemical and magnetic studies previously reported (1).

Introducción

En trabajos anteriores hemos estudiado las propiedades magnetoquímicas en el rango 65-300K (1) y espectroscópicas en la zona del visible-ultravioleta (2) de los complejos de Ni^{++} y Co^{++} que forman la oxina y algunos de sus derivados sustituidos en posiciones 5 y 7, siendo todos los complejos obtenidos en el caso del ión Co^{++} , octaédricos de estequiometría $Co(oxina)_2(H_2O)_2$, mientras que con el ión Ni^{++} pudimos establecer una clasificación en tres categorías:

- a) Complejos paramagnéticos octaédricos en los que las dos moléculas de agua no se van fácilmente ni por tratamiento en vacío ni por calefacción.
- b) Complejos paramagnéticos octaédricos en los que las dos moléculas de agua se pierden espontáneamente o por medios suaves transformándose en diamagnéticos planocuadrados.
- y c) Complejos que al precipitar de la disolución acuosa aparecen ya como diamagnéticos y planocuadrados.

Estos resultados parecen indicar que los sustituyentes en la oxina son capaces de modificar su tendencia hacia la formación de un enlace π en anillo suficientemente robusto para ser capaz de proporcionar complejos planocuadrados y, por tanto, creemos que esta influencia debiera de manifestarse también en los espectros infrarrojos de los complejos. Por este motivo hemos realizado este trabajo que ha estado precedido de un estudio previo de todas las oxinas libres formadoras de los complejos aquí estudiados (3).

Resultados

Los resultados de nuestras asignaciones, ampliamente basadas en nuestro estudio de las oxinas libres (3) y en otros trabajos (4) y (5) se recogen en las Tablas I, II y III. De ellas se deducen para los comportamientos de las bandas más significativas los siguientes extremos:

TABLA I. — Complejos octaédricos de cobalto (II)

Fórmula del complejo	$\nu(OH)$	$\delta(OH)$	$\nu(CN)$	$\nu(CO)$	$\nu(OH)$ $\Delta 1/2$	δ anillo quelato	$\nu(Co-O)$	$\nu(Co-N)$	$\nu(Co-OH_2)$
$Co(5SO_3Na7Ioxina)_2 \cdot 6H_2O$	{ 3300 3400 h.	1630 m.	1370 f.	1040 f.	605 f.	435 m.	270 d.	—	—
$Co(5SO_3Naioxina)_2 \cdot 4H_2O$	{ 3340 3230 h.	1635 d.	1327 f.	1070 f.	650 m.	424 f.	270 f.	—	(209) f.
$Co(5Cloxina)_2 \cdot 2H_2O$	3220	1640 d.	1320 f.	1080 f.	670 d.	428 m.	278 m.	245 h.d.	209 f.
$Co(5Broxina)_2 \cdot 2H_2O$	3200	1630 d.	1318 f.	1080 f.	649 d.	417 m.	290 d.d.	244 m.	205 f.
$Co(5CH_3oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3200	1640 m.	1325 f.	1090 f.	670 m.	422 m.	292 m.	278 m.	218 f.
$Co(5NHCOCH_3oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3250	1650 m.	1323 f.	1100 m.	665 m.	440 m.	275 d.	235 h.m.	(~ 200)
$Co(5N = N.C_6H_5oxina)_2 \cdot 2H_2O$	{ 3220 3100 h.	1570 f.	1320 f.	1097 m.	650 m.	{ 475 m. 415 m.	304 m.	282 d.	210 h.f.
$Co(oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3230	1635 m.	1323 f.	1105 f.	673 m.	387 f.	290 f.	245 h.d.	204 f.
$Co(5,7Cl_2oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3280	1687 d.	1362 h.f.	1112 m.	665 m.	445 m.	353 m.	—	—
$Co(5Cl7Broxina)_2 \cdot 2H_2O$	3260	1670 d.	1360 f.	1103 m.	650 m.	440 d.	349 m.	—	—
$Co(5Cl7Ioxina)_2 \cdot 2H_2O$	3300	1665 m.	1370	1107 f.	610 m.	432 d.	349 m.	—	—
$Co(5,7Br_2oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3280	1680 m.	1355 f.	1105 f.	660 m.	440 d.	340 m.	—	—
$Co(5,7I_2oxina)_2 \cdot 2H_2O$	3295	1660	1349 f.	1103 m.	650 m.	429 d.	317 f.	—	—

f: fuerte; m: media; d: débil; d.d.: muy débil; h: hombro.

TABLA II. — Complejos octaédricos de níquel (II)

Fórmula del complejo	$\nu(\text{OH})$ $\Delta 1/2$	$\delta(\text{OH})$	$\nu(\text{CN})$	$\nu(\text{CO})$	$\Delta 1/2$ $\nu(\text{OH})$	δ Anillo quelato	$\nu(\text{Ni}-\text{O})$	$\nu(\text{Ni}-\text{N})$	$\nu(\text{Ni}-\text{OH}_2)$
Ni (5SO ₃ Na 7Ioxina) ₂ · 6H ₂ O	{ 3400 3200 h.	1625 d.	1370 f.	1040 f.	600 m.	445 d.	282 d.	—	—
Ni (5SO ₃ Na oxina) ₂ · 4H ₂ O	{ 3320 3220 h.	1635 d.	1330 f.	1070 f.	670 m.	425 f.	280 f.	—	{ 228 f. 223 m.
Ni (5Foxina) ₂ · 2H ₂ O	3180	1610 d.	1320 m.	1085 f.	630 m.	440 m.	298 m.	—	225 f.
Ni (5Cl oxina) ₂ · 2H ₂ O	3200	1630 d.	1320 f.	1080 f.	619 m.	422 m.	285 m.	(285 m.)	225 f.
Ni (5Broxina) ₂ · 2H ₂ O	3220	1635 d.	1321 f.	1084 f.	650 m.	420 d.	302 d.d.	248 d.	223 m.
Ni (5CH ₃ oxina) ₂ · 2H ₂ O	3170	1638 d.	1329 f.	1092 f.	680 m.	425 m.	301 d.	270 d.	225 f.
Ni (5NHCOCH ₃ oxina) ₂ · 2H ₂ O	3270	1645 f.	1325 f.	1100 m.	{ 660 m. 610 m.	440 m.	280 d.	245 m.	225 f.
Ni (5N=N-C ₆ H ₅ oxina) ₂ · 2H ₂ O	{ 3380 3140 h.	1600 d.	1334 f.	{ 1100 d. 1090 d.	650 m.	{ 470 f. 415 d.	308 m.	282 d.	223 f.
Ni (oxina) ₂ · H ₂ O	3220	{ 1684 d. 1636 m.	1326 f.	1105 f.	675 m.	390 f.	299 f.	266 d.	215 f.
Ni (5,7Cl ₂ oxina) ₂ · 2H ₂ O	3340	1640 m.	1365 f.	1105 f.	630 m.	449 d.	360 m.	—	239 m.
Ni (5Cl7Broxina) ₂ · 2H ₂ O	3370	1645 m.	1362 f.	1109 f.	540 m.	435 d.	350 d.	—	—
Ni (5Cl7Ioxina) ₂ · 2H ₂ O	3340	1675 m.	1367 f.	{ 1117 1108	600 m.	440 m.	355 d.	—	—
Ni (5,7Br ₂ oxina) · 2H ₂ O	3330	1650 d.	1360 f.	1105 f.	540 d.	430 d.	350 m.	—	229 m.

TABLA III. — Complejos plano-cuadrados de níquel (II)

Fórmula del complejo	ν (CN)	ν (CO)	δ Anillo quelato	ν (Ni—O)	ν (Ni—N)
Ni (5,7Cl ₂ oxina) ₂	1368 f.	1110 f.	450 d.	395 m.	—
Ni (5Cl7Broxina) ₂	1370 f.	1119 m.	449 d.	371 d.	—
Ni (5Cl7Ioxina) ₂	1368 f.	1115 f.	450 d.	368 d.	—
Ni (5,7Br ₂ oxina) ₂	1372 f.	1120 f.	432 m.	373 d.	—
Ni (5,7I ₂ oxina) ₂	1365 f.	1115	423 m.	368 d.d.	—
Ni (5Ioxina) ₂	1370 f.	1119 1115	400 m.	362 m.	—

Frecuencia de tensión ν (OH) del agua

Es de esperar que la frecuencia de tensión ν (OH) del agua se vea ampliamente afectada cuando esta molécula pasa a formar parte de un complejo y así lo establecen por ejemplo los cálculos teóricos realizados por Sartori et al (6). De acuerdo con ello hemos intentado obtener un criterio ordenador de la mayor o menor coordinación de las dos moléculas de agua unidas al ión central, criterio que hemos aplicado sólo a los complejos más sencillos pues en complejos con ligandos tales como el grupo sulfonato coexisten aguas de coordinación y aguas de hidratación, siendo muy probable la existencia de puentes de hidrógeno que deberán afectar a dichas vibraciones. Los complejos tratados con este criterio se clasifican en la Tabla IV en los tres grupos a, b y c de acuerdo con los tipos de complejos que pueden formar las «oxinas» con el ión Ni⁺⁺ expuestos anteriormente.

De esta Tabla IV puede deducirse que los complejos con ligandos de la clase a) que poseen las aguas fuertemente unidas, presentan una apreciable reducción de la frecuencia de la banda ν (OH) frente a la que posee en el agua libre (ν OH = 3520) (6), con valores en todos los casos inferiores a 3250 cm.⁻¹, mientras que los ligandos de las clases b) y c), que en el caso de los complejos de níquel pierden fácilmente las moléculas de agua o aparecen directamente planocuatros, forman complejos de Ni(II) en los que los valores de ν (OH) son superiores a 3310 cm.⁻¹, mientras que estos mismos ligandos unidos al ión Co(II) al que se encuentran siempre establemente unidas las moléculas de agua forman complejos hidratados en los que la ν (OH) de las aguas poseen valores intermedios entre 3250 y 3310 cm.⁻¹. Este último hecho nos pone de manifiesto que en estos complejos octaédricos de cobalto se ha producido, frente a los complejos de la clase a), un debilitamiento del enlace cobalto-agua coordinada y un incremento de la robustez de los enlaces oxina-metal en el plano.

Consideremos conveniente comentar que las bandas correspondientes a ν (OH) son bandas usualmente anchas, existiendo por tanto un cierto error en su asignación pero, no obstante, existe un adecuado paralelismo en el aumento de la frecuencia de dichas vibraciones de tensión ν (OH) y la disminución de los valores de momento magnético en los complejos de cobalto que previamente (1) habíamos interpretado a través de un progresivo «quenching» de la contribución orbital originado por una creciente distorsión tetragonal, conectada por tanto con el debilitamiento del enlace cobalto-agua coordinada.

TABLA IV.—Vibración de tensión $\nu(\text{OH})$ en algunos complejos de níquel(II) y cobalto(II)

Ligando	Clase	Complejo de níquel (II)	Complejos de cobalto (II)
5F oxina	a	3.180	—
5Cl oxina	a	3.200	3.220
5Br oxina	a	3.220	3.200
5CH ₃ oxina	a	3.170	3.200
Oxina	a	3.170	3.190
5,7Cl ₂ oxina	b	3.350	3.280
5,7Br ₂ oxina	b	3.320	3.280
5Cl,5Br oxina	b	3.370	3.280
5Cl,7I oxina	b	3.340	3.290
5,7I ₂ oxina	c	*	3.290

* No forma compuestos octaédricos dihidratados, sino únicamente planocuadrados.

Vibraciones de tensión $\nu(\text{C—O})$ y $\nu(\text{C—N})$

La vibración de tensión $\nu(\text{C—OH})$ aparece (3) en las oxinas libres hacia 1280 cm^{-1} , con algunas variaciones según los sustituyentes, mientras que la vibración de tensión del enlace C—N suele aparecer algo más alta, pero a veces incluso acopladas.

Sin embargo cuando el oxígeno fenólico de estas oxinas se une al metal, la vibración anterior se desplaza a la zona de 1100 cm^{-1} (asignación previamente realizada por Charles y colab. (7)).

Observando los datos de $\nu(\text{C—O})$ y $\nu(\text{C—N})$ en las Tablas I, II y III destaca inmediatamente el hecho de que al convertirse los complejos octaédricos de níquel con ligandos de la clase b) en anhídros y diamagnéticos (Tablas II y III), la banda de tensión del sistema C—O se desplaza hacia frecuencias mayores respecto a la posición que ocupaban en los correspondientes complejos hidratados, lo que significaría que un aumento del enlace π en anillo (8), responsable de la formación de compuestos plano-cuadrados, lleva la banda de tensión indicada a la posición que presenta en el bis (5,7-diiodo-oxinato) de níquel(II), sustancia que aparece espontáneamente como compuesto plano-cuadrado y diamagnético aun en presencia de agua.

Otro hecho interesante es que, dejando aparte la 8 hidroxiquinoleína, en los complejos de Co(II) (Tabla I) formados por las oxinas» de las clases b) y c), las frecuencias $\nu(\text{C—O})$ son más altas por lo general que las de los complejos formados por oxinas del tipo a), lo que revela que los dihalogen-derivados de la oxina forman compuestos, tanto con Ni(II) como con Co(II) en los que los enlaces C—O son más robustos que los que aparecen en los complejos formados por oxinas de la clase a).

En cuanto a la vibración C—N se produce un apreciable aumento en su frecuencia de vibración, respecto a la que tenía en los ligandos puros, al obtenerse el correspondiente complejo, pudiéndose concluir de las Tablas I, II y III que la frecuencia C—N aparece, en general, algo más alta en los complejos con ligandos de la clase b) y c) que en los complejos de la clase a). Sin embargo, no es posible obtener una adecuada secuencia de robusteces de enlace con esta banda ya que, en la mayor parte de los complejos obtenidos, aparece mezclada con las vibraciones (C = C) del anillo quinoleínico (3).

Frecuencia de tensión metal-ligando

Hemos recogido en las Tablas I, II y III, las posibles frecuencias de las tres vibraciones asimétricas metal-ligandos existentes, metal-oxígeno y metal-nitrógeno de la oxina, así como metal-agua en aquellos casos en los que nos ha sido posible realizar una asignación.

En el caso de la vibración $\nu(O-M)$ es posible observar que en compuestos octaédricos de Ni(II) y Co(II) de la clase a) la vibración $\nu(OM)$ es en todos los casos inferior a 310 cm^{-1} , mientras que en los de la clase b) y c) está comprendida entre 317 y 360 estando pues de acuerdo estos mayores valores del enlace oxígeno-metal con la fácil tendencia a la formación de compuestos plano-cuadrados. Cuando se producen a partir de éstos los compuestos diamagnéticos planocuadrados el incremento es todavía mayor oscilando entre 365 y 400 cm^{-1} .

Para las frecuencias de las vibraciones $\nu(N-M)$ debemos señalar en primer lugar que aparecen con una intensidad mucho menor (4) y en algunos casos como hombros por lo que, aquellos casos en los que hemos realizado la asignación, deben ser mirados con cautela.

Finalmente en los complejos octaédricos de la clase a) es posible observar la aparición de una banda asignable a $\nu(H_2O-M)$ en posición algo superior a 200 cm^{-1} , pero que en complejos de la clase b) y c) baja por debajo del límite de nuestro aparato (200 cm^{-1}) por lo que no es detectable.

Discusión

Los datos de frecuencias infrarrojas aquí presentadas corroboran a grandes rasgos las conclusiones ya obtenidas en (1) y (2), poniendo de manifiesto diferencias apreciables en el comportamiento de los «oxinatos» procedentes de los tres tipos de «oxinas» allí establecidos es decir, las a), b) y c). Ahora bien, las frecuencias infrarrojas, en especial las correspondientes a los grupos directamente implicados en los enlaces ligando-metal, ponen de manifiesto en forma clara el robustecimiento del enlace «complejo» al formarse los compuestos tetracoordinados y planocuadrados de Ni(II) por deshidratación de los exacoordinados y octaédricos correspondientes (comparar $\nu(O-M)$ en Tablas II y III).

Es una circunstancia desafortunada que no hayamos sido capaces de identificar las frecuencias $\nu(N-M)$ en los complejos plano-cuadrados estudiados pues, ellas, creemos que hubiesen corroborado lo que indican las $\nu(O-M)$, sin embargo, el número de datos presentados sobre los enlaces $O-M$, tanto en oxinatos complejos de Ni(II) como de Co(II), creemos que permite asegurar que las dihalogen oxinas 5,7 forman quelatos con Ni^{2+} y Co^{2+} en los que los enlaces en el plano son más robustos que los que forman las oxinas monosustituidas en posición 5 en los correspondientes complejos con estos iones y que, dichos enlaces, todavía se robustecen más al formarse los complejos planocuadrados de Ni(II).

A la vez que se produce este hecho, los datos espectroscópicos infrarrojos ponen también de manifiesto que la dihalogen sustitución en 5,7 en la oxina, produce oxinatos complejos con Ni^{2+} y Co^{2+} en los que los enlaces $C-O$ y $C-N$ (correspondientes a los grupos fenol y quinoleína) implicados próximamente en las uniones quelante-metal también aumentan su robustez respecto a la que tienen en los complejos formados por la oxina y sus 5 monoderivados.

Por otra parte, los datos espectroscópicos infrarrojos ponen de manifiesto que este robustecimiento de, prácticamente, todas las uniones del anillo quelato va acompañado de una simultánea labilización de las uniones metal- OH_2 .

De todas estas observaciones la más sorprendente tal vez es la que indica el simultáneo fortalecimiento de los enlaces O—M y C—O y, presumiblemente también, de los N—M y C—N al formarse el complejo planoc cuadrado, pues cualquier modelo mecanicista del enlace parece exigir que un robustecimiento de las uniones O—M y N—M debiera de dar lugar, por reacción, a enlaces O—C y N—C inmediatos más débiles que antes. Este fenómeno no parece que suceda así en este caso.

Parece evidente, a primera vista, que una adecuada combinación de efectos inductivos y mesómeros debiera de dar cuenta de los efectos observados, sin embargo no resulta fácil de explicar el robustecimiento simultáneo de todos los enlaces del ciclo quelato que los espectros infrarrojos antes presentados indican, toda vez que, como algunos datos de constantes de disociación ácida (9) ponen de manifiesto, estos efectos se traducen en un aumento de la acidez del grupo OH fenólico con la halogen sustitución en la oxina en el sentido Cl, Br I. Este hecho, a primera vista, no es fácil de poner de acuerdo con el paralelo robustecimiento de los enlaces O—Ni y O—Co que se observa en los complejos de las 5 halogen oxinas correspondientes, en especial en la 5 iodo oxina.

De cualquier modo, y aunque por el momento no encontremos un modelo que resuelva todas las cuestiones que presenta el comportamiento fisicoquímico de los complejos de Ni^{2+} y Co^{2+} de las «oxinas» estudiadas, lo cierto es que la formación de complejos planoc cuadrado en las 5,7 dihalogen sustituidas va acompañada de la formación de un ciclo quelato en el que todos los enlaces presentes tienen mayor grado de enlace que el que presentan en los correspondientes oxinatos octaédricos. El que la obtención del diamagnetismo se produzca a través de un mecanismo en el que están implicados todos los enlaces del ciclo quelato y no sólo los O—M y N—M, conduce a suponer que es la deslocalización del sistema de dobles enlaces de la quinoleína la causa principal de la estabilización de la simetría D_{2h} planoc cuadrada, y no sólo la variación que producen en la electronegatividad de los átomos de oxígeno y nitrógeno los sustituyentes en 5 y 7 presentes en la «oxina».

Algunos de los hechos observados en los espectros ultravioletas presentados en (2) parece que apuntan en la misma dirección por lo que creemos que la investigación fisicoquímica sobre los «oxinatos» metálicos de iones de transición dista mucho de ser un tema de trabajo cerrado.

BIBLIOGRAFIA

1. F. GÓMEZ BELTRÁN, L. A. ORO y J. PISA: Rev. Acad. Ciencias Zaragoza, 26, 413 (1971).
2. F. GÓMEZ BELTRÁN, A. ROY, L. A. ORO y F. PALACIO: Rev. Acad. Ciencias Zaragoza, 26 (1971).
3. R. DE VAL: *Tesis Doctoral*, Universidad de Zaragoza (1975).
4. J. E. TACKETT y D. T. SAWYER: Inorg. Chem., 3, 692 (1964).
5. N. OHKAKU y K. NAKAMOTO: Inorg. Chem., 10, 798 (1971).
6. G. SARTORI, C. FURLANI y A. DAMIANI: J. Inorg. Nucl. Chem., 8, 119 (1958).
7. R. G. CHARLES, H. FREISER, R. FRIEDEL, L. E. HILLIARD y W. D. JOHNSTON: Spectrochim. Acta, 8, 1 (1956).
8. H. B. GRAY: *Transition Metal Chemistry*, Ed. R. L. Carlin, V. 1, New York, 240 (1965).
9. M. R. CHAKRABARTY, E. S. HANRAHAN, N. D. HEINDEL y G. F. WATS: Anal. Chem. 39, 238 (1967).

DETERMINACION DE LAS CONSTANTES DE DISOCIACION DEL PIROGALOL Y DE LA CONSTANTE DE ESTABILIDAD DEL PIROGALATOCOBALTO(II)

P O R

J. BELTRÁN y A. TRINIDAD

Departamento de Química Inorgánica de la Facultad de Ciencias
de la Universidad de Valencia

Abstract:

By the application of potentiometric methods have been determined the stability constant of pyrogallatecobalt(II), whose zone of existence, preparation and analysis were the object of previous works and the dissociation constants of pyrogallol. As they constitute data for its calculation, before determining the stability constant of this complex compound it was considered necessary to determine the dissociation constants of pyrogallol since the two values supplied by the bibliography for the second constant present a considerable discrepancy.

1. Introducción

Gracias a los estudios realizados en atmósfera inerte sobre la interacción química del pirogalol (1, 2, 3 trihidroxibenceno) y el Co(II) en diferentes condiciones de concentración, de relaciones molares y de pH, hemos podido conocer la zona de existencia del complejo no iónico CoPg (Pg es la abreviatura del anión pirogalato $C_6H_3O_3^{2-}$) y, además, conseguir su precipitación en disoluciones concentradas (1).

El citado complejo se forma para cualquier relación $PgH_2/Co(II)$ siempre que las disoluciones de pirogalol y Co(II) se neutralicen de tal forma que el cociente entre los oxhidrilos añadidos y el cobalto inicial sea inferior a 2.

La exigencia de tener que trabajar en atmósfera inerte, en nuestro caso de nitrógeno, para evitar la oxidación del pirogalol, nos obligó a determinar la constante de estabilidad de este complejo mediante la aplicación del método potenciométrico. Desde los clásicos trabajos de Schwarzenbach (2) y colaboradores en 1947, que aplicando el método potenciométrico calculan las constantes de disociación de un gran número de ácidos orgánicos, hasta nuestros días, son numerosísimas las aplicaciones de las potenciometrías para calcular no solamente constantes de disociación sino, como en nuestro caso, constantes de estabilidad de complejos. Pero para poder utilizar este método era necesario conocer las constantes de disociación del pirogalol. La bibliografía nos proporciona dos trabajos sobre estas constantes: uno de J. Sunkel y H. Staude (3) en 1968 y otro de G. Habashy y Z. Ahmed (4) en 1969. Los valores obtenidos por estos investigadores para la primera constante de disociación son muy concordantes pero no así para la segunda en la que se manifiesta una acusada diferencia. Por este motivo estimamos conveniente determinar estas constantes para poder establecer una comparación con los valores ya aportados por la bibliografía.

2. Determinación de las constantes de disociación del pirogalol

2.1. Fundamento teórico

En la aplicación del método potenciométrico para la evaluación de las constantes de disociación aparentes del pirogalol es necesario relacionar K_1 y K_2 (primera y segunda constante de disociación respectivamente) en una sola ecuación en la que el resto de las magnitudes se puedan conocer directa o indirectamente a través de los datos experimentales.

Si llamamos C a la molaridad inicial del pirogalol, debe cumplirse:

$$C = (\text{PgH}_2) + (\text{Pgh}^-) + (\text{Pg}^{2-}) \quad (1)$$

La ecuación anterior se convierte en la (2) si introducimos los valores de (Pgh^-) y (Pg^{2-}) en función de K_1 y de K_2 :

$$C = (\text{PgH}_2) + K_1 \frac{(\text{PgH}_2)}{(\text{H}^+)} + K_1 K_2 \frac{(\text{PgH}_2)}{(\text{H}^+)^2} \quad (2)$$

Por otra parte, la electroneutralidad de la disolución exige que:

$$(\text{H}^+) + (\text{K}^+) = (\text{Pgh}^-) + 2(\text{Pg}^{2-}) + (\text{OH}^-) \quad (3)$$

la (K^+) es debida a la adición de KOH para neutralizar el pirogalol.

Si en la ecuación (3) sustituimos (Pgh^-) y (Pg^{2-}) en función de (PgH_2) resulta:

$$[(\text{H}^+) + (\text{K}^+) - (\text{OH}^-)] [(\text{H}^+)^2 + \dots + K_1 (\text{H}^+) + K_1 K_2] = C [K_1 (\text{H}^+) + 2K_1 K_2] \quad (4)$$

y llamando

$$b = \frac{C}{(\text{H}^+) + (\text{K}^+) - (\text{OH}^-)} \quad x = K_1 \quad \text{e} \quad y = K_1 K_2$$

tenemos que:

$$y = -\frac{(b-1)(\text{H}^+)}{2b-1}x + \frac{(\text{H}^+)^2}{2b-1} \quad (5)$$

Para conocer K_1 y K_2 bastaría, pues, resolver el sistema de dos ecuaciones obtenido para dos valores distintos del pH. Sin embargo, y con el fin de eliminar en lo posible los errores experimentales, obtuvimos en nuestro caso el mayor número posible de expresiones de la ecuación (5) y resolvimos el problema matemático como más adelante se detalla.

2.2. Parte experimental

La valoración potenciométrica del pirogalol se realizó en un frasco de cuatro bocas sumergido en el agua de un termostato que permitía mantener la temperatura de la disolución a $20.0 \pm 0.1^\circ\text{C}$. Las cuatro bocas del aparato se utilizaron para la entrada y salida del nitrógeno —ya que todas las experiencias se realizaron en atmósfera inerte de nitrógeno, que se purificó del oxígeno que pudiera contener haciendo burbujear la corriente gaseosa a través de frascos lavadores con disoluciones de Cr(II) —, para la inserción de una bureta y para los dos electrodos.

DETERMINACION DE LAS CONSTANTES DE DISOCIACION DEL PIROGALOL

El pH-metro utilizado fue un Radiometer-22 conectado a un aparato auxiliar que apreciaba centésimas de unidad de pH. Después de considerar las ventajas y desventajas de los electrodos de hidrógeno y de vidrio (5), nos decidimos por éste último teniendo en cuenta nuestras condiciones de trabajo, pero estudiamos previamente su campo de aplicabilidad en zona alcalina. Por este motivo proyectamos una experiencia consistente en medir el pH de una serie de disoluciones de hidróxido de potasio de concentración conocida. Con los valores del pH_a obtenidos —valores que reflejan la actividad de los H^+ — y los calculados para el pOH_c , podemos comprobar la constancia del producto iónico del agua en el supuesto caso de que los electrodos del pH-metro arrojen valores correctos.

En efecto:

$$pH_a + pOH_a = pK_w$$

$$pH_a + pOH_c = pK_w - p\gamma_{OH} = Cte.$$

Los subíndices a indican actividad y c concentración. γ_{OH} es el coeficiente de actividad de los iones oxhidrilo. El valor medio obtenido para la suma de $pH_a + pOH_c$ es de 14'07 y el aportado por la bibliografía para $pK_w - p\gamma_{OH}$ de 14'05, a la temperatura y fuerza iónica correspondientes a la experiencia realizada.

Esta concordancia entre los valores citados nos indica que podemos trabajar con nuestro electrodo de vidrio siempre que el pH no sea superior a 12, que es la zona donde hemos comprobado el margen de confianza que nos permite el electrodo.

Comprobada la idoneidad del pH-metro, procedimos a seguir potenciométricamente el curso de la neutralización de una disolución de pirogalol con hidróxido de potasio. En el frasco de cuatro bocas se vertió una disolución que contenía 0'2500 g. de pirogalol (Riedel de Häen), 50'0 ml. de KCl 1M y agua destilada hasta un volumen de 500 ml. La fuerza iónica de esta disolución es 0'1 y su temperatura se mantuvo a $20'0 \pm 0'1^\circ C$. Durante toda la valoración se burbujeó nitrógeno para evitar la oxidación del pirogalol.

Se tomaron 21 lecturas del pH-metro, para otras tantas adiciones de KOH, por lo que se pudieron obtener 21 expresiones diferentes de la ecuación (5). El sistema de ecuaciones fue resuelto haciendo uso de un método iterativo con ayuda del ordenador IBM 7090 del Centro de Cálculo de la Universidad Complutense de Madrid.

Los valores calculados para pK_1 y pK_2 son los que se incluyen en las Tablas I y II respectivamente:

TABLA I

Valores medios parciales de K_1	Número de valores de cada serie	pK_1	Desviaciones respecto al valor medio total de pK_1
$0,558 \cdot 10^{-9}$	20	9,25	+ 0,05
0,568 »	19	9,25	+ 0,05
0,625 »	18	9,20	0,00
0,636 »	17	9,20	0,00
0,626 »	16	9'20	0,00
0,663 »	15	9,18	- 0,02
0,735 »	14	9,17	- 0,03
0,836 »	13	9,08	- 0,12

$$n = 132 \quad V_m = \frac{\sum f_i pK_i}{n} = 9,20$$

TABLA II

Valores medios parciales de K_1, K_2	Número de valores de cada serie	pK_2	Desviaciones respecto al valor medio total de pK_2
0,613 · 10 ⁻²⁰	19	11,01	- 0,27
0,479 »	18	11,12	- 0,16
0,272 »	16	11,37	+ 0,09
0,299 »	16	11,32	+ 0,04
0,266 »	15	11,38	+ 0,10
0,234 »	14	11,43	+ 0,15
0,242 »	13	11,42	+ 0,14
0,318 »	12	11,30	+ 0,02

$$n = 123 \quad V_m = \frac{\sum f_i pK_i}{n} = 11,28$$

La desviación típica calculada (7) para pK_1 y pK_2 es de 0,05 y 0,15 respectivamente. En el siguiente cuadro comparamos estos valores con los proporcionados por la bibliografía:

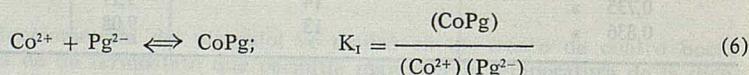
	J. Sunkel H. Staude (3)	G. Habashy Z. Ahmed (4)	Valores encontrados por nosotros
pK_1	9,28 ± 0,10	9,30	9,20 ± 0,05
pK_2	11,34 ± 0,15	11,86	11,28 ± 0,15

3. Determinación de la constante de estabilidad del pirogalatocobalto (II)

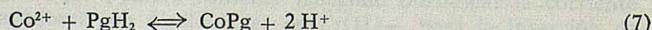
3.1. Fundamento teórico

En las gráficas correspondientes a las valoraciones potenciométricas realizadas durante la neutralización con KOH de disoluciones de Co(II) y pirogalol (1) se pone de manifiesto que para cualquier relación $Pg_2/Co(II) \geq 1$ se forma solamente el complejo CoPg siempre que el valor de la relación molar $OH^-/Co(II)$ sea inferior a dos. Esta circunstancia simplifica el tratamiento matemático que pretende relacionar la constante de estabilidad del pirogalatocobalto(II) con los datos experimentales.

En efecto, si llamamos K_1 a la constante de estabilidad del CoPg, su valor vendrá dado por:



pero el CoPg se puede considerar formado a través de la reacción:



DETERMINACION DE LAS CONSTANTES DE DISOCIACION DEL PIROGALOL

equilibrio químico que se desplaza hacia la derecha a medida que añadimos hidróxido de potasio. La constante del equilibrio (7) vendrá expresada por:

$$K' = \frac{(\text{CoPg})(\text{H}^+)^2}{(\text{Co}^{2+})(\text{PgH}_2)}$$

luego

$$K_1 = \frac{K'}{K_d} \quad (8)$$

(K_d es la constante de disociación global del pirogalol para la que hemos encontrado experimentalmente el valor de $10^{-20.48}$).

Con el fin de conocer K' vamos a establecer el siguiente sistema de ecuaciones en el que C representa la concentración total de Co(II), a la fracción nº de moles de $\text{OH}^-/\text{n}^\circ$ de moles de Co(II) y n la relación entre las concentraciones totales de pirogalol y Co(II):

$$nC = (\text{PgH}_2) + (\text{Pgh}^-) + (\text{Pg}^{2-}) + (\text{CoPg}) \quad (9_1)$$

$$C = (\text{Co}^{2+}) + (\text{CoPg}) \quad (9_2)$$

$$(\text{H}^+)_t = 2nC = 2(\text{PgH}_2) + (\text{Pgh}^-) + (\text{H}^+) + aC \quad (9_3)$$

Las ecuaciones 9₁, 9₂ y 9₃ son los balances del pirogalol, del Co(II) y de la acidez total inicial respectivamente.

Si se opera en la zona de pH comprendida entre 6 y 8, que es donde se forma el complejo CoPg según los estudios previos realizados (1), se pueden despreciar (H^+) y (Pg^{2-}) frente a los restantes términos, de mayor significación cuantitativa. La resolución del sistema de ecuaciones (9), con las exclusiones anteriores, y con el auxilio de las ecuaciones de numeración inferior, conduce a:

$$K' = \frac{[C(a-n) + (\text{PgH}_2)] \cdot (\text{H}^+)^2}{[C(1+n-a) - (\text{PgH}_2)] \cdot (\text{PgH}_2)} \quad (10)$$

Todas las magnitudes del segundo miembro de la ecuación (10) se pueden conocer experimentalmente, ya que el único dato no medible directamente, la concentración de pirogalol, se puede calcular a partir de la ecuación correspondiente a la primera constante de disociación del pirogalol K_1 y la ecuación (9₃). El valor obtenido para (PgH_2) es:

$$(\text{PgH}_2) = \frac{C(2n-a)}{2 + \frac{K_1}{(\text{H}^+)}} \quad (11)$$

Conocida K' , calculamos K_1 —constante de estabilidad del pirogalatocobalto(II)— por aplicación de la ecuación (8).

3.2. Parte experimental

En el frasco de cuatro bocas ya descrito para el caso del pirogalol, se vierten disoluciones de KCl y de $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ en concentraciones calculadas para que la fuerza iónica final fuera de 0,1.

La temperatura de la disolución fue de $20'0 \pm 0'1$ °C y durante todas las experiencias se burbujeó nitrógeno para evitar la oxidación del pirogalol. En la Tabla III se recogen los resultados obtenidos experimentalmente y los calculados a partir de éstos. El valor

de C , concentración total de Co(II) , disminuye muy lentamente debido a la dilución que se verifica por la adición de KOH .

TABLA III

n	pH_a	C	a	PgH_2	pK_1
1	7,57	$3,849 \cdot 10^{-3}$	0,229	$3,38 \cdot 10^{-3}$	-7,05
1	7,65	3,834 »	0,345	3,14 »	-7,14
1	7,71	3,819 »	0,459	2,91 »	-7,21
2	7,72	0,966 »	0,459	1,70 »	-7,36
2	8,02	0,962 »	0,919	1,48 »	-7,36
2	8,18	0,958 »	1,378	1,22 »	-7,39
3	7,47	0,966 »	0,459	2,66 »	-7,70
3	7,81	0,962 »	0,919	2,41 »	-7,50
3	8,03	0,958 »	1,378	2,16 »	-7,48

Valor medio de $\text{pK}_1 = -7,35$

La desviación típica calculada (7) para esta distribución de valores es de 0,19. Por tanto:

$$\text{pK}_1 = -7,35 \pm 0,19$$

Los cálculos realizados con este valor hallado para la constante de estabilidad del pirogalatocobalto(II) y con el producto de solubilidad del Co(OH)_2 demuestran que la disociación del complejo libera iones Co^{2+} en menor concentración que la exigida para la precipitación del Co(OH)_2 a cualquier pH. Así, pues, siempre que la relación $\text{PgH}_2/\text{Co(II)}$ sea igual o superior a la unidad, no precipitará el Co(OH)_2 , en total acuerdo con los hechos observados.

BIBLIOGRAFIA

1. J. BELTRÁN y A. TRINIDAD: *Complejos de Co(II) y pirogalol*. Esta Revista, tomo 30, números 1 y 2 (1975).
2. G. SCHWARZENBACH, A. WILLI und R. O. BACH: *Helv. Chim. Acta* 30-1316-1947.
3. J. SUNKEL und H. STAUDE: *Ber. Bunsenges Phys. Chem.* 72 (4)-567-1968.
4. G. M. HABASHY, Z. E. AHMED: *J. Electroanal. Chem. Interfacial Electrochem.* 20 (1)-120-1969.
5. M. DOLE: *Principios de Electroquímica*. Editorial Alhambra, 1952.
6. ROGER G. BATES: *Determination of pH*.
7. DIXON y MASSEY: *Introducción al análisis estadístico*. Ediciones del Castillo.

COMPLEJOS DE Co(II) Y PIROGALOL

P O R

J. BELTRÁN y A. TRINIDAD

Departamento de Química Inorgánica. Facultad de Ciencias
de la Universidad de Valencia (España)

Abstract

The chemical interaction of cobalt(II) and pyrogallol in acid and basic solutions have been experimentally studied by means of potentiometric and conductimetric titrations, with the purpose of obtaining information about the possible existence of new compounds. The obtained data have permitted to know the existence zones of new substances. Among these the pyrogallatecobalt(II) and dipirogallate- μ -dihydroxycobaltate(II) of cobalt(II) have been isolated and analysed.

A) Introducción

Las investigaciones realizadas para la preparación de complejos de pirogalol $C_6H_6O_3$, —abreviadamente PgH_2 — con iones metálicos son relativamente recientes, prácticamente posteriores a 1950. La razón de tal demora en la investigación sistemática de complejos con el pirogalol quizá sea la necesidad de trabajar en atmósfera rigurosamente inerte, dada la extraordinaria inestabilidad del pirogalol a causa de su fuerte carácter reductor, especialmente en disoluciones básicas.

Desde los primeros trabajos descritos por Takagi y Nagasa (1) en 1936 —sobre la preparación del $BiC_6H_3O_3 \cdot 2H_2O$ — hasta nuestros días, se ha desplegado una intensa actividad en este campo. Fundamentalmente tres equipos de trabajo, encabezados respectivamente por S. Y. Schnaiderman (2), A. K. Babko (3) y Pierre Bevilard (4), han investigado ampliamente en este campo y han obtenido un gran número de compuestos con distintos iones metálicos cuya existencia fue estudiada por distintos métodos, preferentemente potenciométricos y espectrofotométricos.

Pero, hasta la fecha, no se ha descrito ningún trabajo sobre complejos de Co(II) y pirogalol. El único intento realizado en este sentido, llevado a cabo por M. C. White y A. J. Bard (5) en 1966, dio resultados negativos ya que se realizó en medio muy ácido donde el Co(II) es incapaz de coordinar moléculas de pirogalol.

Por otra parte, a las citadas dificultades que presenta la obtención de complejos con el pirogalol, hay que añadir en nuestro caso las dificultades inherentes a la tendencia del Co(II) a sufrir oxidación en presencia de ligandos que formen complejos con el Co(III).

Así, pues, ante la circunstancia de no haber encontrado en la bibliografía referencia alguna de compuestos de Co(II) y pirogalol, hemos procedido en una labor previa de orientación, a realizar un estudio detenido y sistemático del comportamiento químico

mutuo de ambas sustancias en distintas condiciones de concentración, de relación molar y de pH con la finalidad de delimitar zonas de existencia de nuevas especies químicas.

Consecuentemente con lo anterior, hemos realizado un estudio potenciométrico de soluciones que contenían Co(II) y pirogalol en concentraciones relativamente elevadas y posteriormente un estudio potenciométrico y conductimétrico simultáneo de disoluciones diluidas.

Una vez que fueron conocidas las zonas de existencia de compuestos de Co(II) y pirogalol, procedimos, en los casos en que fue posible, a estudiar experimentalmente su obtención, aislamiento y análisis.

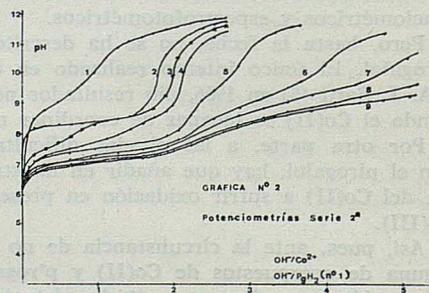
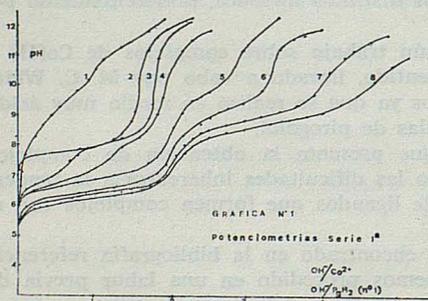
B) Parte experimental

1. Determinaciones potenciométricas y conductimétricas

Las potencimetrías de los procesos de neutralización de las mezclas de Co(II) y pirogalol se realizaron con un pH-metro Radiometer Type PHM 22r en atmósfera inerte de nitrógeno (la eliminación de la pequeña fracción de oxígeno que puede contener el nitrógeno utilizado se consiguió mediante burbujeo de la corriente gaseosa a través de tres frascos lavadores en serie que contenían disoluciones de Cr(II), preparadas a partir de disoluciones de Cr(III) mediante reducción con granalla de cinc en medio ácido. A este respecto es interesante reseñar que la capacidad de absorción de oxígeno de las sales cromosomas es unas 44 veces superior a la del pirogalato de potasio.

Se estudiaron dos series de experiencias con las relaciones molares que se indican en la tabla siguiente:

Experiencia	1. ^a	2. ^a	3. ^a	4. ^a	5. ^a	6. ^a	7. ^a	8. ^a	9. ^a
<i>1.^a Serie</i>									
Relaciones molares	1	0	0,25	0,5	1	1,5	2	3	
	0	1	1	1	1	1	1	1	
<i>2.^a Serie</i>									
Relaciones molares	1	0	0,25	0,5	1	2	3	4	5
	0	1	1	1	1	1	1	1	1

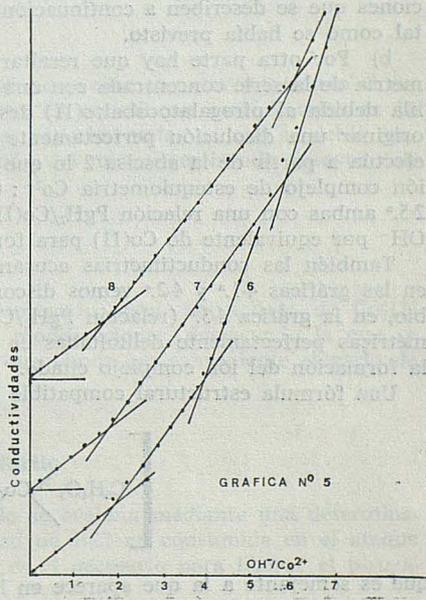
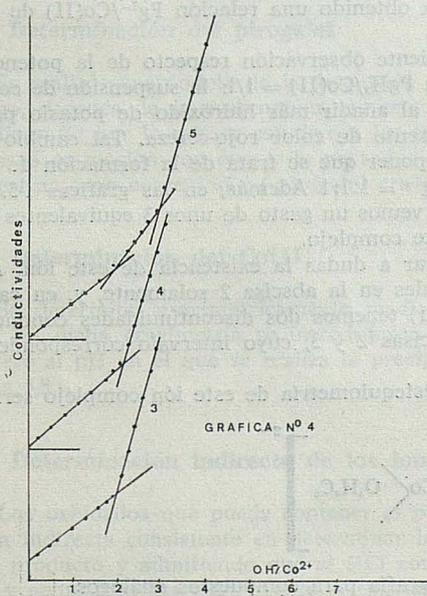
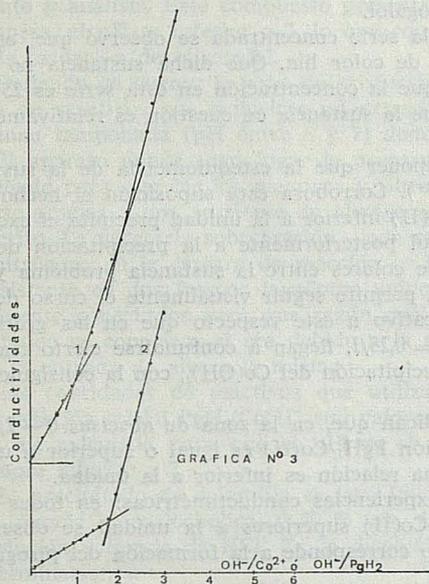


(En todas las experiencias de la primera serie, excepto en la núm. 1, la $(Co^{2+}) = 0,20$ M y en las de la segunda serie, excepto en la núm. 1, la $((Co^{2+}) = 7,46 \cdot 10^{-3}$ M. Las relaciones molares se refieren a PgH_2/Co^{2+}).

Se siguió potenciométricamente la variación de pH producida por la adición de KOH, exento de CO_2 , en atmósfera inerte.

Los resultados obtenidos en las potencimetrías de la primera serie se reflejan en la gráfica núm. 1 y los de la segunda en la gráfica núm. 2.

Las conductimetrías se realizaron simultáneamente con las potencimetrías de la segunda serie con el auxilio de un conductímetro Radiometer Type CDM 2d. Los datos obtenidos son los representados en las gráficas 3, 4 y 5, después de efectuar las debidas correcciones de las lecturas a causa del efecto de dilución. (Se ha prescindido de incluir todos los datos conductimétricos en una sola gráfica general porque los puntos correspondientes a los valores de las distintas conductimetrías son en los primeros tramos tan próximos, que su inclusión conjunta conduciría a una inevitable confusión. Esta es la razón por la que también, en las gráficas construidas, hemos desplazado el origen de ordenadas para las distintas conductimetrías. El estudio comparativo es así más fácil ya que lo que interesa no son los valores absolutos de las conductividades eléctricas sino su variación con respecto a la magnitud que se sitúa en el eje de abscisas, en este caso el cociente $OH^-/Co(II)$.



El ión complejo en estudio se ha podido aislar por precipitación de su sal cobaltosa para la que se ha hallado la composición $[\text{Co}_2(\text{OH})_2\text{Pg}_2]\text{Co}$.

3. Preparación y análisis del pirogalatocobalto(II)

Identificada la existencia del pirogalatocobalto(II) procedimos a estudiar su aislamiento y análisis. Este compuesto presenta la ventaja de que, en las condiciones en que se opera, el pH es inferior a 7, lo que constituye una relativa facilidad en la prevención de la oxidación del pirogalol.

Teniendo en cuenta la zona de existencia de este compuesto, partimos de una proporción de reactivos que supusiese un exceso de pirogalol, con la finalidad de trabajar en la zona tamponada (pH entre 6 y 7) donde precipita el pirogalatocobalto(II).

El aparato donde tuvo lugar la preparación de este compuesto estaba especialmente diseñado para mezclar los reactivos y filtrar, lavar y disolver el precipitado en atmósfera inerte gracias a una corriente de nitrógeno exento de oxígeno según el procedimiento ya descrito. La necesaria sobrepresión —con respecto a la presión atmosférica— ejercida por el nitrógeno en la cámara de reacción se hacía patente mediante un sencillo dispositivo consistente en dos frascos lavadores unidos en serie con la cámara de reacción y especialmente conectados para que según cuál fuese el frasco lavador donde tenía lugar el burbujeo se conociera si era debido a la salida del nitrógeno de la cámara de reacción o a la entrada de aire a la misma.

Las cantidades de reactivos que utilizamos en las distintas experiencias implicaban una relación inicial $\text{PgH}_2/\text{Co(II)}$ con valores de 1, 1,5 ó 2. La cantidad de hidróxido de sodio fue calculada para que el pH en el que precipitaba el pirogalatocobalto(II) fuese siempre inferior a 7.

El precipitado de color lila se lavó inicialmente con alcohol del 96 % y, después, con una mezcla hidroalcohólica al 50 % v/v. A continuación se disolvió en 25,00 ml. de una disolución valorada de HCl. En la disolución ácida obtenida se realizaron las siguientes determinaciones:

a) Determinación del pirogalol

Se realizó separándolo de la disolución ácida por extracción con éter y pesando el residuo, después de la evaporación de este disolvente. El método no está descrito en la bibliografía por lo que se estudiaron las condiciones experimentales en que se debía realizar la extracción con éter y la posterior eliminación del mismo realizando ensayos con muestras cuyo contenido en pirogalol era conocido.

b) Determinación del Co(II)

Se determinó gravimétricamente mediante precipitación como antranilato de Co(II) (6). En dicha gravimetría se introdujeron algunas modificaciones, destacando la que se refiere al pH en el que se realiza la precipitación, que vimos era conveniente elevarlo de 4,5 a 5,5.

c) Determinación indirecta de los iones oxihidrilo

Los oxihidrilo que puede contener el precipitado se evalúan mediante una determinación indirecta consistente en determinar la cantidad de HCl no consumida en el ataque del producto y admitiendo que el HCl consumido es el necesario para liberar el pirogalol y neutralizar los OH^- puente si existieran.

d) Comprobación de la ausencia de sodio

Se llevó a cabo por fotometría de llama. Las cantidades detectadas fueron siempre insignificantes.

Los resultados obtenidos en las distintas determinaciones conducen a los siguientes porcentajes de Co(II), de $C_6H_4O_3^{2-}$ y de OH^- para la sustancia en estudio. Se incluyen asimismo, para su debida comparación, los porcentajes teóricos de los iones anteriores en el $CoC_6H_4O_3$:

	% de Co(II)	% de $C_6H_4O_3^{2-}$	% de OH^-
Valores medios experimentales ...	32,77	66,47	0,69
Valores teóricos del $CoC_6H_4O_3$...	32,20	67,80	—

4. Preparación y análisis del dipirogalato — μ — dihidroxodicobalto(II) de cobalto(II)

Para precipitar el ión complejo $Co_2(OH)_2Pg_2^{2-}$ descartamos deliberadamente la precipitación con cationes inorgánicos distintos del Co(II) para evitar la posible formación de complejos o precipitados con el pirogalol y, por otra parte, desistimos de utilizar cationes orgánicos por la probable interferencia de éstos en la valoración indirecta de los oxhidrilos que contiene el precipitado o en la precipitación del Co(II) como antranilato.

El aparato de obtención es el mismo que el empleado para el pirogalatocobalto(II), pero provisto de un recipiente adicional que permitía calentar los reactivos hasta la ebullición. El precipitado obtenido es de color blanco-grisáceo. Se lavó con éter inicialmente para eliminar rápidamente el pirogalol excedente y después con agua.

El precipitado se disolvió con un determinado volumen de una disolución valorada de HCl. En la disolución ácida se realizaron las determinaciones analíticas indicadas para el caso del pirogalatocobalto(II). Los resultados obtenidos, y los teóricos correspondientes al $Co[Co_2(OH)_2Pg_2]$, son los siguientes:

	% de $C_6H_4O_3^{2-}$	% de OH^-	% del Co(II)
Valores medios experimentales	54,03	8,15	37,81
Valores teóricos del $Co[Co_2(OH)_2Pg_2]$	54,07	7,41	38,52

BIBLIOGRAFIA

1. S. TAKAGI und YUSO NAGOSA: J. Pharmac. Soc. Japan, 56-35-1936.
2. S. YA SCHNAIDERMAN: Zh. Neorgan. Khim. 8-464-1963.
3. A. K. BABKO and V. V. LUKACHINE: Ukrain. Khim. Zhur. 28-779-1962.
4. P. BEVILLARD: Bull. Soc. Chim. France 296-1954.
5. M. C. WHITE and A. J. BARD: Anal. Chem. 38/1-61-1966.
6. A. I. VOGEL: A text-book of quantitative inorganic analysis. 244-1961.

RENIO EN MINERALES DE MOLIBDENO DE ESPAÑA

P O R

A. MARTÍN e I. GRACIA

Cátedra de Química Inorgánica y Análisis Químico
Escuela Superior de Ingenieros Industriales de Bilbao (España)

Abstract

It has been made an investigation about the enrichment in rhenium of our representatives in the main ore deposits of molybdenum in Spain. The concentrations of rhenium that have been found in the samples of molibdenites, are the same ordenated or kinds of the ones of some other countries.

1. — Introducción

El renio es uno de los elementos naturales menos abundante de la corteza terrestre. A pesar de ello, y debido a una serie de propiedades características, se utiliza cada vez más, en la tecnología actual, para determinadas aplicaciones especiales.

A causa de la no existencia de especies minerales y yacimientos de renio propios, se han analizado gran número de minerales y rocas, con el objeto de encontrar el mayor número posible de fuentes de extracción y beneficio de dicho metal.

En trabajos anteriores¹⁻⁵ de los autores, se ha investigado el posible enriquecimiento de renio en numerosos sedimentos de todo el país. Fruto de tales estudios fue el descubrimiento de un notable enriquecimiento de renio en lignitos de Arenas del Rey (Granada) y de la Depresión del Ebro. Investigaciones posteriores^{6 y 7} pusieron de manifiesto la posibilidad de recuperar el renio a partir de los productos de combustión de dichos materiales.

Sin embargo, en la actualidad, las molibdenitas y minerales de cobre-molibdeno constituyen la principal fuente de obtención de renio. Esta ha sido la razón de considerar de interés la realización de una investigación sistemática, sobre el enriquecimiento en renio de muestras representativas de los principales yacimientos de minerales de molibdeno de España.

2. — Yacimientos de minerales de molibdeno de España

Actualmente, las únicas minas de molibdenita en explotación se encuentran en la provincia de Orense, en el término municipal de Lovios. Se trata del grupo minero «Las Sombras», formado por las concesiones «Mercedes» de 150 Has. y «Elisita» de 10 Has. La mineralización está formada por wolframita, casiterita, mispichel, pirita, bismutina y molibdenita. La distribución formal de la mineralización es irregular y considerada de origen neumatolítico. Las zafas de los filones contienen por tonelada y término medio

5 Kg. de W, 2 Kg. de Mo y 0,3 Kg. de casiterita. También existen indicios de molibdeno en otros puntos de la provincia de Orense.

Cerca de Campodrón (Gerona), se encuentra la antigua reserva de Molló y Setcasas (hoy en inactividad). Es un yacimiento en masa que contiene varios minerales de wolframio, hierro y cinc, además de molibdenita y mispiquel. En Asturias, en el término municipal de Tapia de Casariego, se encuentran las concesiones «Figueras» de 212 Has., «Salabe» de 68 Has. y «Dos Amigos» de 42 Has. La mineralización parece ser de molibdenita y pirita.

También en diversos puntos de Castilla (Villacastín, Hoyo de Manzanares, Navacerrada, Lumbrales, etc.), se citan en la bibliografía indicios de molibdenita.

Los únicos yacimientos de wulfenita existentes en España se sitúan en Granada. En la antigua mina «Reconquista», sita en Vélez de Benaudalla, explotada por el COMEIN desde junio de 1942 a 1945, se obtuvieron concentrados con una ley media de 18,20 % de MoO₃. Como quiera que en otros varios puntos de la provincia de Granada se han encontrado abundantes indicios de wulfenita, hemos dedicado especial interés al estudio de esta zona, sobre todo a los afloramientos próximos a Vélez de Benaudalla (Minas «Fabiola y Balduino» y «Cerro del Toro»). El Departamento de Cristalografía y Mineralogía de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada, nos ha facilitado también muestras de algunos yacimientos en los que se había detectado la presencia de wulfenita. En general, el mineral aparece incrustado en fisuras y pequeñas oquedades, en forma de cristales prismáticos muy frágiles.

Se ha citado también la presencia de wulfenita en las provincias de Badajoz (antigua mina «Santa Marta»), León (Losacio) y Almería (Garrucha).

3. — Método de análisis

El pequeño contenido en renio de algunas de las muestras analizadas (en varios casos inferiores 1 ppm), exigía un método analítico suficientemente sensible. Se ha utilizado por ello un método de análisis por activación neutrónica⁸.

Las muestras fueron irradiadas en el canal neumático del reactor ARBI (ARGonaut, Bilbao), durante sesenta minutos, con un flujo término de 4×10^{10} n/cm².s

El método de separación radioquímica se basa en la extracción del renio con piridina en solución de hidróxido sódico.

La medida de la actividad gamma inducida del ¹⁸⁶Re se ha realizado, previa separación de 6 a 8 horas después de la irradiación, a las 72 horas de la misma, empleándose un detector de centelleo tipo «pozo» de 3" x 3", acoplado a un analizador multicanal.

El error «standard» vale, si x es la concentración de renio en ppm en la muestra, y en las condiciones en las que se han realizado las medidas

$$\sigma (\%) = \frac{1}{x}$$

4. — Consideración de los resultados

En la Tabla I se incluyen los valores de la concentración de renio en partes por millón, de muestras representativas de los principales yacimientos de España de molibdenita y wulfenita y también de algunos otros con indicios de estos minerales. En dicha Tabla se especifica la naturaleza del mineral y el nombre y localización del yacimiento. Dada la irregular distribución del renio, se consideró de interés el análisis de muestras tomadas en distintos puntos de cada mina. También se recogen en la Tabla I los valores correspondientes a dos muestras de Marruecos, una de molibdenita y otra de wulfenita, de elevado contenido de molibdeno, esperando poder realizar un estudio completo, cuando dispongamos de mayor número de muestras de dicho país.

RENIO EN MINERALES DE MOLIBDENO DE ESPAÑA

TABLA I. — Contenido en renio en minerales de molibdeno

<i>Mina</i>	<i>Localización de la muestra</i>	<i>Mineral de molibdeno</i>	<i>Concentración de Re (ppm)</i>
Las Sombras	Lovios (Orense)	Molibdenita	
Punto 1	»	»	7,90
» 2	»	»	1,10
» 3	»	»	1,60
» 4	»	»	4,90
» 5	»	»	0,90
Setcasas y Molló	Campodrón (Gerona)	Molibdenita	
Punto 1	»	»	5,10
» 2	»	»	0,65
» 3	»	»	3,40
» 4	»	»	3,10
» 5	»	»	0,55
Salave	Tapia de Casariego (Asturias)	Molibdenita	
Punto 1	»	»	3,10
» 2	»	»	3,45
» 3	»	»	2,60
» 4	»	»	0,80
» 5	»	»	2,60
Fe	Lovios (Orense)	Molibdenita	
Punto 1	»	»	1,25
» 2	»	»	0,80
Santa Marta	Santa Marta (Badajoz)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,45
» 2	»	»	0,40
» 3	»	»	0,15
» 4	»	»	0,25
» 5	»	»	0,10
Cerro del Toro	Motril (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,70
» 2	»	»	0,55
» 3	»	»	0,40
Lapeza	Lapeza (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	1,30
» 2	»	»	0,15
» 3	»	»	0,45
» 4	»	»	0,25
Quentar	Quentar (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,45
» 2	»	»	0,35
» 3	»	»	0,25
» 4	»	»	0,25
» 5	»	»	0,05

TABLA I. — (Continuación)

<i>Mina</i>	<i>Localización de la muestra</i>	<i>Mineral de molibdeno</i>	<i>Concentración de Re (ppm)</i>
La Marca	Padul (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,20
» 2	»	»	0,10
» 3	»	»	0,15
» 4	»	»	0,15
» 5	»	»	0,10
Balduino y Fabiola	Albuñol (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,50
» 2	»	»	0,60
Cerrajón	Monachil (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,45
» 2	»	»	0,30
» 3	»	»	0,10
» 4	»	»	0,10
» 5	»	»	< 0,05
Los Lastonares	Güejar - Sierra (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,05
» 2	»	»	< 0,05
» 3	»	»	< 0,05
» 4	»	»	< 0,05
Cerro de la Cruz	Albuñuelas (Granada)	Wulfenita	
Punto 1	»	»	0,10
» 2	»	»	0,40
» 3	»	»	< 0,05
» 4	»	»	< 0,05
	Marruecos	Molibdenita	53,65
	»	Wulfenita	36,40

En la Tabla II se dan los contenidos de renio en partes por millón y del tanto por ciento de molibdeno en muestras de molibdenitas, sin concentrar y en concentrados de las mismas. La obtención de los concentrados correspondientes a cada una de las muestras seleccionadas, se obtuvo por medios puramente mecánicos, sin otro objetivo que poner de manifiesto la estrecha relación existente entre el grado de enriquecimiento de renio en el mineral y su concentración en molibdeno.

El estudio de los resultados incluidos en las Tablas I y II, permite hacer las siguientes consideraciones:

a) Las concentraciones de renio encontradas en las muestras de molibdenitas españolas, que se estudian en este trabajo, son del mismo orden que las obtenidas en minerales de otros países⁹⁻¹¹.

b) Los concentrados de algunas de las molibdenitas estudiadas podrían utilizarse como fuentes de recuperación de renio, siempre que fuese rentable su explotación como tales minerales de molibdeno.

RENIO EN MINERALES DE MOLIBDENO DE ESPAÑA

TABLA II. — Relación entre el contenido de renio y molibdeno en muestras de molibdenita y sus concentrados

Muestra	Renio (ppm)	Molibdeno (%)
1	0,75	0,15
Concentrado	2,65	1,10
2	1,20	0,65
Concentrado	7,55	10,12
3	2,55	1,72
Concentrado	6,35	9,83
4	4,95	6,16
Concentrado	28,35	51,30
5	51,05	15,13
Concentrado	105,40	51,06

c) Existe una indudable estrecha relación entre el grado de enriquecimiento de renio en el mineral y la concentración de molibdeno en el mismo. Este hecho queda confirmado por los valores que se incluyen en la Tabla II.

d) En general, se observa un mayor grado de enriquecimiento en las molibdenitas que en las wulfenitas analizadas. Esto puede interpretarse en función del mayor contenido de molibdeno de las molibdenitas, en relación a las wulfenitas estudiadas.

e) Cabe señalar, finalmente, la irregular distribución de renio dentro de una misma mina (Tabla I). A igual conclusión llegaron los autores⁵ al investigar la distribución de renio en minas de lignitos enriquecidos en dicho elemento.

BIBLIOGRAFIA

1. A. MARTÍN: *Ensayos e investigación*, 1, 10 (1966).
2. A. MARTÍN y L. GARCÍA-ROSSELL: *Bol. Inst. Geol. Min.*, VI, 603 (1970).
3. A. MARTÍN y L. GARCÍA-ROSSELL: *Bol. Inst. Geol. Min.*, 68, 65 (1970).
4. A. MARTÍN y L. GARCÍA ROSSELL: *Bol. Inst. Geol. Min.*, II, 178 (1971).
5. I. GRACIA y A. MARTÍN: *Bol. R. Soc. Española Hist. Nat. (Geol.)*, 68, 111 (1970).
6. A. MARTÍN e I. GRACIA: *Ingeniería Química*, 34, 37 (1972).
7. A. MARTÍN e I. GRACIA: *Ingeniería Química*, 39, 87 (1972).
8. BOYADYOV, R. DE NEVE y J. HOSTE: *Anal. Chim. Acta*, 40, 373 (1968).
9. KIKUO TERADA y SUSUMU OSAKI: *Geochem. Journal*, 4, 123 (1971).
10. S. TRIBALAT: *Rhenium et Technetium*. Gauthiers-Villars (1957), pág. 5.
11. B. W. GONSER: *Rhenium*. Tlvesier Publishing Company (1962), pág. 4.