

SĚMA
BOLETÍN NÚMERO 40
Septiembre 2007

sumario

Editorial	5
Artículos	7
<i>Una aproximación al ADN: Biofísica de moléculas individuales, Mecánica Estadística y Matemáticas</i> , por A. Sánchez	7
<i>Una generalización del teorema de Lions-Tartar</i> , por J. Simon	43
<i>Computational methods in Algebra and Analysis</i> , por F.J. Castro- Jiménez	71
<i>Matrices inversas generalizadas</i> , por N. Thome	103
Historia Matemática	127
<i>Del ábaco al supercomputador: breve historia de la computación</i> , por F. Ortigón Gallego	127
Resúmenes de libros	157

Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada SĒMA

Grupo Editor

P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) E. Fernández Cara (U. de Sevilla)
E. Aranda Ortega (U. Cast.-La Mancha) A. Donoso Bellón (U. Cast.-La Mancha)
J.C. Bellido Guerrero (U. Cast.-La Mancha)

Comité Científico

E. Fernández Cara (U. de Sevilla) A. Bermúdez de Castro (U. de Santiago)
E. Casas Rentería (U. de Cantabria) J.L. Cruz Soto (U. de Córdoba)
P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) J.M. Mazón Ruiz (U. de Valencia)
I. Peral Alonso (U. Aut. de Madrid) J.L. Vázquez Suárez (U. Aut. de Madrid)
L. Vega González (U. del País Vasco) E. Zuazua Iriondo (U. Aut. de Madrid)

Responsables de secciones

Artículos: E. Fernández Cara (U. de Sevilla)
Matemáticas e Industria: M. Lezaun Iturralde (U. del País Vasco)
Educación Matemática: R. Rodríguez del Río (U. Comp. de Madrid)
Historia Matemática: J.M. Vegas Montaner (U. Comp. de Madrid)
Resúmenes: F.J. Sayas González (U. de Zaragoza)
Noticias de SĒMA: C.M. Castro Barbero (Secretario de SĒMA)
Anuncios: Ó. López Pouso (U. de Santiago de Compostela)

Página web de SĒMA

<http://www.sema.org.es/>

e-mail

info@sema.org.es

Dirección Editorial: Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla - La Mancha. Avda. de Camilo José Cela s/n. 13071. Ciudad Real. boletin.sema@uclm.es

ISSN 1575-9822.

Depósito Legal: AS-1442-2002.

Imprime: Gráficas Lope. C/ Laguna Grande, parc. 79, Políg. El Montalvo II 37008. Salamanca.

Diseño de portada: Ernesto Aranda

Ilustración de portada: Diversas superficies de Klein-Jeener

Consejo Ejecutivo de la Sociedad Española de Matemática Aplicada
SĕMA

Presidente

Carlos Vázquez Cendón

Vicepresidente

Mikel Lezaun Iturralde

Secretario

Carlos Manuel Castro Barbero

Vocales

Rafael Bru García
Jose Antonio Carrillo de la Plata
Rosa María Donat Beneito
Inmaculada Higuera Sanz
Carlos Parés Madroñal
Pablo Pedregal Tercero
Enrique Zuazua Iriondo

Estimados socios:

Al preparar el editorial de este número de nuestro Boletín, nos encontramos frente a la celebración, en un par de semanas, de nuestro encuentro científico por antonomasia: el XX CEDYA y el X CMA. Es más que probable que cuando lo recibáis, se haya celebrado ya tal encuentro en Sevilla del 24 al 28 de septiembre. Confiamos que la labor realizada por nuestros colegas de Sevilla, junto con el panel impresionante de charlas plenarias y sesiones monográficas, hayan contribuido de manera clara al éxito de este evento que es parte esencial de la vida de nuestra Sociedad. Habrá un número monográfico destinado a cubrir los aspectos científicos de este encuentro.

También debemos anunciaros que nuestro amigo y compañero, Alfonso Bueno Orovio, ha causado baja como miembro del Grupo Editor del Boletín. Ha decidido realizar un cambio en su trayectoria profesional que, confiamos, será muy productivo y estimulante. Desde aquí le deseamos lo mejor y le agradecemos sinceramente su colaboración.

Como es habitual, en la sección de artículos científicos de este número aparecen cuatro interesantes trabajos de A. Sánchez, J. Simon, F.J. Castro-Jiménez y N. Thome, y además publicamos un artículo de carácter divulgativo de F. Ortegón en la sección de *Historia Matemática*.

Como de costumbre, deseamos que disfrutéis con este nuevo número del Boletín, y os recordamos que estamos abiertos a cualquier observación o crítica que consiga mejorar esta herramienta en cualquier aspecto.

Esperamos que disfrutéis del contenido. Recibid un cordial saludo,

Grupo Editor
boletin.sema@uclm.es

UNA APROXIMACIÓN AL ADN: BIOFÍSICA DE MOLÉCULAS INDIVIDUALES, MECÁNICA ESTADÍSTICA Y MATEMÁTICAS

ÁNGEL SÁNCHEZ

GISC / Departamento de Matemáticas
Universidad Carlos III de Madrid

IMDEA Matemáticas

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Universidad de Zaragoza

anxo@math.uc3m.es

Resumen

En este artículo se discute el modelado matemático de la molécula de ADN, tratando en detalle el modelo de Peyrard-Bishop [Phys. Rev. Lett. 62, 2755 (1989)] como una de las descripciones simplificadas más útiles de dicho sistema. Se abordan tanto las propiedades de las moléculas individuales como las colectivas, haciendo particular hincapié en las herramientas y problemas matemáticos relacionados. En lo referente a dinámica de excitaciones no lineales como modelos de los procesos que tienen lugar en la molécula, se presentan resultados obtenidos con descripciones continuas (más tratables analíticamente) y con descripciones discretas (más realistas). En cuanto a los aspectos colectivos, se discute en detalle la transición de desnaturalización del ADN, la comparación de los resultados con los datos experimentales y las mejoras del modelo motivadas por esta comparación. En la conclusión se mencionan los aspectos que habría que incluir en futuros modelos.

Palabras clave: *ADN, moléculas individuales, biofísica, solitones, dinámica no lineal, Mecánica Estadística, transiciones de fase*

Clasificación por materias AMS: *92C05 92D20 35Q51 35Q80 70K75 82B26 82C22*

1 Introducción

Aunque las Matemáticas están desde hace tiempo muy relacionadas con la Biología, la gran sinergia establecida entre ambas en los últimos años promete dar lugar a un enorme enriquecimiento de ambos campos en las próximas

Fecha de recepción: 26/02/2007

décadas [1, 10]. Una de las áreas de la Biología donde esta interacción es más necesaria y relevante es la Biología Molecular [28], en la que problemas de gran trascendencia práctica (por ejemplo, en el diseño de fármacos) como el del plegamiento de las proteínas concentran los esfuerzos de un gran número de investigadores. Este problema es la manifestación más notable de que conocer la composición química de una molécula no permite, al menos por ahora, predecir y entender su función, que aparece como algo emergente de la interacción entre las múltiples unidades que la forman.

De entre las muchas moléculas que intervienen en la vida, el *Ácido Desoxirribonucleico*, más conocido por sus siglas ADN, es una de las más importantes, si no la que más. Casi cualquier persona hoy día sabe que el ADN contiene la información genética que permite a los organismos reproducirse y que se transmite a la descendencia para continuar el proceso. Es también bien conocido que el ADN tiene una estructura de doble hélice (véase la Fig. 1; véase también en [1, 42] una descripción más detallada); unas moléculas llamadas *bases* constituyen los “escalones” que unen las dos hélices, y contienen la mencionada información genética. Sin embargo, el problema de la relación estructura-función se manifiesta ya en el ADN, pese a su aparente simplicidad (comparada con moléculas como las proteínas, compuestas de unidades mucho más heterogéneas). Así, durante la *replicación* (copia del ADN para su transmisión a los descendientes) o durante la *transcripción* (lectura del ADN para su traducción a proteínas), la molécula sufre enormes cambios conformacionales cuya relación con la estructura no es en absoluto evidente.

En este trabajo vamos a considerar un modelo sencillo que pretende aportar información sobre esta cuestión. Al igual que para estudiar cualquier otro sistema, a la hora de plantear el modelo debemos pensar en primer lugar qué pretendemos modelar y debemos identificar los ingredientes mínimos necesarios a tal fin (de lo contrario correremos el riesgo de complicar el modelo y convertirlo en inútil [27]).

En primer lugar, queremos entender los cambios conformacionales que ocurren en los procesos mencionados. Estos procesos son dinámicos, no ocurren instantáneamente sino que tienen velocidades características; por tanto, nuestro modelo habrá de ser también dinámico. En segundo lugar, tanto la replicación como la transcripción involucran movimientos grandes de los componentes de la molécula de ADN que no se pueden aproximar por pequeñas oscilaciones; es decir, nuestro modelo ha de ser necesariamente no lineal. En tercer lugar, dado que los fenómenos de interés tienen lugar normalmente a la temperatura del cuerpo humano, habrá que incorporar en el modelo efectos térmicos. Por último, pretendemos que el modelo sea lo más general posible, es decir, que no esté referido a una molécula concreta de ADN con una secuencia y tamaño dados, sino que permita extraer ideas aplicables en general a cualquier molécula. Esto, que normalmente es un inconveniente para muchos biólogos, interesados por que resolvamos problemas muy concretos, es una perspectiva más física, más de principios fundamentales; típicamente, exige renunciar a la precisión cuantitativa en aras de una mejor comprensión cualitativa.

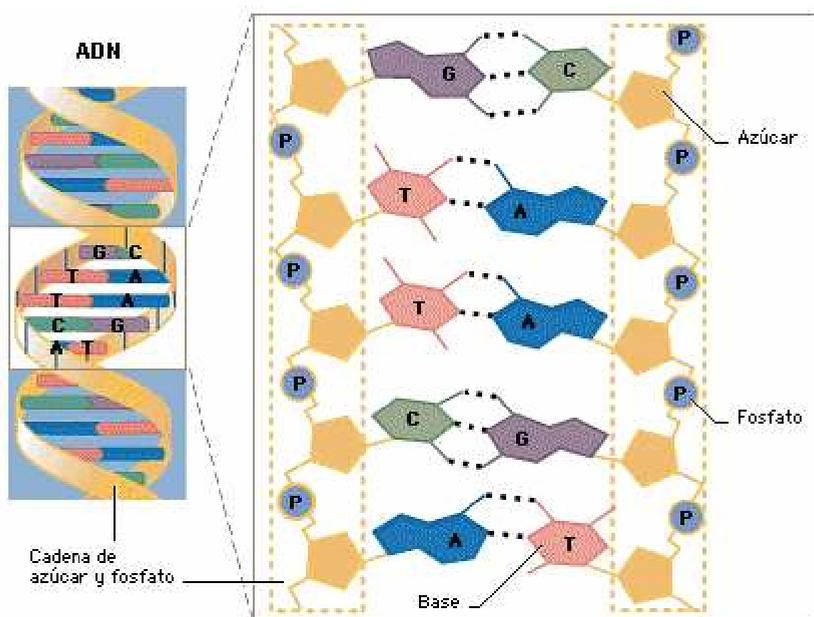


Figura 1: Estructura de la molécula de ADN. Izquierda: representación esquemática de la molécula mostrando su forma de doble hélice. Derecha: detalle ampliado mostrando los distintos componentes de la estructura. Las letras A, C, G y T denotan, respectivamente, las bases adenina, citosina, guanina y timina, y las líneas punteadas representan los enlaces de hidrógeno entre ellas.

2 El problema y algunos modelos

2.1 Los fenómenos a modelar

Como acabamos de decir, nuestra meta no es entender absolutamente toda la fenomenología de la molécula de ADN, que es muy compleja y diversa; un resumen bastante conciso se presenta en [7]. Nos centramos en los movimientos de gran amplitud y en los fenómenos térmicos.

De los primeros ya se ha hablado en las páginas de este Boletín (véase el artículo de R. Álvarez-Nodarse [1], por lo que no me extenderé sobre ellos. Baste decir que las principales situaciones en las que se producen estos movimientos son la auto-replicación o copia del ADN y su transcripción a ARN para la posterior traducción de éste en proteínas. El lector puede encontrar más detalles en [1].

En cuanto a los fenómenos térmicos, el más importante es el de la desnaturalización térmica: cuando la temperatura sube por encima de un cierto valor, situado en el rango de 60–80° C, la doble cadena se rompe espontáneamente y sus dos tiras constitutivas quedan libres y pueden separarse por completo. En este caso tenemos también movimientos de gran amplitud, ya que antes de alcanzarse la temperatura de desnaturalización aparecen “burbujas” en la molécula: grupos de bases consecutivas que se separan de sus compañeras, dando lugar a aperturas de la molécula, pero sin llegar a romperla por completo. Estas burbujas pueden tener una vida relativamente larga e incluso desplazarse a lo largo de la doble hélice antes de que las bases se vuelvan a enlazar, cerrando la molécula. En cierto sentido son similares a las llamadas burbujas de transcripción, las zonas en las que el ADN se abre localmente para su copia a ARN. La diferencia entre ambos tipos de burbujas es que las de transcripción aparecen por la acción de una enzima, la ARN-polimerasa, que abre la doble hélice para permitir su copia, mientras que las burbujas térmicas aparecen espontáneamente sin ninguna acción ni ayuda externa (salvo, obviamente, la temperatura, que ha de ser suficientemente alta).

2.2 Modelos del ADN

En la Sección 3 de [1], se recogen algunos de los modelos que se han ido proponiendo en la literatura, agrupados en dos familias: lineales y no lineales. Dado que queremos ocuparnos de movimientos de gran amplitud, los modelos lineales no nos serán de utilidad. Debemos por tanto recurrir a modelos no lineales. De éstos, los más conocidos y estudiados son los tres siguientes: el modelo sine-Gordon, el modelo de Yakushevich y el modelo de Peyrard y Bishop.

El modelo de sine-Gordon, propuesto por Englander y colaboradores en [18] en 1980, es en realidad un “reciclado”: se supone que la dinámica del ADN queda descrita por la ecuación de sine-Gordon [33]. Este modelo despertó cierto interés inicial, pero resultados experimentales posteriores lo pusieron en cuestión [19]. Más tarde fue retomado por Salerno en una versión discreta con la cual intentó entender la relación entre secuencia genética y lugares funcionalmente relevantes de la molécula, tales como los *promotores* (para entendernos,

secuencias cortas que marcan el inicio de un gen). De nuevo la propuesta tuvo éxito al principio, pero trabajos recientes muestran que ese éxito es producto de un modelado de la secuencia que no es suficientemente preciso [13]. Así pues, no se considera hoy día que el modelo de sine-Gordon sea muy útil para entender la dinámica del ADN, si bien tuvo el mérito de ser el primero y de motivar la introducción de los dos que siguen.

El modelo de Yakushevich fue propuesto por esta investigadora rusa en 1987 y se puede encontrar discutido en todo detalle en [42]. Este modelo es considerablemente más complicado que el anterior y también más realista (aunque todavía está a años luz de la complejidad real del problema). Se basa en considerar el movimiento de las bases como rotaciones en el plano ortogonal al eje de la doble hélice, despreciando cualquier otro movimiento. A diferencia del modelo de Peyrard-Bishop, en el que nos centraremos a continuación, considera las dos cadenas de la doble hélice como independientes, si bien ignora su geometría helicoidal. Aún así, los resultados que produce son francamente buenos: consigue predecir el orden de magnitud de varias cantidades físicas relacionadas con esos movimientos de gran amplitud que venimos mencionando. Por tanto, cabe pensar que el modelo identifica los grados de libertad más importantes en el proceso de transcripción. Sin embargo, tiene también sus limitaciones, como ha discutido entre otros Gaeta [20], sobre las que se sigue trabajando con distintas generalizaciones en la actualidad.

El tercer modelo, objeto central de este trabajo, fue propuesto en 1989 por Peyrard-Bishop [31] y es, con diferencia, el que más éxito ha tenido hasta la fecha. Ello se debe a que no sólo es un buen modelo dinámico, es decir, no sólo proporciona una buena descripción de los movimientos en los que estamos interesados, sino que también se aplica satisfactoriamente a la descripción de los fenómenos térmicos (en particular, una versión ligeramente modificada que se debe a Dauxois [15] modela correctamente la desnaturalización; véase más adelante). Por otro lado, este modelo es el que mayor número de comparaciones con resultados experimentales ha sufrido, saliendo airoso en mayor o menor medida de todas ellas (véase por ejemplo la última en [2], donde se referencian otras anteriores). Precisamente, por esta validez general y a la vez por su simplicidad, este modelo permite un tratamiento matemático (relativamente) asequible y no sólo trabajo de simulación.

3 El modelo de Peyrard-Bishop

3.1 La escala de trabajo

La primera pregunta que uno ha de contestar a la hora de plantear un modelo para los cambios constitutivos básicos del ADN es a qué escala se debe trabajar. La elección debe depender de los fenómenos que queremos modelar. Por ejemplo, si sólo estuviésemos interesados en cómo se comporta la molécula cuando se somete a una fuerza y se estira, podríamos recurrir a un modelo sencillo, como el llamado *worm-like chain* [6], que ignora todos los detalles de la molécula y representándola como una cuerda elástica da muy buenos resultados. Pero

no es éste nuestro caso, ya que estamos interesados en describir propiedades y fenómenos que son característicos del ADN y los modelos como el precedente predicen las mismas cosas para cualquier polímero. Así pues, tenemos que ir a una escala en la que el detalle de la molécula entre en el modelo. Podríamos entonces pensar en describir el sistema a escala atómica pero, aparte de que esto sería computacionalmente muy costoso, resultaría muy difícil identificar los comportamientos colectivos, que involucran simultáneamente a muchos átomos (por ejemplo, la apertura de unos cuantos pares de bases de la doble cadena afecta a unos 1000 átomos en movimiento coordinado).

En vista de estas reflexiones, la escala apropiada para nuestro modelo parece ser la de la entidad básica que codifica información en el ADN, o sea, el par de bases. Éste es un ejemplo de *mesoescala* o escala intermedia, que salva los problemas de orden práctico de los modelos con todo detalle a la vez que mantiene la especificidad del modelo para el ADN. Mantenernos así en un modelo “simple” no quiere decir que trabajar con él vaya a ser fácil: veremos en lo que sigue que, a pesar de su aparente simplicidad, el modelo es ya lo suficientemente complejo como para producir una gran riqueza de resultados y necesitar un tratamiento matemático y numérico cuidadoso.

3.2 Construcción del modelo

Nuestra descripción se va a quedar, pues, al nivel del par de bases. Para ello, fijamos como variables básicas los números reales y_n : para cada n , y_n es por definición la distancia entre las dos bases que forman el n -ésimo par de la cadena.

Supondremos que $y_n = 0$ es el estado en el que par está cerrado, con las bases situadas a la distancia de equilibrio de sus enlaces químicos. Ello implica que y_n podrá tomar valores negativos, que indicarían una compresión de los enlaces con respecto a dicha posición de equilibrio. Esta elección de nuestras variables de trabajo se representa en la Fig. 2, donde aparecen las bases como cuadrados, enlazados por líneas a las cadenas azúcar-fosfato, y entre ellas por enlaces de puente de hidrógeno. Por el momento, no incluiremos la información genética y aceptaremos que todas las bases son iguales.

Fijadas las variables de trabajo, el modelo de Peyrard-Bishop queda determinado por el siguiente Hamiltoniano [31]:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2m} p_n^2 + W(y_n, y_{n-1}) + V(y_n) \right), \quad p_n \equiv m \frac{dy_n}{dt}. \quad (1)$$

Las ecuaciones que describen el movimiento de los pares de bases se obtienen utilizando las relaciones de Hamilton habituales:

$$\begin{cases} \frac{dy_n}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_n} \\ \frac{dp_n}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y_n} \end{cases} \quad (2)$$

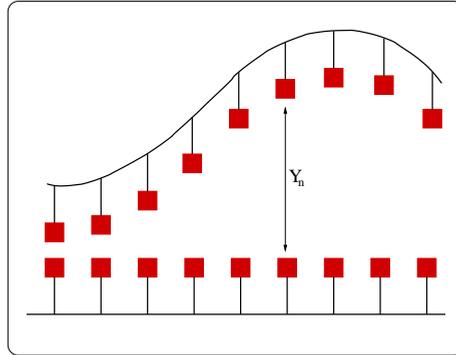


Figura 2: Modelo de Peyrard-Bishop.

De esto nos ocuparemos más adelante; ahora es importante fijar la elección de las funciones W y V que aparecen en la ecuación (1) y entender qué representa cada uno de estos términos.

El potencial $V(y)$ describe la interacción entre las bases de un par, dado que y es la distancia entre ellas y V tiene que ser una energía para entrar en el Hamiltoniano. Para este propósito, usaremos un potencial de Morse, cuya expresión es

$$V(y) = D(e^{-\alpha y} - 1)^2, \tag{3}$$

y cuya representación gráfica aparece en la Fig. 3.

El motivo de esta elección es que describe de manera sencilla los comportamientos fundamentales de los enlaces entre bases. En efecto, si comprimimos el par ($y < 0$) encontramos una resistencia muy fuerte, que de hecho crece exponencialmente con la cercanía debido al contacto entre las nubes electrónicas de ambas bases, que se repelen fuertemente. Por otro lado, el estiramiento de los enlaces es lineal para distancias pequeñas y moderadas; a distancias mayores hay un punto en el que los puentes de hidrógeno se rompen y las dos bases dejan de estar conectadas, es decir, ya no se ven y por tanto su potencial de interacción se vuelve independiente de la distancia a que se encuentren. Finalmente, $V(y)$ tiene un único mínimo en $y = 0$, es decir, en la posición de equilibrio de los enlaces.

El otro término del Hamiltoniano es el potencial de interacción entre pares de bases $W(y_n, y_{n-1})$. Este término tiene dos contribuciones importantes:

Por un lado, está la cadena de azúcar-fosfato, a la que se unen las bases, que es bastante rígida y sirve de unión entre una base y la siguiente, por lo que si una base se separa de la doble hélice tiende, por acción de esta cadena, a mover a las bases vecinas.

Por otro lado, está la llamada *interacción de apilamiento*, que proviene del hecho de que las nubes electrónicas de cada par de bases interactúan con

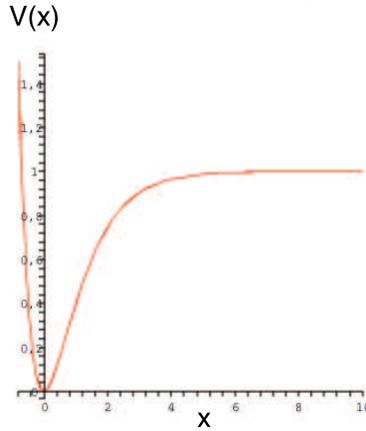


Figura 3: Potencial de Morse.

las que tienen por encima y por debajo en la doble hélice, ya que están a una distancia de unos pocos Ångstroms y tienen, por tanto, solapamiento (en concreto de los orbitales π).

Además, hay efectos de direccionalidad que hacen que la interacción no sea exactamente simétrica, es decir, que no sea lo mismo tener seguidas una base A y otra T que al revés. Todas estas contribuciones son de difícil modelado, en particular el efecto de apilamiento y ante esta situación y como forma de avanzar tomaremos la expresión más sencilla posible para W , que es el acoplamiento armónico:

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{K}{2}(y_n - y_{n-1})^2.$$

Ésta es obviamente una gran simplificación. Significa que se confía en que la rigidez de la cadena azúcar-fosfato haga que los desplazamientos relativos entre pares de bases vecinos sean pequeños y esta aproximación sea aceptable, aunque sólo los resultados lo dirán (y nos llevarán a proponer una expresión más elaborada de W en la Sección 6.2).

Queda por discutir cuáles deben ser los valores concretos de los parámetros que aparecen en el Hamiltoniano, que son m , D , a y K . En la literatura se han utilizado distintos valores, pero una elección bastante habitual son los resultantes de la comparación de las predicciones del modelo con los experimentos de Campa y Giansanti [8] (lo que ya adelanta que el modelo da buenos resultados). De esta comparación resulta: $D = 0,03$ eV, $a = 4,5$ Å⁻¹, $K = 0,06$ eV Å⁻² y $m = 300$ u.m.a, que son valores bastante razonables. Así, por ejemplo, D está algo por encima de la excitación térmica típica a temperatura ambiente (lo que implica que el enlace entre pares no estará normalmente roto a dicha temperatura) y K indica un acoplamiento débil entre pares vecinos, lo

que está de acuerdo con experimentos químicos.

En todo caso, una vez comprobado que podemos elegir parámetros físicamente apropiados para nuestro modelo, para los cálculos y el trabajo numérico interesa plantear el problema en términos de variables adimensionales. Para ello introducimos las variables $Y_n = ay_n$ para las longitudes de los enlaces de hidrógeno; medimos la energía en unidades de D , con lo que el nuevo Hamiltoniano es $\mathcal{H}' = \mathcal{H}/D$ e introducimos un tiempo adimensional $\tau = \sqrt{Da^2/mt}$ y la cantidad adimensional $S = K/Da^2$. De este modo, tenemos finalmente que

$$\mathcal{H}' = \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{2} P_n^2 + \frac{S}{2} (Y_n - Y_{n-1})^2 + (e^{-Y_n} - 1)^2 \right), \quad P_n \equiv \frac{dY_n}{d\tau}. \quad (4)$$

3.3 Simulaciones numéricas previas

Una manera sencilla de comprobar la capacidad del modelo para describir el ADN es observar su dinámica y compararla con las propiedades experimentales conocidas. Para ello se recurre a la simulación numérica, pero teniendo en cuenta que hay que incluir el efecto de las fluctuaciones térmicas, que no son despreciables a temperatura ambiente. Esto se puede hacer de varias maneras, siendo las más habituales las que recurren a los modelos de Langevin y de Nosé. El primero consiste en incorporar en la ecuación del movimiento un término de ruido blanco y un término de disipación, estando las magnitudes de ambos ligadas por el teorema de fluctuación-disipación [37] (véase la Sección 4.1). El segundo reposa sobre un argumento más elaborado [29]. Con cualquiera de ambos métodos, los resultados obtenidos son cualitativamente los mismos que los representados en la Fig. 4.

Los resultados a temperatura constante (Fig. 4(a)), ligeramente inferior a la de desnaturalización, muestran dos tipos de patrones característicos. El más evidente es el de grandes manchas negras, correspondientes a regiones donde la separación entre bases es muy grande para grupos consecutivos de pares. Podemos asociar estas regiones a las burbujas de desnaturalización observadas en los experimentos. Por otro lado, se observan líneas punteadas verticales, debidas a regiones de unos pocos pares que se abren y cierran oscilatoriamente, y que tienen que ver con los modos de vibración localizados llamados *breathers*, que también se detectan en los experimentos. Cuando el sistema se somete a una temperatura variable, que crece desde valores inferiores al de desnaturalización hasta sobrepasarlo (Fig. 4(b)), como si realizáramos un experimento de desnaturalización, el modelo da buenos resultados: la desnaturalización viene precedida de burbujas, que terminan por invadir toda la muestra, separando ambas cadenas (zona negra superior). Podemos concluir pues que el modelo se comporta, al menos cualitativamente, como la molécula de ADN y que por tanto merece la pena llevar a cabo un estudio más detallado como el que presentamos a continuación.

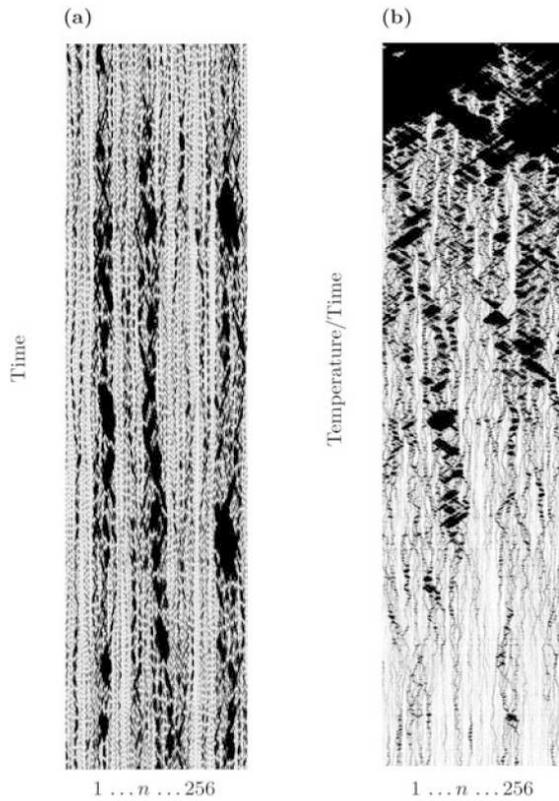


Figura 4: Simulaciones de la dinámica del ADN. El modelo tiene 256 pares de bases, y la distancia entre las bases de cada uno se muestra en una escala de grises que va del blanco (par perfectamente cerrado) al negro (par totalmente abierto). El eje horizontal corresponde a la molécula y el vertical al tiempo. (a) Simulación a temperatura constante de 340° K. (b) Simulación en la que la temperatura crece linealmente más allá del valor de desnaturalización.

4 Excitaciones no lineales

4.1 Ecuaciones del movimiento

Para comprender y describir con técnicas analíticas las observaciones que acabamos de presentar, nuestro punto de partida es la ecuación de movimiento que se deduce de (2) y (4):

$$\frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} = S(Y_{n-1} - 2Y_n + Y_{n+1}) + 2e^{-Y_n}(e^{-Y_n} - 1), \quad 1 \leq n \leq N. \quad (5)$$

Obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales acopladas, que no se puede resolver exactamente. Tampoco se puede linealizar porque, como hemos visto en las simulaciones, observamos movimientos de gran amplitud, que no serían descritos en el límite de pequeño Y_n (aparte de que, como ya se ha dicho, queremos ir más allá de los modelos lineales).

Teniendo ya la ecuación (5), podemos ser un poco más explícitos al hablar de las ecuaciones de Langevin, la versión del problema con temperatura finita. El sistema de ecuaciones de Langevin para este caso será

$$\frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} = S(Y_{n-1} - 2Y_n + Y_{n+1}) + 2e^{-Y_n}(e^{-Y_n} - 1) - \beta \frac{dY_n}{d\tau} + D\xi_n(\tau), \quad 1 \leq n \leq N, \quad (6)$$

donde los $\xi_n(\tau)$ son ruidos blancos gaussianos (procesos de Wiener) de media cero y varianza unidad, y la intensidad del ruido y la disipación están relacionadas a través del ya mencionado teorema de fluctuación-disipación de la forma $D = \sqrt{2\beta k_B T}$, siendo k_B la constante de Boltzmann. Es importante observar que hemos introducido un término de disipación en la ecuación, que es imprescindible ya que de lo contrario el ruido hace que la energía del sistema diverja. La disipación compensa ese aporte de energía y hace que el sistema se equilibre en una energía que es la que debe tener a la temperatura T que seleccionemos mediante la elección de D . Normalmente, estas ecuaciones se estudian numéricamente, aunque a veces es posible extraer información analítica. El lector interesado puede encontrar una discusión detallada de este tipo de problemas en [22, 23].

Volviendo a nuestra ecuación (5), dado que no queremos linealizar, podemos trabajar con un desarrollo que mantenga las no linealidades de primer orden, poniendo $Y_n \equiv \epsilon \phi_n$ con $\epsilon \ll 1$ y quedándonos con los primeros términos del sumando no lineal:

$$\frac{d^2 \phi_n}{d\tau^2} = S(\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1}) - 2 \left(\phi_n - \frac{3}{2}\epsilon \phi_n^2 + \frac{7}{6}\epsilon^2 \phi_n^3 \right). \quad (7)$$

La aproximación lineal de (7) es

$$\frac{d^2 \phi_n}{d\tau^2} = S(\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1}) - 2\phi_n. \quad (8)$$

Este sistema posee una familia de soluciones de la forma

$$\phi_n(\tau) = F e^{i\theta_n} + F^* e^{-i\theta_n}, \quad (9)$$

donde $\theta_n \equiv qn - \omega t$, llamadas *ondas planas*. Aquí, los parámetros q y ω deben verificar la igualdad

$$\omega^2 = 2 + 4S \operatorname{sen}^2 \frac{q}{2}, \quad (10)$$

llamada relación de dispersión de ondas planas.

En este marco, la solución de (7) que generaliza la onda plana (9) es

$$\phi_n(\tau) = F_n e^{i\theta_n} + F_n^* e^{-i\theta_n} + \epsilon(G_n + H_n e^{2i\theta_n} + H_n^* e^{-2i\theta_n}). \quad (11)$$

La elección de los términos adicionales se justificará más adelante, pero su origen es fácil de comprender: como las ecuaciones contienen un término $\epsilon\phi_n^2$, la exponencial generará de manera natural el segundo armónico. Además, como la expresión (11) es una onda plana modulada que en la aproximación lineal sería de amplitud constante, parece lógico razonar como si los coeficientes F_n , G_n y H_n dependieran débilmente de la coordenada espacial a través de variables “lentas” $X_1 = \epsilon x$, $X_2 = \epsilon^2 x$ y dependieran del tiempo a través de $T_1 = \epsilon\tau$, $T_2 = \epsilon^2\tau$.

Para obtener información sobre los coeficientes, se pasa al continuo en la dependencia espacial, reemplazando éstos en los sitios $n \pm 1$ por sus desarrollos de Taylor. Por ejemplo, esto conduce a las igualdades

$$F_{n\pm 1} = F \pm \epsilon \frac{\partial F}{\partial X_1} \pm \epsilon^2 \frac{\partial F}{\partial X_2} + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial X_1^2}. \quad (12)$$

Sustituyendo en las ecuaciones del movimiento, al orden ϵ^0 la cancelación de los términos en $e^{\pm i\theta_n}$ conduce a la relación de dispersión (10). Es interesante observar que esta relación corresponde a una red discreta, en contraste con la aproximación continua que hemos hecho para las funciones F , G y H ; es decir, a pesar de la naturaleza del argumento, estamos conservando en el modelo sus características discretas en espacio, en coherencia con la estructura del ADN. Por ello, esta aproximación recibe a veces el nombre de *semi-discreta* [32].

Al orden ϵ , la cancelación de los términos en $\exp(\pm i\theta_n)$ conduce a las igualdades

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} + v_g \frac{\partial F}{\partial X_1} = 0, \quad v_g = \frac{S \operatorname{sen} q}{\omega}, \quad (13)$$

donde v_g es la *velocidad de grupo* de las ondas con relación de dispersión dada por (10). Por otro lado y al mismo orden, los términos sin exponenciales o con $\exp(2i\theta_n)$ llevan a

$$G = 3FF^*, \quad (14)$$

$$H = -\frac{1}{2} \frac{F^2}{1 + (8S/3) \operatorname{sen}^4(q/2)}. \quad (15)$$

Llegamos ahora al orden ϵ^2 , para el que obtenemos la ecuación realmente interesante (la que cierra el desarrollo permitiendo calcular F), imponiendo

la cancelación de términos que contienen $\exp(\pm i\theta_n)$. Tras pasar al sistema de referencia móvil con velocidad v_g , es decir, en las nuevas variables

$$\sigma = T_1 + \text{Const.}, \quad \xi = X_1 + v_g T_1,$$

resulta:

$$i \frac{\partial F}{\partial \sigma} + P \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} + Q|F|^2 = 0, \quad (16)$$

donde

$$P = \frac{S\omega^2 \cos q - S^2 \sin^2 q}{2\omega^3}, \quad (17)$$

$$Q = \frac{1}{\omega} \left(11 - \frac{9}{3 + 8S \sin^4(q/2)} \right). \quad (18)$$

En (16) encontramos la famosa *ecuación de Schrödinger no lineal* (NLS, de sus siglas en inglés). Dado que $PQ > 0$ cuando $q < \pi/2$, existen soluciones localizadas para vectores de la onda portadora q pequeños. De ellas hablaremos en la siguiente Sección.

4.2 *Breathers* y localización de energía

La ecuación NLS tiene soluciones de tipo solitón [24, 38]: funciones localizadas en el espacio, típicamente exponencialmente, que tienen la propiedad de propagarse manteniendo su forma incluso tras interacciones con otras del mismo tipo (de ahí su nombre). De hecho, la ecuación NLS es completamente integrable (propiedad que suele llevar asociada la existencia de este tipo de soluciones). Para nuestro problema, esto permite escribir F directamente y, a partir de ahí, obtener G y H . Finalmente, llegamos a que

$$Y_n(t) = 2a_0 \operatorname{sech} \left[a_0 \sqrt{\frac{Q}{2P}} (n - v_g t - U_e t) \right] \cos(q'n - \omega't) + a_0^2 \operatorname{sech} \left[a_0 \sqrt{\frac{Q}{2P}} (n - v_g t - U_e t) \right] \{3 - \cos[2(q'n - \omega't)]\}, \quad (19)$$

donde a_0 y U_e caracterizan la solución solitón de NLS. En (19),

$$\omega' = \omega + \frac{v_g U_e}{2P} + \frac{U_e^2}{4P} - \frac{Q a_0^2}{2} \quad (20)$$

y

$$q' = q + \frac{U_e}{2P} \quad (21)$$

son respectivamente la frecuencia y el vector de onda corregidos para la onda portadora.

Es importante recordar que (19) proporciona sólo aproximaciones de las soluciones de (5). Sin embargo, las simulaciones numéricas del modelo original

muestran que se trata de buenas aproximaciones, estables siempre que ω' no esté en la banda de frecuencias del modelo discreto linealizado. Éste es el caso si, por ejemplo, ω es próxima a las frecuencias más bajas permitidas, $\omega = \sqrt{2}$, lo que corresponde a una solución oscilatoria, de gran amplitud, muy similar a las observadas en la Fig. 4.

Así pues, el *breather* de la ecuación NLS [38], así llamado precisamente por su carácter oscilatorio en tiempo, resulta ser una buena explicación de las aperturas espontáneas del ADN (a las que los biólogos también se refieren como *breathing*).

Para confirmar que estamos describiendo fenómenos reales, nos deberíamos asegurar de que estas soluciones pueden surgir de manera espontánea, es decir, que no es necesario escoger cuidadosamente los datos iniciales para llegar a ellas. En este sentido, merece la pena observar lo siguiente. Es bien conocido que las soluciones extendidas a todo el sistema son inestables (inestabilidad modulacional, véase [16]). El resultado habitual de esta inestabilidad es la formación de un conjunto de solitones aproximados que posteriormente interaccionan de modo que, a consecuencia de su interacción, los solitones de mayor tamaño “crecen” a expensas de los más pequeños [4]. Así, los modos de gran amplitud que nos interesan pueden aparecer libremente.

4.3 Paredes de dominio

En el límite continuo, la ecuación dinámica resultante del Hamiltoniano (4), esto es,

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \tau^2} - S \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + V'(Y) = 0, \quad \text{con } V(Y) = (e^{-Y} - 1)^2, \quad (22)$$

tiene una solución estacionaria explícita, completamente distinta del *breather*, pero también significativa para la dinámica del ADN.

En efecto, buscando soluciones independientes de τ , llegamos a la ecuación

$$-S \frac{d^2 Y}{dx^2} + V'(Y) = 0, \quad (23)$$

que se resuelve fácilmente por cuadraturas. Multiplicando por dY/dx e integrando respecto de x , queda

$$-\frac{1}{2}S \left(\frac{dY}{dx} \right)^2 + V(Y) = C, \quad (24)$$

siendo C una constante determinada por las condiciones de contorno. Imponiendo que los pares de bases están en equilibrio en el extremo inferior de la cadena, esto es,

$$Y = 0 \quad \text{para } x \rightarrow -\infty,$$

resulta $C = 0$ y entonces se deduce que

$$Y(x) = \log \left[1 + \exp \left(\sqrt{\frac{S}{2}} (x - x_0) \right) \right], \quad (25)$$

donde x_0 es una constante de integración que nos da la posición de la solución.

Esta solución describe una configuración donde una parte de la molécula (la situada en $x < x_0$ está cerrada, mientras que para $x \gg x_0$ la separación de pares crece linealmente con el espacio y la molécula está completamente desnaturalizada. Es decir, tenemos una *pared de dominio* entre dos estados de la molécula de ADN.

Mientras que las aproximaciones de tipo *breather* discutidas más arriba tienen que ver con las aperturas espontáneas de la doble cadena y con las burbujas de transcripción, las que acabamos de encontrar son relevantes para el proceso de replicación, en el que las dos hebras se separan por completo formando dos nuevas moléculas idénticas a la original. Sin embargo, la aproximación continua en un sistema infinito presenta inconvenientes como modelo de este proceso. Tal vez el más importante es que su energía total es infinita, siendo por tanto inestable: si damos esta función como dato inicial para la ecuación dependiente del tiempo, vemos que evoluciona hacia la solución $Y = 0$, es decir, hacia la cadena cerrada por completo. Es, pues, necesario, hacer un estudio más cuidadoso, que presentamos en la sección siguiente.

5 Paredes de dominio en el modelo discreto

En esta sección, que sigue básicamente la referencia [12], seguiremos utilizando el modelo de Peyrard-Bishop, pero ahora escribiremos el Hamiltoniano adimensionalizado en la forma

$$\mathcal{H}' = \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} P_n^2 + \frac{1}{2R} (Y_{n+1} - Y_n)^2 + V(Y_n) \right\}, \quad P_n \equiv \frac{dY_n}{d\tau}, \quad (26)$$

en términos de una constante positiva y sin dimensiones, R , que viene a jugar el papel de una discretización efectiva. Así, $R \gg 1$ representa una discretización con paso espacial muy grande, mientras que $R \ll 1$ se acerca al límite continuo.

Como en el caso continuo, podemos buscar soluciones estacionarias de las ecuaciones de movimiento, lo que conduce a la relación de recurrencia

$$Y_{n+1} = 2Y_n - Y_{n-1} + RV'(Y_n), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (27)$$

Las soluciones de esta relación quedan definidas unívocamente por las condiciones iniciales $\{Y_0, Y_1\}$. Restringiéndonos al caso $Y_0 = 0$ (lo que podemos hacer sin pérdida de generalidad), vemos que Y_n depende sólo del valor $Y_1 = y$, de manera que la ecuación (27) se puede reescribir en términos de y , introduciendo la notación $Y_n(y)$. De ahora en adelante discutiremos el comportamiento de las soluciones $Y_n(y)$ como función de y .

Las relaciones (27) son satisfechas tanto por las soluciones estables como por las inestables. Por tanto, para un análisis de estabilidad, recurriremos al

Hessiano del sistema, dado por

$$\mathcal{H}_N(y) = \begin{pmatrix} d_1(y) & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & d_2(y) & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & d_3(y) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_N(y) \end{pmatrix}, \quad (28)$$

donde hemos puesto $d_n(y) = 2 + RV''(Y_n(y))$.

Sea

$$\Delta_n(y) = \det(\mathcal{H}_n(y)). \quad (29)$$

Buscaremos soluciones de (27) que sean estables, en el sentido de que verifiquen las desigualdades $\Delta_n(y) > 0$ para todo n .

Como el Hessiano es una matriz tridiagonal, hay una relación de recurrencia entre los distintos Δ_n :

$$\Delta_{n+1}(y) = d_{n+1}(y)\Delta_n(y) - \Delta_{n-1}(y), \quad (30)$$

con $\Delta_1 = d_1$ y $\Delta_2 = d_1d_2 - 1$.

Pero esta expresión es también satisfecha por las $Y'_n(y)$. En efecto, derivando la ecuación (27) respecto de y , encontramos que

$$Y'_{n+1}(y) = [2 + RV''(Y_n(y))]Y'_n(y) - Y'_{n-1}(y) = d_n(y)Y'_n(y) - Y'_{n-1}(y), \quad (31)$$

con $Y'_2(y) = \Delta_1(y)$ e $Y'_3(y) = \Delta_2(y)$. Por tanto, se ha de cumplir que

$$\Delta_n(y) = Y'_{n+1}(y), \quad (32)$$

para cada n y la región de estabilidad de las soluciones de (27) es la de los puntos y que satisfacen $Y'_n(y) > 0$ para todo $n = 2, 3, \dots, N+1$.

Hasta aquí no hemos realizado ninguna aproximación y, de hecho, lo que hemos dicho es cierto para cualquier $V(Y)$. A partir de este momento, nos centraremos en caso del potencial de Morse (3). Las intenciones son encontrar una expresión analítica de las soluciones de la relación (27) y analizar su estabilidad en función de la condición inicial y . Es interesante notar que estos argumentos se pueden aplicar al modelo continuo, produciendo aproximaciones que se pueden consultar en [12]. No obstante, nos limitaremos aquí a hablar del modelo más realista determinado por (26).

5.1 Soluciones

Como ya hemos dicho, el límite discreto corresponde a $R \gg 1$. En este caso, usando una suma telescópica de $Y_{n+1} - Y_n$, y teniendo en cuenta que las condiciones iniciales son $Y_0 = 0$ e $Y_1 = y$, la ecuación (27) se puede reescribir en la forma

$$Y_{n+1}(y) = (n+1)y + R \sum_{k=1}^n (n+1-k) V'(Y_k(y)). \quad (33)$$

Pongamos ahora

$$f_k(y) \equiv V'(Y_k(y)) = 2e^{-Y_k(y)} \left(1 - e^{-Y_k(y)}\right). \quad (34)$$

Estas funciones aparecen representadas para distintos valores de R , dentro del límite discreto, en la Fig. 5. Como puede verse, las f_k están muy localizadas y su solapamiento depende de R . De hecho, para valores en el límite discreto que nos interesa, este solapamiento es muy pequeño, y podemos calcular la posición de los máximos de las $f_k(y)$ y a partir de ahí aproximar $f_k(y)$ por la primera de ellas, $f_1(y)$, poniendo

$$f_k(y) \simeq f_k^{(1)}(y) \equiv f_1(b_k y), \quad (35)$$

con

$$b_n = \frac{1}{2\sqrt{R(R+2)}} \left[\left(R + 1 + \sqrt{R(R+2)} \right)^n - \left(R + 1 - \sqrt{R(R+2)} \right)^n \right]. \quad (36)$$

Esta expresión proporciona una aproximación analítica de las soluciones para cualquier valor y , eso sí, tanto más correcta cuanto más discreto sea el caso considerado. Si sustituimos (35)–(36) en (33), llegamos a que

$$Y_{n+1}^{(1)}(y) = (n+1)y + R \sum_{k=1}^n (n+1-k) f_k^{(1)}(y), \quad (37)$$

lo que constituye una buena aproximación de $Y_n(y)$ para valores grandes de R . La Fig. 6 confirma la precisión de esta aproximación: para $R \gtrsim 100$, resulta ser muy buena, mientras que al disminuir R empeora. Para valores más bajos de R se puede mejorar la aproximación recurriendo a la función siguiente, $f_2(y)$ en vez de $f_1(y)$, como aproximación para el resto de las $f_k(y)$. Así, pondremos

$$f_k(y) \simeq f_k^{(2)}(y) \equiv f_2\left(y \frac{b_k}{b_2}\right) \quad (38)$$

para $k = 3, 4 \dots$ y aproximaremos $Y_n(y)$ por

$$Y_{n+1}^{(2)}(y) = (n+1)y + nRf_1(y) + R \sum_{k=2}^n (n+1-k) f_k^{(2)}(y). \quad (39)$$

Esta aproximación es aún mejor que la dada por $Y_n^{(1)}(y)$, e incluso para $R = 10$ los resultados son muy similares a los exactos (véase la Fig. 7 para más detalles).

Los errores de estas aproximaciones dependen de los valores de R y de n . Por ejemplo, $Y_n^{(1)}(y)$ es exacta para $n = 1$ y $n = 2$, para cualquier valor de R , mientras que $Y_n^{(2)}(y)$ es exacta hasta $n = 3$ para cualquier R . Para pequeños valores de n , la mayor diferencia entre el valor exacto $f_n(y)$ (que se puede

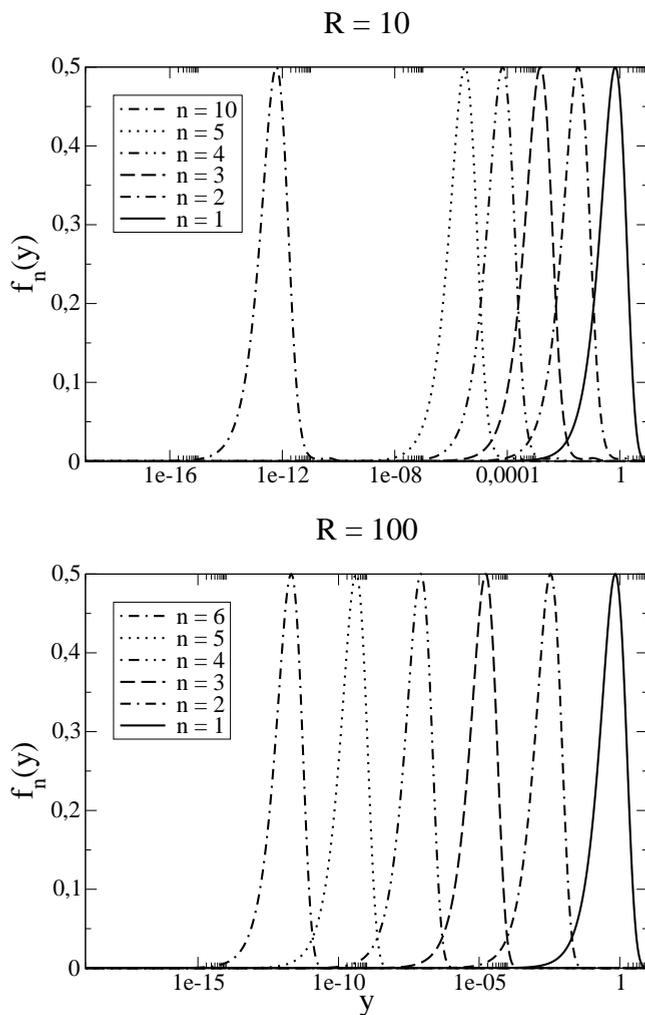


Figura 5: Las funciones $f_n(y)$ para $R = 10$ (arriba) y $R = 100$ (abajo), para diferentes valores de n .

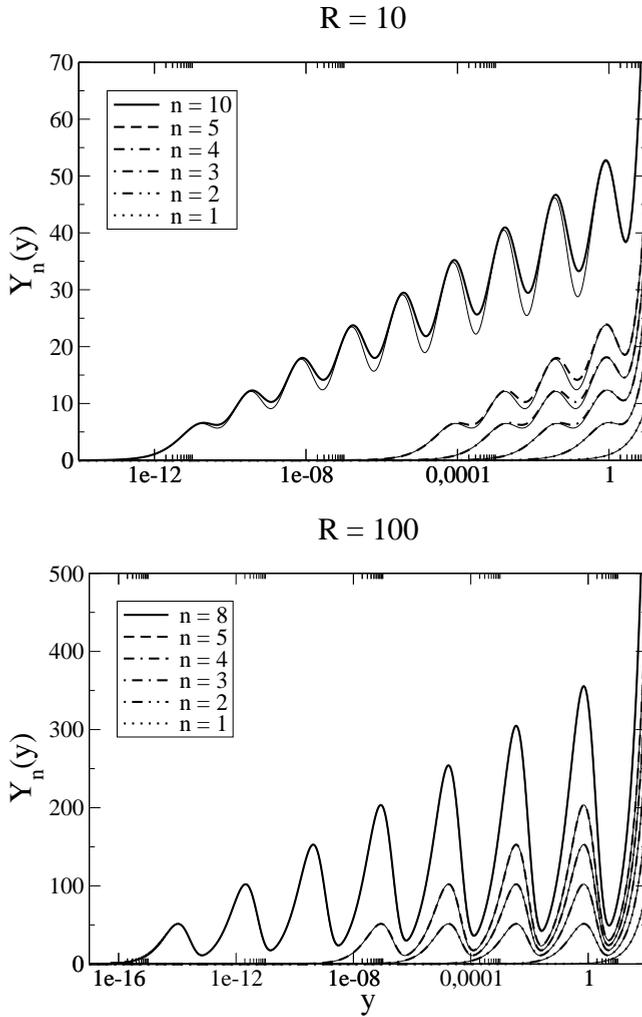


Figura 6: La aproximación $Y_n^{(1)}(y)$ (véase ecuación (37)) frente al valor exacto $Y_n(y)$, para $R = 10$ (arriba) y $R = 100$ (abajo), para diferentes valores de n . Las soluciones exactas aparecen dibujadas en líneas gruesas, mientras que las correspondientes aproximaciones aparecen en líneas finas.

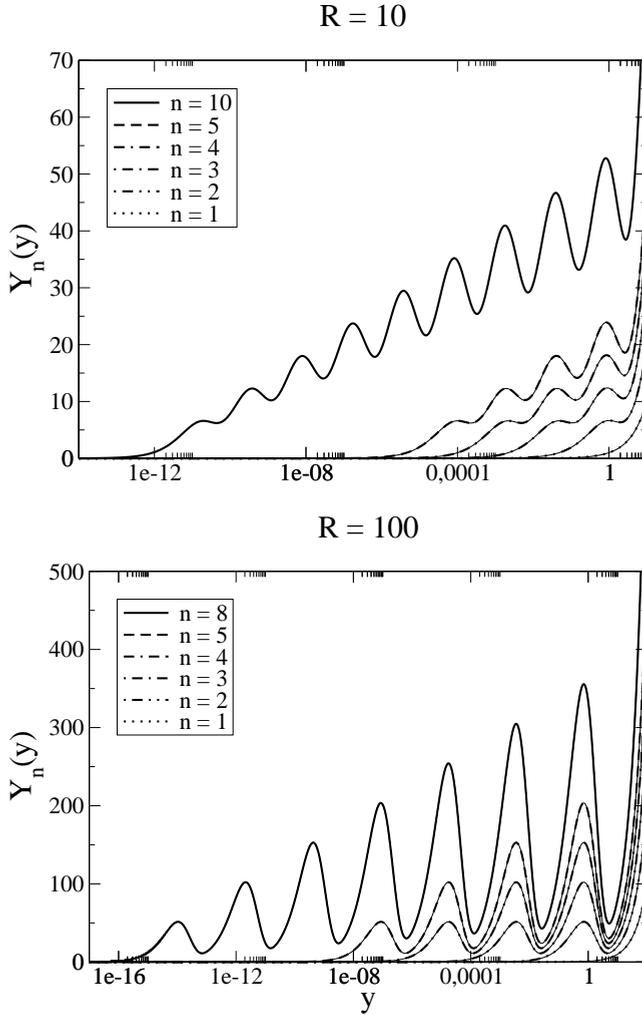


Figura 7: La aproximación $Y_n^{(2)}(y)$ (véase la ecuación (39)) frente a los valores exactos $Y_n(y)$, para $R = 10$ (arriba) y $R = 100$ (abajo), para diferentes valores de n . Las soluciones exactas aparecen dibujadas en líneas gruesas, mientras que las correspondientes aproximaciones aparecen en líneas finas.

obtener numéricamente sin dificultad) y $f_n^{(1)}(y)$ se sitúa en torno a los mínimos de $f_n(y)$, con un error máximo $E_{max}^{(1)} \simeq 0,06$ para $R = 10$ y $E_{max}^{(1)} \simeq 0,006$ para $R = 100$. Para la aproximación de segundo orden basada en $f_n^{(2)}$, el error máximo es $E_{max}^{(2)} \simeq 2,7 \cdot 10^{-3}$ para $R = 10$ y $E_{max}^{(2)} \simeq 3,2 \cdot 10^{-5}$ para $R = 100$. Por otro lado, otra región mal aproximada, aunque no tanto como la que acabamos de mencionar, aparece en torno a los máximos de $f_{n-1}(y)$.

Estos cálculos se pueden hacer también para órdenes mayores de aproximación, $f_n^{(k)}(y)$. Se puede ver que la reducción del error conseguida al pasar de k a $k + 1$ es al menos de un orden de magnitud. Hay un límite computacional, dado por la precisión del ordenador, que no nos permite comprobar la validez de esta afirmación más allá de ciertos k y n que dependen de R , pero todo indica que el mismo comportamiento se observa para valores mayores de k y n .

Las aproximaciones dadas por las ecuaciones (37) y (39) nos permiten calcular con precisión $Y_n(y)$ para cualquier valor de n e y . Esto es importante, porque el cálculo numérico exacto utilizando la recurrencia de las ecuaciones (27) y (33) presenta serias dificultades para valores de y cercanos a cero, cuya gravedad depende de la precisión del ordenador. Por tanto, para analizar la estabilidad en el límite discreto, utilizaremos las aproximaciones $Y_n^{(k)}(y)$ que acabamos de ver. De esta manera, podemos estudiar sistemas mucho mayores que los accesibles por solución numérica directa de las relaciones de recurrencia.

5.2 Estabilidad

En esta sección vamos a analizar la estabilidad de las soluciones estacionarias, centrándonos en el caso de sistemas pequeños, para los que la derivada $Y_n'(y)$ se puede calcular para todo n sin necesidad de aproximar, sin incurrir en errores de precisión del ordenador.

En la Fig. 8 se muestra la dependencia de $\partial Y_n(y)/\partial \log_{10}(y)$ de la condición inicial y , en escala logarítmica, para distintos valores del tamaño del sistema, N . El motivo de utilizar $\partial Y_n(y)/\partial \log_{10}(y)$ en vez de $Y_n'(y)$ es el de obtener una curva visible: la representación directa de $Y_n'(y)$ haría imposible observar los intervalos con $Y_n'(y) > 0$. Como el signo de ambas derivadas es el mismo para todo $y > 0$, se prefiere la escala logarítmica.

Con este cambio, para cada n aparece una estructura “sinusoidal”, con $n - 1$ máximos y mínimos alrededor de $Y_n'(y) = 0$. Resulta así claro que en sistemas de tamaño n aparece un intervalo de inestabilidad adicional respecto de los sistemas de tamaño $n - 1$, situado a valores pequeños de y . Además, la figura 8 también indica que el conjunto de puntos inestables de un sistema de tamaño n contiene al de puntos inestables de uno de tamaño $n - 1$. Un argumento de plausibilidad en favor de este resultado pasa por analizar los puntos que satisfacen $Y_n'(y_0) = 0$, que son los de los extremos de un intervalo de puntos inestables. En ese caso, si $Y_{n-1}'(y_0) > 0$, tenemos que $Y_{n+1}'(y_0) < 0$ (véase la ecuación (31)) y por tanto el intervalo de puntos inestables del sistema de tamaño n es mayor que el de $n - 1$. Esta condición se satisface para todos los

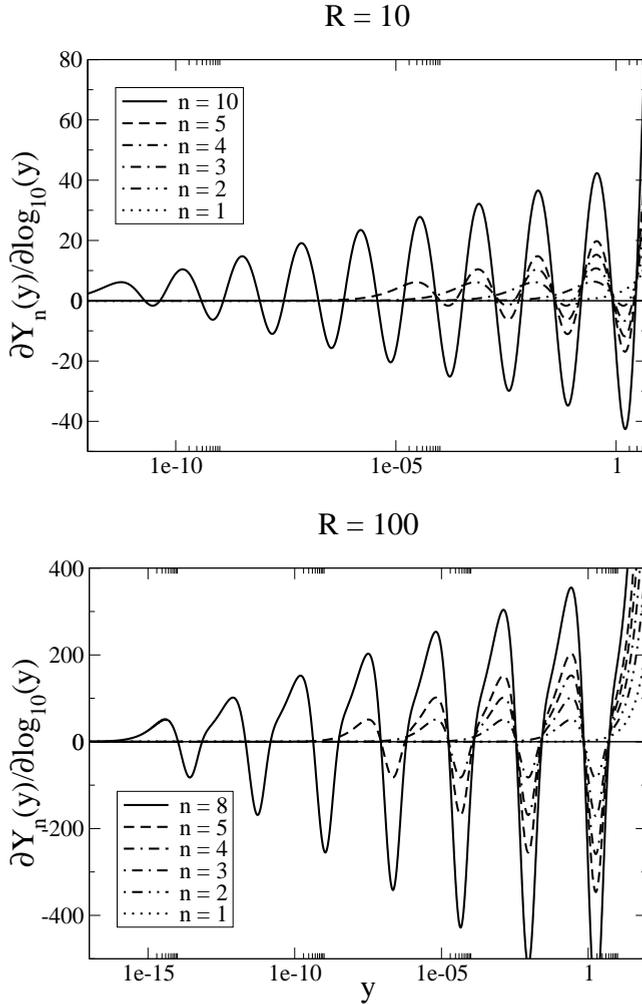


Figura 8: Derivada de $Y_n(y)$ con respecto a $\log_{10}(y)$ para distintos valores de n con $R = 10$ (arriba) y $R = 100$ (abajo), siendo el eje x logarítmico. La región de estabilidad de un sistema de tamaño N es la intersección de los conjuntos de puntos que satisfacen $\partial Y/\partial y > 0$ para $n = 1, 2, \dots, N + 1$. A partir de estas Figuras, encontramos que la región de estabilidad corresponde a los puntos que satisfacen la condición para $n = N + 1$, ya que la región de estabilidad del sistema de tamaño N parece estar contenida en la región de estabilidad del sistema de tamaño $N - 1$ (véase el texto para más detalles).

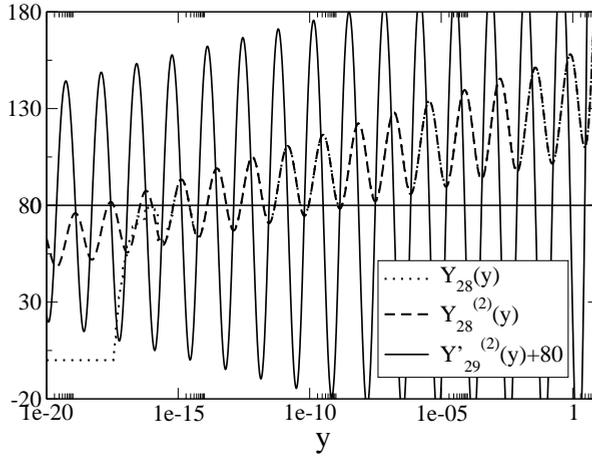


Figura 9: Las soluciones estables e inestables que proporciona la aproximación $Y_N^{(2)}$ para un sistema con $N = 28$, $Y_0 = 0$ y $Y_N = 80$. Las soluciones son las intersecciones de las curvas con la línea $Y_{28} = 80$, que marca la condición de contorno derecha. Es preciso estudiar el signo de Y'_{29} para establecer la estabilidad de las soluciones, por lo que se dibuja $\partial Y_{29}(y)/\partial \log_{10}(y)$ para mayor claridad. Nuestra aproximación da ocho soluciones estables y siete inestables para estos parámetros, exactamente como en [40].

nuevos intervalos de inestabilidad que aparecen para cada $Y_n(y)$, comenzando con $Y_2(y)$ y por inducción se puede aplicar a todos los sistemas. Así pues, los puntos estables de un sistema de tamaño n son los que satisfacen $Y'_{n+1}(y) > 0$.

Como comprobación independiente de la validez de estos resultados, se pueden comparar con los recientemente publicados en [40]. Estudiando el problema discreto estacionario con condiciones de contorno fijas, los autores encuentran ocho soluciones estables y siete inestables para un sistema de tamaño $N = 28$. En concreto, las condiciones de contorno utilizadas fueron $Y_0 = 0$ y $Y_N = 80$ para $R = 10,1$.

La solución exacta $Y_n(y)$ y la solución aproximada $Y_n^{(2)}(y)$ de este sistema aparecen en la Fig. 9. La gráfica deja claro el problema de precisión mencionado con anterioridad, que aparece cuando intentamos calcular la solución numérica exacta para valores pequeños de y . Por otra parte, la solución aproximada $Y_n^{(2)}(y)$ se comporta perfectamente en todo el rango de y . Vemos pues que $Y_n^{(2)}(y)$ da el mismo número de soluciones estables e inestables que el obtenido numéricamente en [40] y, en consecuencia, la estructura de picos de $Y_n(y)$ da una buena explicación del número y estructura de las soluciones.

6 Mecánica Estadística de la desnaturalización térmica

Hasta aquí hemos venido estudiando la dinámica de moléculas individuales de ADN. Hemos obtenido soluciones que describen las excitaciones no lineales de la molécula, correspondientes además a distintos procesos que tienen lugar en su función biológica, y que constituyen interesantes ejemplos de estudios en dinámica no lineal. Sin embargo, es preciso ir más allá, puesto que la condición habitual para las moléculas es la temperatura corporal, que introduce efectos de fluctuaciones térmicas, como ya vimos en algunas simulaciones. Si queremos abordar esta perspectiva complementaria, tenemos que utilizar el marco de trabajo dado por la Mecánica Estadística. En esta sección, vamos a ocuparnos del problema de la desnaturalización térmica, que veremos que proporciona nuevos e interesantes problemas matemáticos.

6.1 Transición de desnaturalización

La Mecánica Estadística se ocupa de los sistemas de muchas partículas en interacción a temperatura finita e intenta obtener una descripción colectiva aplicable al sistema como un todo a partir de los grados de libertad microscópicos. De esta manera, se utiliza para fundamentar la Termodinámica, que se puede plantear alternativamente como una ciencia axiomática. El lector interesado puede encontrar buenas introducciones en las referencias [26, 30], que prácticamente no requieren conocimientos de Física.

En el formalismo de la Mecánica Estadística, el objeto central de estudio es la energía libre. Consideramos nuestro sistema en contacto con un baño térmico a temperatura T , manteniendo el número de partículas (pares de bases) de la molécula constante. Estamos, en el lenguaje de la Mecánica Estadística, en la colectividad canónica, que queda descrita por la llamada *función de partición*

$$Z \equiv \int e^{-\beta\mathcal{H}} \prod_n dp_n dy_n, \quad (40)$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$ y \mathcal{H} es, una vez más, el Hamiltoniano del sistema a estudiar (en nuestro caso el asociado al modelo de Peyrard-Bishop). Una vez calculada Z , se pueden determinar a partir de ella todas las magnitudes termodinámicas de interés.

Éste es en realidad el problema central de la Mecánica Estadística. En general, no se sabe o no se puede calcular la función de partición. Sin embargo, incluso cuando no se sabe, se puede extraer información de ella, como vamos a ver a continuación.

Para calcular la integral (40), vamos a especificar en detalle nuestro sistema. Consideramos una cadena finita de N pares de bases, con condiciones de contorno periódicas, lo que viene a ser añadir un par de bases ficticio con índice 0 que hace lo mismo que el par N . El objetivo es entonces calcular

$$Z = \iint \exp\{-\beta\mathcal{H}\} \delta(y_N - y_0) \prod_n dp_n \prod_n dy_n, \quad (41)$$

donde la “función” de Dirac δ asegura el cumplimiento de las condiciones de contorno periódicas. Las integrales en las variables p_n son simples integrales Gaussianas desacopladas, que se calculan fácilmente, obteniéndose que

$$Z = \left(\sqrt{2\pi m k_B T} \right)^N Z_y, \quad (42)$$

siendo Z_y la llamada *integral de configuración*

$$Z_y = \int \left[\prod_n \exp(-\beta f(y_n, y_{n-1})) \right] \delta(y_N - y_0) \prod_n dy_n, \quad (43)$$

y

$$f(y_n, y_{n-1}) \equiv \frac{K}{2} (y_n - y_{n-1})^2 + V(y_n). \quad (44)$$

Aplicaremos a continuación una técnica estándar en este tipo de problemas unidimensionales, conocida como el método del operador de transferencia.

Más precisamente, consideremos el operador $S : L^2(\mathbb{R}) \mapsto L^2(\mathbb{R})$, dado por

$$S\phi(y) = \int e^{-\beta f(y,z)} \phi(z) dz \quad \forall \phi \in L^2(\mathbb{R}).$$

El operador S es lineal, compacto, autoadjunto y positivo. Consideremos las autofunciones asociadas, definidas por

$$\int e^{-\beta f(y,z)} \phi_i(z) dz = e^{-\beta \epsilon_i} \phi_i(y), \quad \|\phi_i\|_{L^2} = 1, \quad i \geq 0. \quad (45)$$

Aquí, los ϵ_i forman una sucesión creciente de números reales positivos que tiende a $+\infty$ y las ϕ_i constituyen una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$. Utilizando este hecho, es posible demostrar que

$$Z_y = \sum_i e^{-\beta N \epsilon_i}. \quad (46)$$

En Mecánica Estadística, el paso siguiente es tomar el llamado límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$, que es de hecho el único en el que se obtienen transiciones de fase; en sentido estricto, en sistemas de tamaño finito no hay verdaderas transiciones de fase (volveremos sobre la definición concreta de transición de fase más adelante). En este límite, el resultado está determinado por el menor valor de ϵ_i , es decir, ϵ_0 . Llegamos finalmente a la expresión de la energía libre:

$$f = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(-\frac{k_B T}{N} \log Z \right) = \epsilon_0 - \frac{k_B T}{2} \log(2\pi m k_B T). \quad (47)$$

Cálculos adicionales que omitimos muestran que también otras magnitudes pueden ser obtenidas con los autovalores y autofunciones del operador de transferencia. Así, la apertura media de los pares viene dada por

$$\langle y \rangle = \int y |\phi_0(y)|^2 dy, \quad (48)$$

lo que lleva a interpretar $|\phi_0(y)|^2$ como la densidad de probabilidad de la apertura de los pares. La función de correlación asociada resulta ser

$$\begin{aligned} C(n) &= \langle (y_n - \langle y \rangle)(y_0 - \langle y \rangle) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y \phi_i^*(y) \phi_0(y) \exp(-\beta(\epsilon_i - \epsilon_0)|n|) dy. \end{aligned} \quad (49)$$

Vemos, pues, que el problema se reduce a calcular los autovalores y autovectores del operador de transferencia. Para ello, hay dos opciones: la primera, atacar el problema numéricamente, discretizando el operador y cambiándolo por una matriz, que luego se puede diagonalizar con cualquiera de las rutinas disponibles; la segunda opción consiste en renunciar de entrada al cálculo exacto e intentar aproximaciones que nos permitan entender cualitativamente el problema. Hablaremos ahora de esta segunda, dejando la alternativa numérica para más adelante.

La aproximación más adecuada se conoce como “acoplamiento fuerte”. No es muy correcta para el ADN, pero aún así nos será útil, como veremos. Las ecuaciones que tenemos que resolver para calcular los autovalores y autofunciones son las siguientes:

$$\int \exp \left\{ -\beta \left[\frac{K}{2} (y-z)^2 + V(y) \right] \right\} \phi(z) dz = e^{-\beta\epsilon} \phi(y), \quad y \in \mathbb{R}. \quad (50)$$

Si K es grande, cuando z difiere de y , el término $(y-z)^2$ crece muy rápidamente, por lo que la integral está dominada por los valores de z cercanos a y . Pongamos entonces $z = y + x$ y desarrollemos $\phi(y+x)$ en potencias de x :

$$\begin{aligned} \int \exp \left\{ -\beta \left[\frac{K}{2} x^2 \right] \right\} \left[\phi(y) + x\phi'(y) + \frac{1}{2}x^2\phi''(y) \right] dx \\ = \exp(-\beta[\epsilon - V(y)])\phi(y). \end{aligned} \quad (51)$$

Ahora podemos calcular las integrales Gaussianas en x ; la integral impar se anula y tenemos

$$\sqrt{\frac{2\pi}{\beta K}} \left[\phi(y) + \frac{1}{2\beta K} \phi''(y) \right] = \exp(-\beta[\epsilon - V(y)])\phi(y). \quad (52)$$

Reorganizando los términos, resulta que

$$\phi(y) + \frac{1}{2\beta K} \phi''(y) = \exp \left\{ -\beta \left[\epsilon + \frac{1}{2\beta} \log \left(\frac{2\pi}{\beta K} \right) - V(y) \right] \right\} \phi(y). \quad (53)$$

Pongamos $\tilde{\epsilon} = \epsilon + (1/2\beta) \log(2\pi/\beta K)$. Si $y > 0$, es decir, cuando las cadenas de la molécula de ADN se separan (lo cual corresponde realmente al proceso que estamos estudiando), el potencial de Morse está acotado por la constante D . Cuando $\beta D < 1$, podemos desarrollar la exponencial, obteniéndose la relación aproximada

$$\phi(y) + \frac{1}{2\beta K} \phi''(y) = [1 + \beta V(y) - \beta \tilde{\epsilon}] \phi(y). \quad (54)$$

Llegamos así a una ecuación estacionaria de Schrödinger para una partícula en un potencial de Morse:

$$-\frac{1}{2K} \frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} + \beta^2 V(y) \phi(y) = \beta^2 \tilde{\epsilon} \phi(y). \quad (55)$$

La solución de (55) fue obtenida por el propio Morse.

Dado que hemos obtenido (55) tras aproximar el problema de autovalores y autofunciones (45), no merece la pena detenerse a analizar las soluciones exactas. Algunas ideas generales sobre la ecuación de Schrödinger que se pueden encontrar sin dificultad en textos de Mecánica Cuántica como por ejemplo [21], son suficientes. El problema (55) tiene en general un espectro asociado a uno o más estados normalizables (espectro discreto) para $\beta^2 \tilde{\epsilon} < D$ y un espectro continuo (asociado a autofunciones no normalizables) para $\beta^2 \tilde{\epsilon} > D$. Lo interesante es que, al contrario de lo que ocurre en el caso en que $V(y)$ es un pozo cuadrado de extensión finita, el espectro continuo sólo existe si $V(y)$ es lo bastante profundo. Esto se traduce en que:

A bajas temperaturas, el mínimo de $V(y)$, dado por $\beta^2 D$, es grande (recordemos que $\beta = (k_B T)^{-1}$, siendo T la temperatura) y tenemos al menos un punto en el espectro discreto. Por tanto, recordando la expresión (48), $\langle y \rangle$ es finito y la molécula no está desnaturalizada.

Al aumentar la temperatura, el mínimo del potencial decrece (en valor absoluto) y a un cierto valor crítico de la temperatura el espectro discreto desaparece, con lo que $\langle y \rangle$ diverge y las dos cadenas del ADN están totalmente separadas.

Es importante observar que este resultado, la existencia de una temperatura que separa la fase normal de la fase desnaturalizada, no depende de la forma exacta de $V(y)$ mientras que sus características básicas respondan a la forma del potencial de Morse. Ello da más validez a nuestro resultado, ya que no conocemos exactamente el potencial que actúa entre los pares de bases y utilizamos el potencial de Morse como una aproximación cualitativa. Además, en el caso concreto del potencial de Morse, se puede ir más allá y calcular la temperatura crítica, que resulta ser

$$T_c = \frac{2\sqrt{2KD}}{ak_B}. \quad (56)$$

6.2 Mejoras del modelo

Acabamos de ver que el modelo de Peyrard-Bishop presenta, dentro de las aproximaciones realizadas, una transición de fase de desnaturalización. Este resultado tiene una importancia que va más allá de la mera descripción del ADN, que discutiremos en la siguiente Sección. Sin embargo, hay que insistir en que se trata de un modelo aproximado que, por tanto, necesita ser analizado con todo cuidado.

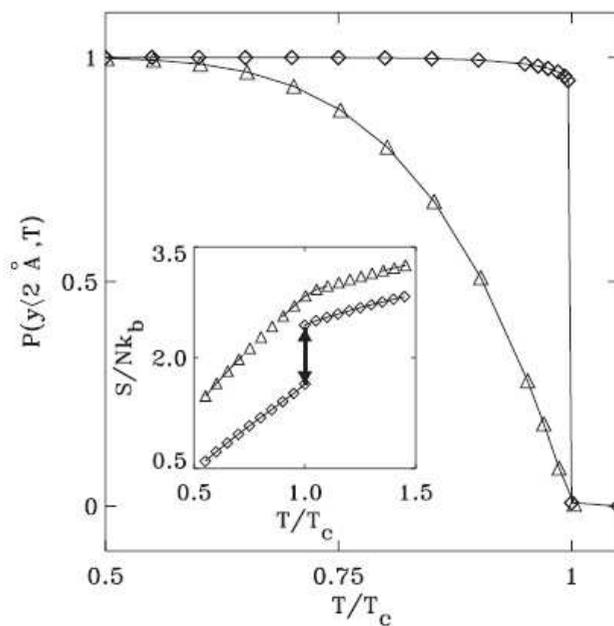


Figura 10: Resultado del cálculo aproximado para la fracción de pares de bases que permanecen cerradas en función de la temperatura para el modelo Peyrard-Bishop (triángulos) y para la versión mejorada (rombos, véase el texto). El gráfico interior muestra la variación de la entropía con la temperatura para ambos modelos.

El cálculo de la fracción de pares de bases que permanecen ligadas a una temperatura dada proporciona un buen test de las aproximaciones realizadas. Ésta es una cantidad que no está explícitamente recogida en el modelo pero que se puede estimar definiendo un umbral para la separación entre bases por encima del cual el par se considera roto. Podemos tomar $y_0 = 2 \text{ \AA}$ como un valor razonable para la rotura de los enlaces de hidrógeno, aunque el resultado no es muy sensible a este valor.

La Fig. 10 muestra la dependencia de la fracción de pares de bases cerrados respecto de la temperatura. Observamos que la fracción varía suavemente, desde 1 a la mitad de la temperatura crítica a 0 en T_c . Aquí está el problema: si bien cualitativamente esto es una transición de desnaturalización, cuantitativamente no se trata de un modelo correcto, porque la transición de desnaturalización del ADN es mucho más abrupta. Y el problema no se arregla variando los parámetros del modelo, por lo que hay que intentar mejorarlo.

Un punto que admite mejoras claras es el acoplamiento armónico entre pares de bases, $W(y_n, y_{n-1}) = \frac{K}{2}(y_n - y_{n-1})^2$, del que ya dijimos en la Sección 3.2 que era una simplificación extrema. Este término proviene en realidad de un desarrollo del potencial de interacción en torno a su mínimo, es decir, para valores pequeños de $y_n - y_{n-1}$. Pero cuando el enlace en el par n se rompe quedando fijo el par $n - 1$, podemos tener grandes valores para esta diferencia, lo que indica que aquí podemos estar siendo demasiado groseros al modelar. Cuando uno es más cuidadoso y tiene en cuenta el origen de esta interacción, se llega [15] a una expresión mejorada:

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{1}{2}K \left\{ 1 + \rho \exp[-\alpha(y_n + y_{n-1})] \right\} (y_n - y_{n-1})^2. \quad (57)$$

El significado de esta expresión es el siguiente: la interacción entre pares de bases es muy fuerte cuando ambos están unidos, debido a la colisión espacial de las nubes de electrones π que forman los enlaces de hidrógeno. Sin embargo, cuando uno de los pares se rompe, el prefactor de $(y_n - y_{n-1})^2$ hace que la interacción entre pares baje de $K' \approx K(1 + \rho)$ a K .

Para esta versión mejorada del modelo, los cálculos del apartado anterior no se pueden reproducir, debido a que el término de acoplamiento ya no es sólo función de la diferencia $z - y$ sino también de la suma. Por tanto, el problema de autovalores se ha de estudiar numéricamente.

Como ya dijimos, al discretizar en el espacio, la tarea se reduce a diagonalizar una matriz adecuada. Hay que realizar esta discretización con cuidado. Notemos que el núcleo del operador es una exponencial, por lo que sus elementos nunca serán cero; sin embargo, la precisión del ordenador puede hacer que al discretizar aparezcan componentes nulas en la matriz. Esto tiene importantes implicaciones (véase la Sección siguiente) y debe evitarse a toda costa. Por otro lado, para mejorar la precisión se pueden utilizar cuadraturas de Gauss-Hermite y un análisis de la dependencia de los resultados con el tamaño y el paso de la discretización [39].

Los resultados de este cambio en el modelo se pueden ver también en la Fig. 10. La transición de desnaturalización pasa a ser abrupta; en términos

clásicos de Mecánica Estadística, es de primer orden. Esto está en buen acuerdo con las observaciones experimentales. En realidad, si somos un poco más cuidadosos, se ve que el salto no es discontinuo sino suave, aunque sucede en un intervalo de temperaturas muy estrecho, lo que se suele llamar transición de “casi primer orden”. Además, la entropía, recogida en el gráfico interior de la Fig. 10, muestra también un salto, que corresponde a la aparición de calor latente en la transición. La versión del modelo con la interacción entre pares de bases vecinos modificada proporciona, pues, una descripción muy aproximada de la transición de desnaturalización.

6.3 ¿Son posibles las transiciones de fase unidimensionales?

Independientemente de su mayor o menor grado de acuerdo con los experimentos, tanto el modelo de Peyrard-Bishop original [31] como el mejorado por Dauxois [15] presentan transiciones de fase. Este resultado es muy interesante porque contrasta vivamente con lo que se suele enseñar en los cursos básicos de Mecánica Estadística: los modelos en una dimensión espacial con interacciones de corto alcance (en nuestro caso, sólo con los vecinos próximos) no pueden tener transiciones de fase. Dado que esto constituye un problema matemático de gran calibre, parece adecuado dedicarle una breve discusión, aunque nos lleve a un contexto más general que el de los modelos de ADN.

Estrictamente hablando, la transición de fase es un concepto puramente matemático: es una no-analiticidad de la energía libre (47). Como dijimos antes, la necesidad de tener una no-analiticidad es la que obliga a tomar el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, ya que de lo contrario la función de partición (40), de la que se deriva la energía libre, es una suma finita de exponenciales y es necesariamente analítica. El problema de decidir si un modelo tiene o no transición de fase está entonces planteado de una manera no ambigua en el límite termodinámico.

La creencia general de que en una dimensión espacial las transiciones de fase son imposibles se remonta a un teorema que van Hove demostró en 1950 [41] (es también muy conocido un argumento debido a Landau [25] que no es riguroso matemáticamente, por lo que no nos detendremos a discutirlo aquí). El trabajo de van Hove se refiere a un sistema de segmentos unidimensionales que no pueden solaparse ni permutar posiciones, que interactúan sólo con sus vecinos inmediatos y sólo hasta una cierta distancia. Con estas premisas, van Hove escribe la función de partición en términos de un operador de transferencia, al igual que hicimos para el modelo de Peyrard-Bishop, y también igual que antes llega al resultado de que en el límite termodinámico la contribución relevante es la del mayor autovalor. Utilizando la teoría de operadores integrales de Fredholm es entonces capaz de probar que ese autovalor es analítico como función de la temperatura de forma rigurosa.

El teorema de van Hove es totalmente correcto, pero su mal uso por la comunidad de Mecánica Estadística ha conducido a la creencia de que es válido para cualquier sistema unidimensional. No es la única vez que ha pasado esto: el mal llamado *teorema de localización de Anderson*, sobre autofunciones de

Hamiltonianos con desorden, tiene una historia similar (véase [17] para una discusión accesible de este problema). En realidad, el teorema de van Hove no dice nada sobre el modelo de Peyrard-Bishop porque éste no cumple varias de sus hipótesis, de entre las cuales destaca el hecho de que no sólo hay interacción entre vecinos sino que todos los pares están sometidos al potencial de Morse. Es, pues, posible, que el modelo de Peyrard-Bishop tenga una transición de fase.

Recientemente se ha probado el resultado más general conocido sobre estos problemas, que va incluso más allá de sistemas unidimensionales y es válido para todos aquéllos cuya función de partición se puede escribir mediante operadores de transferencia. Sin entrar en detalles técnicos, que se pueden encontrar en [14] el teorema afirma que si el operador de transferencia cumple una serie de condiciones, su máximo autovalor es analítico en la temperatura, prohibiendo así la transición de fase en el límite termodinámico. Dado que los resultados numéricos de [39] apuntan muy seriamente a un cruce de autovalores (y por tanto a una pérdida de analiticidad) en el modelo de Peyrard-Bishop, está claro que éste debe incumplir también alguna de las hipótesis de este teorema más general. Llegamos así a un problema abierto de gran interés, que necesita un estudio en profundidad que lo resuelva de manera definitiva.

La demostración de este teorema general y el estudio de los ejemplos en [14] nos permiten volver sobre los problemas numéricos que aparecen al discretizar el operador de transferencia, que mencionamos en la Sección anterior. Una de las hipótesis del teorema general es que el operador sea irreducible, por lo que al discretizarlo y transformarlo en una matriz debe dar una matriz irreducible. Si esto se hace correctamente, como el núcleo del operador siempre será una exponencial, dará una matriz de elementos positivos y por ende irreducible. Pero si discretizamos con poco cuidado, habrá elementos nulos, la matriz podrá ser reducible, y podrá dar lugar a transiciones de fase (cruces de autovalores) ya que no se le puede aplicar el teorema de Perron-Frobenius. Vemos pues que un trabajo numérico poco cuidadoso nos puede hacer ver transiciones de fase donde en realidad no puede haberlas.

7 Conclusión

En este artículo hemos revisado con cierto detalle la dinámica no lineal y la Mecánica Estadística del modelo de Peyrard-Bishop del ADN. Habiendo llegado hasta aquí, podemos concluir que el modelo de Peyrard-Bishop es un gran éxito: con dos ingredientes básicos, la interacción con vecinos próximos a lo largo de cada una de las dos cadenas y el potencial de Morse para la interacción entre bases de un par, reproducimos gran parte de la fenomenología del ADN. Así, hemos encontrado analíticamente soluciones de tipo *breather* que recuerdan tanto a las burbujas de desnaturalización como a las aperturas espontáneas. Tenemos otras soluciones analíticas que describen la separación entre una zona donde la doble cadena está cerrada y otra donde está abierta, análogo del proceso de replicación de la molécula. Hemos podido obtener resultados analíticos también sobre las propiedades térmicas de la molécula, conectados

con la transición de desnaturalización, que incluso nos han permitido apuntar alguna primera mejora del modelo. No sería razonable pedir más a un modelo tan extremadamente simplificado.

Está claro, efectivamente, que el modelo deja fuera prácticamente todo lo que sabemos sobre la molécula. Para empezar, deja fuera la geometría. Si quisiéramos incluirla, al menos la llamada estructura secundaria, que en el caso de la doble cadena es la configuración helicoidal, tendríamos que tener a nuestra disposición al menos dos grados de libertad por par de bases: habría que considerar la distancia entre bases como hasta ahora, pero también el ángulo que forma su enlace respecto a un cierto eje de referencia. Se han dado algunos pasos en esta dirección [5, 36], pero el problema se complica sobremanera desde el punto de vista analítico y no es mucho lo que se puede llegar a obtener.

Ir aún más allá de la doble hélice e intentar describir los distintos niveles superiores de plegamientos de la molécula (recordemos que en cada una de nuestras células tenemos 2 metros de ADN, luego debe estar bastante bien plegado) se antoja una tarea imposible. No hablaremos pues de incluir el ambiente en que se mueve la molécula en la célula, interaccionando con muchas otras moléculas distintas y, sobre todo, con el agua, que aprovecha cualquier oportunidad para colarse en el interior de la doble cadena.

Pero si algo verdaderamente significativo hemos olvidado en este trabajo ha sido que el ADN contiene la información genética y es, por tanto, un sistema no homogéneo. Todo lo que hemos estudiado sobre el modelo de Peyrard-Bishop ha sido bajo la hipótesis de que todos los pares de bases eran iguales; ciertamente, esto es así en muchas moléculas que se fabrican para propósitos específicos, pero de ninguna manera en nuestras células. Si quisiéramos tener en cuenta esta falta de homogeneidad, la complicación de los cálculos analíticos crecería muy rápidamente (esto ocurre no sólo en el caso del modelo de Peyrard-Bishop sino en general, para cualquier modelo no lineal [35]). De nuevo es poco lo que se puede hacer.

Hay algún resultado de tipo perturbativo en modelos más simplificados aún que el de Peyrard-Bishop, como es el caso del modelo de sine-Gordon, citado en la Sección 2.2, véase [11, 13], pero en la práctica no se puede hacer gran cosa, salvo evaluar expresiones numéricamente. Para colmo de males, los resultados no son alentadores en cuanto a la utilidad del modelo para describir la funcionalidad del ADN no homogéneo y el modelo de Peyrard-Bishop, que podría solventar las dificultades, se resiste al tratamiento analítico. Desde el punto de vista numérico, y más mecánico-estadístico que dinámico, sí se han producido algunas novedades relevantes recientemente, relativas a la utilización del modelo para identificar secuencias de bases con funciones específicas (como por ejemplo los promotores) [9], y a su capacidad para describir experimentos sobre secuencias con propiedades especiales [3]. Obviamente, todo esto anima a proseguir los esfuerzos analíticos.

Para concluir este trabajo, me parece apropiado un comentario general sobre la filosofía del modelado, que surge en cuanto se discuten los resultados que hemos venido resumiendo con investigadores cercanos al ADN, biólogos o genetistas, por ejemplo. El modelo de Peyrard-Bishop, desde ese punto de

vista, es, cuando menos, muy discutible. No tiene química, no tiene geometría, no tiene genética, no tiene ambiente celular, no tiene... ¿Cuál es entonces el interés de trabajar con este modelo? Creo que, respetando al máximo la opinión de esos otros investigadores, el modelo de Peyrard-Bishop aporta muchas cosas importantes. ¿Qué pretendíamos con él?

Como dijimos en la Introducción, queríamos entender los mecanismos responsables de los cambios conformacionales de la molécula de ADN, dados por movimientos de gran amplitud de las bases. Está claro que si un ordenador del futuro nos permitiera incluir todo lo que sabemos sobre la molécula en nuestro modelo, tendríamos una simulación perfecta de esos cambios. Pero, ¿habríamos aprendido algo? La respuesta ha de ser un rotundo no. Por el contrario, el modelo de Peyrard-Bishop sí nos enseña algo: sabemos ahora que el que los enlaces de hidrógeno entre los pares de bases pierdan su efectividad en cuanto las bases se separan un tanto y que el esqueleto de azúcar-fosfato haga que los pares de bases vecinos estén bastante unidos, es suficiente para observar los movimientos que nos interesan. Por supuesto, los detalles no son correctos. Las aperturas espontáneas no tendrán exactamente el mismo número de bases que nuestros *breathers*, y la replicación viene gobernada por la ADN-Polimerasa ligada a la zona donde se está abriendo la doble hélice. Pero sí tenemos una comprensión de la mecánica básica de la molécula, y, lo que es más importante, hemos podido ir más allá de la mera simulación numérica. Hemos obtenido unos resultados analíticos que facilitan la interpretación de las propiedades del modelo, a la vez que nos permiten, por su comparación con las simulaciones, confiar en éstas cuando no podemos tener expresiones analíticas. Consideraciones similares se aplican a toda la discusión sobre las transiciones de fase. Creo entonces que no es aventurado insistir en algo que ya he dicho: el modelo de Peyrard-Bishop es un éxito en tanto en cuanto consigue plenamente sus objetivos. Y, además, si por el camino nos hemos encontrado con matemática interesante, incluyendo ecuaciones difero-diferenciales y en derivadas parciales, teoría de operadores, problemas numéricos y análisis matricial, ¿qué más podemos pedir?

Agradecimientos

Agradezco a Renato Álvarez Nodarse la invitación a impartir las lecciones en las que se basa este trabajo, dentro del Curso de Verano sobre “Métodos matemáticos en Biología: un viaje de ida y vuelta”, celebrado en la Universidad Internacional de Andalucía en Baeza, en agosto de 2005. Durante dicho curso aprendí mucho sobre ADN con Antonio Marín y José L. Oliver, a los que también estoy muy agradecido. Por otro lado, la mayor parte de lo que sé sobre ADN lo debo a mi colaboración con Saúl Ares, Sara Cuenda y Niurka R. Quintero; gracias a todos ellos. Gracias también a José A. Cuesta, con el que trabajé en el problema de las transiciones de fase unidimensionales. Finalmente, un agradecimiento especial a Enrique Fernández Cara, por el interés que se ha tomado en este trabajo y por su paciencia con mis retrasos para escribirlo.

Este trabajo está financiado por los proyectos MOSAICO y NAN2004-9087-

C03-03, del Ministerio de Educación y Ciencia, y SIMUMAT de la Comunidad de Madrid.

Referencias

- [1] R. Álvarez-Nodarse. Modelos matemáticos en Biología: un viaje de ida y vuelta. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.* 35:73–112, 2006.
- [2] S. Ares, G. Kalosakas. Distribution of bubble lengths in DNA. *Nano Letters* 7:311–316, 2007.
- [3] S. Ares, N.K. Voulgarakis, K.O. Rasmussen, A.R. Bishop. Bubble nucleation and cooperativity in DNA melting. *Phys. Rev. Lett.* 94:035504 1–4, 2005.
- [4] O. Bang, M. Peyrard. Generation of high energy localized vibrational modes in nonlinear Klein-Gordon lattices. *Phys. Rev. E* 53:4143–4152, 1996.
- [5] M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard. Helicoidal model for DNA opening. *Phys. Lett. A* 253:358–369, 1999.
- [6] C. Bustamante, J. Marko, E. Siggia, B. Smith. Entropic elasticity of λ -phage DNA. *Science*, 265:1599–1600, 1994.
- [7] C. R. Calladine y H. R. Drew. *Understanding DNA: The Molecule and How it Works*. Academic Press, 1992.
- [8] A. Campa, A. Giansanti. Experimental tests of the Peyrard-Bishop model applied to the melting of very short DNA chains. *Phys. Rev. E* 58:3585–3588, 1998.
- [9] C. H. Choi, G. Kalosakas, K. O. Rasmussen, M. Hiromura, A. R. Bishop, A. Usheva. DNA dynamically directs its own transcription initiation. *Nuc. Acids Res.* 32:1584–1590, 2004.
- [10] J. E. Cohen. Mathematics is biology’s next microscope, only better; biology is mathematics’ next physics, only better. *PLoS Biol.* 2(12):e439, 2004.
- [11] S. Cuenda, A. Sánchez. Nonlinear excitations in DNA: Aperiodic models vs actual genome sequences. *Phys. Rev. E* 70:51903 1–8, 2004.
- [12] S. Cuenda, A. Sánchez. On the discrete Peyrard-Bishop model of DNA: Stationary solutions and stability. *Chaos* 16:23123 1–8, 2006.
- [13] S. Cuenda, A. Sánchez, N. R. Quintero. Does the dynamics of sine-Gordon solitons predict active regions of DNA? *Physica D* **223**, 214–221, 2006.
- [14] J. A. Cuesta, A. Sánchez. General non-existence theorem for phase transitions in one-dimensional systems with short-range interactions, and physical examples of such transitions. *J. Stat. Phys.* 115:869-893, 2004.

- [15] T. Dauxois, M. Peyrard, A. R. Bishop. Entropy-driven DNA denaturation. *Phys. Rev. A* 47:R44–R47, 1993.
- [16] T. Dauxois, N. Theodorakopoulos, M. Peyrard. Modulational instability: First step toward energy localization in nonlinear lattices. *Nonlinearity* 10:617–630, 1997.
- [17] E. Díez, A. Sánchez, F. Domínguez-Adame. Conjetura que algo queda: el “teorema” de localización de Anderson. *Rev. Esp. Fís.* 13 (4):23-26, 1999.
- [18] S. W. Englander, N. R. Kallenbach, A. J. Heeger, J. A. Krumhansl, A. Litwin. Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 77:7222-7226, 1980.
- [19] M. Frank-Kamenenskii. Physicists retreat again. *Nature* 328:108, 1987.
- [20] G. Gaeta. Results and limitations of the soliton theory of DNA transcription. *J. Biol. Phys.* 24:81–96, 1999.
- [21] A. Galindo, P. Pascual. *Mecánica Cuántica*. Alhambra, 1978.
- [22] J. García-Ojalvo, J. M. Sancho. *Noise in Spatially Extended Systems*. Springer-Verlag, 1999.
- [23] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods, 2nd Edition*. Springer-Verlag, 1995.
- [24] G. L. Lamb. *Elements of Soliton Theory*. Wiley-Interscience, 1980.
- [25] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Statistical Physics, Part 1*. Pergamon, 1980.
- [26] D. C. Mattis. *Statistical Mechanics Made Simple*. World Scientific, 2003.
- [27] R. M. May. Uses and abuses of mathematics in biology. *Science* 303:790–793, 2004.
- [28] A. Neumaier. Molecular modeling of proteins and mathematical prediction of protein structure. *SIAM Rev.* 39:407–460, 1997.
- [29] S. Nosé. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.* 81:511–519, 1984.
- [30] J. Ortín, J. M. Sancho. *Curso de Física Estadística*. Universitat de Barcelona, 2001.
- [31] M. Peyrard, A. R. Bishop. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Phys. Rev. Lett.* 62:2755–2758, 1989.
- [32] M. Remoissenet. Low amplitude breather and envelope solitons in quasi-one-dimensional systems. *Phys. Rev. B* 33:2386–2392, 1986.

- [33] J. Rubinstein. Sine-Gordon equation. *J. Math. Phys.* 11:258–266, 1970.
- [34] M. Salerno. Discrete model for DNA dynamics. *Phys. Rev. A* 44:5292–5297, 1991.
- [35] A. Sánchez, L. Vázquez. Nonlinear wave propagation in disordered media. *Int. J. Mod. Phys. B* 5:2825–2882, 1991.
- [36] B. Sánchez-Rey, J. F. R. Archilla, F. Palmero, F. Romero. Breathers in a system with helicity and dipole interaction. *Phys. Rev. E* 66:017601 1–4, 2002.
- [37] T. Schlick. *Molecular Modeling and Simulation*, pp. 435–438. Springer, 2002.
- [38] A. C. Scott, ed. *Encyclopedia of Nonlinear Science*. Routledge, 2005.
- [39] N. Theodorakopoulos. Thermodynamic instabilities in one-dimensional particle lattices: a finite size scaling approach. *Phys. Rev. E* 68:026109 1–4, 2003.
- [40] N. Theodorakopoulos, M. Peyrard, R. S. MacKay. Nonlinear structures and thermodynamic instabilities in a one-dimensional lattice system. *Phys. Rev. Lett.* 93:258101 1–4, 2004.
- [41] L. van Hove. Sur l'intégrale de configuration pour les systèmes de particules à une dimension. *Physica* 16:137–143, 1950.
- [42] L. V. Yakushevich. *Nonlinear Physics of DNA*. 2nd edition, Wiley, 2004.

UNA GENERALIZACIÓN DEL TEOREMA DE LIONS-TARTAR

JACQUES SIMON

CNRS (UMR 6620), France

Jacques.Simon@math.univ-bpclermont.fr

Resumen

Generalizamos el teorema de Lions-Tartar, que es análogo al teorema de Lax-Milgram para las ecuaciones de evolución, para una forma bilineal que es L^2 respecto del tiempo, en lugar de L^∞ .

Palabras clave: *Ecuaciones en derivadas parciales de tipo parabólico, ecuación del calor, teorema de Lions-Tartar.*

Clasificación por materias AMS: *35D05 35K05 35K15 35K20*

Introducción

El teorema de Lions-Tartar, que es análogo al teorema de Lax-Milgram para ecuaciones de evolución, da la existencia de una solución de la ecuación parabólica asociada a una forma bilineal elíptica. Es sorprendente que, en lugar de utilizarlo, innumerables trabajos rehacen la demostración en casos particulares, en general construyendo trabajosamente soluciones aproximadas por el método de Galerkin. El teorema de Lions-Tartar es también una etapa en la resolución rápida de ciertas ecuaciones no lineales por linealización y punto fijo, como veremos en un próximo artículo [10] sobre las ecuaciones de Navier-Stokes.

Aquí recordamos el teorema de Lions-Tartar y presentamos una nueva generalización (teorema 2) para una forma bilineal que es sólo L^2 respecto al tiempo t (en lugar de L^∞), con una prueba por semi-discretización en t , basada en la construcción de soluciones aproximadas lineales a trozos obtenidas por el teorema de Lax-Milgram.

Damos enunciados precisos de todos los resultados utilizados y, en cada etapa, precisamos los argumentos, ya que decir “es bien conocido” puede esconder errores y los detalles se pueden volver espantosos para el que no encuentra el buen argumento. Nos perdonen los sabios estas *Matemáticas para niños* y se consuelen leyendo este detalle, que es de hecho un nuevo resultado (lema 15) :

Fecha de recepción: 12/12/2006. Aceptado (en forma revisada): 12/05/2007.

Toda sucesión que converge débilmente en $L^p(0, T; E)$ y está acotada en $L^\infty(0, T; E)$ tiene su límite en $L^\infty(0, T; E)$, siendo E cualquier espacio de Banach.

1 Resultados principales

El teorema de Lions-Tartar se enuncia así.

Teorema 1 Sean V y H dos espacios de Hilbert tales que

$$V \subseteq H, \quad V \text{ es denso en } H. \quad (1)$$

Sean $T > 0$ y

$$a \in L^\infty(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$$

tal que existen dos números reales $\alpha > 0$ y $\beta \geq 0$ tales que, para cada $v \in V$,

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2 - \beta \|v\|_H^2. \quad (2)$$

Sean finalmente

$$f_1 \in L^2(0, T; V'), \quad f_2 \in L^1(0, T; H'), \quad (3)$$

$$u_0 \in H. \quad (4)$$

Entonces existe una única solución u de

$$\begin{cases} u \in L^2(0, T; V) \cap \mathcal{C}([0, T]; H), \\ \frac{d}{dt}(u, v)_H + a(u, v) = \langle f_1, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, v \rangle_{H' \times H}, \quad \forall v \in V, \\ u(0) = u_0. \quad \square \end{cases} \quad (5)$$

J.-L. LIONS [4] probó el resultado para $f_2 = 0$ y L. TARTAR [11] lo extendió introduciendo f_2 . Extendamos a continuación la existencia, pero no la unicidad, para una forma a que sólo es L^2 respecto al tiempo.

Teorema 2 Sean V y H dos espacios de Hilbert que verifican (1), $T > 0$,

$$a \in L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V)) \quad (6)$$

verificando (2) con $\alpha > 0$ y $\beta \geq 0$ y f_1, f_2 y u_0 verificando (3) y (4). Entonces existe al menos una solución u de

$$\begin{cases} u \in L^2(0, T; V) \cap L^\infty(0, T; H) \cap \mathcal{C}([0, T]; H\text{-débil}), \\ \frac{d}{dt}(u, v)_H + a(u, v) = \langle f_1, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, v \rangle_{H' \times H}, \quad \forall v \in V, \\ u(0) = u_0. \quad \square \end{cases} \quad (7)$$

Lions y Tartar probaron el teorema 1 con el método de Galerkin, construyendo una solución aproximada u_n con valores en el espacio generado por los n primeros vectores de una base de V ; véase [11]. En sus pruebas se supone que V es separable, pero esta hipótesis podría ser suprimida usando el filtrado creciente de los subespacios de dimensión finita de V , como hizo notar Lions.

En el presente artículo probamos el teorema 2 por semi-discretización temporal, construyendo una solución aproximada continua y afín a trozos respecto de t . De ello resulta el teorema 1, sin necesitar que V sea separable, usando un resultado de continuidad de Lions-Tartar (lema 16). Además de la existencia, tenemos las propiedades siguientes.

Proposición 3 *En las condiciones del teorema 2, tenemos :*

(a) *Existe una solución u de (7) que verifica*

$$\|u\|_{L^2(0,T;V)} \leq \lambda, \quad \|u\|_{L^\infty(0,T;H)} \leq \sqrt{\alpha}\lambda, \quad (8)$$

donde

$$\lambda = \frac{e^{\beta T}}{\sqrt{\alpha}} \left(2\|u_0\|_H^2 + \frac{2}{\sqrt{\alpha}} \|f_1\|_{L^2(0,T;V')}^2 + 4\|f_2\|_{L^1(0,T;H')}^2 \right)^{1/2}.$$

(b) *Para cualquier $u \in L^2(0,T;V)$, la ecuación variacional (7) es equivalente a la ecuación fuerte*

$$\frac{d\tilde{u}}{dt} + \tilde{a}u = f_1 + f_2, \quad (9)$$

donde $\tilde{\cdot}$ designa la isometría de $\mathcal{L}^2(V \times V)$ sobre $\mathcal{L}(V;V')$ (definida por (16)), \cdot designa la isometría de H sobre H' dada por el teorema de Riesz-Fréchet y H' se identifica a un subespacio de V' (por (18)).

(c) *En consecuencia, existe una solución de (7) que verifica*

$$\frac{d\dot{u}}{dt} \in L^1(0,T;V')$$

y la estimación

$$\left\| \frac{d\dot{u}}{dt} \right\|_{L^1(0,T;V')} \leq \lambda \|a\|_{L^2(0,T;\mathcal{L}(V \times V))} + T^{1/2} \|f_1\|_{L^2(0,T;V')} + \|f_2\|_{L^1(0,T;H')}. \quad \square$$

Con las hipótesis de Lions-Tartar, la solución tiene las propiedades siguientes.

Proposición 4 *La solución u que proporciona el teorema 1 verifica las propiedades enunciadas en la proposición 3 y, además,*

$$\frac{d\dot{u}}{dt} \in L^2(0,T;V') + L^1(0,T;H')$$

y la igualdad de energía

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|_H^2 + a(u, u) = \langle f_1, u \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, u \rangle_{H' \times H}. \quad \square$$

2 Espacios funcionales

Precisemos los elementos usados en los resultados que preceden.

Espacios de Lebesgue. Dados un espacio de Banach E y $1 \leq p < \infty$, el espacio $L^p([0, T]; E)$ es un completado separado de $\mathcal{C}([0, T]; E)$ para la norma $(\int_0^T \|f\|_E^p)^{1/p}$; véase por ejemplo [BOURBAKI, 1, def. 2 p. 129]. Está caracterizado (salvo un isomorfismo, como todo completado) por las propiedades siguientes :

$$\begin{aligned} L^p([0, T]; E) &\text{ es un espacio de Banach,} \\ \mathcal{C}([0, T]; E) &\text{ es denso en } L^p([0, T]; E). \end{aligned}$$

Por otra parte, resulta de [1, def. 2, p. 206] que, para $p = \infty$, podemos tomar como definición

$$L^\infty([0, T]; E) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ f \in L^1([0, T]; E) : \exists (f_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{C}([0, T]; E), \right. \\ \left. \sup_{n \in \mathbb{N}, 0 \leq t \leq T} \|f_n(t)\|_E < \infty, f_n \rightarrow f \text{ en } L^1([0, T]; E) \right\} \quad (10)$$

con

$$\|f\|_{L^\infty([0, T]; E)} \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\{(f_n)_{n \in \mathbb{N}}\}} \left(\sup_{n \in \mathbb{N}, 0 \leq t \leq T} \|f_n(t)\|_E \right). \quad (11)$$

A su vez, $L^\infty([0, T]; E)$ es un espacio de Banach [1, prop. 2 p. 206].

Otra construcción, como espacio de funciones medibles, se realiza en [Edwards, 3, p. 587]. En adelante, no precisamos si el intervalo temporal de definición es o no abierto, puesto que $L^p([0, T]; E)$ es isomorfo (por la aplicación restricción) a $L^p([0, T]; E)$.

Los espacios L^p decrecen cuando p crece [1, cor. p. 215], en particular

$$L^\infty(0, T; E) \subseteq L^p(0, T; E) \subseteq L^1(0, T; E). \quad (12)$$

La integral \int_r^s para $0 \leq r \leq s \leq T$ está definida de $L^1(0, T; E)$ en E por prolongación continua de la integral de funciones continuas [1, def. 1 p. 140].

Espacios de aplicaciones. Dados dos espacios normados E y F , denotamos $\mathcal{L}(E; F)$ el espacio normado de las aplicaciones lineales continuas de E en F , con la norma

$$\|L\|_{\mathcal{L}(E; F)} \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{v \in E, v \neq 0} \frac{\|Lv\|_F}{\|v\|_E}.$$

Denotamos E' el dual de E , es decir, el espacio $\mathcal{L}(E; \mathbb{R})$ con la norma

$$\|w\|_{E'} \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{v \in E, v \neq 0} \frac{|\langle w, v \rangle|}{\|v\|_E}.$$

Dados tres espacios normados E_1 , E_2 y F , denotamos $\mathcal{L}^2(E_1 \times E_2; F)$ el espacio normado de las aplicaciones bilineales continuas de $E_1 \times E_2$ en \mathbb{R} , con la norma

$$\|T\|_{\mathcal{L}^2(E_1 \times E_2; F)} \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{v_1 \in E_1, v_2 \in E_2, v_1 \neq 0, v_2 \neq 0} \frac{|T(v_1, v_2)|}{\|v_1\|_{E_1} \|v_2\|_{E_2}}.$$

Cuando no es precisado, el espacio de valores es \mathbb{R} — por ejemplo $\mathcal{L}(E)$ designa $\mathcal{L}(E; \mathbb{R})$ — y el mismo convenio será aceptado para los espacios de funciones o distribuciones.

Los espacios E' y $\mathcal{L}^2(E_1 \times E_2)$ son de Banach y, más generalmente, $\mathcal{L}(E; F)$ y $\mathcal{L}^2(E_1 \times E_2; F)$ lo son si F lo es.

Imágenes en espacios de Lebesgue. Dados dos espacios de Banach E y F , $L \in \mathcal{L}(E; F)$ y $1 \leq p \leq \infty$, la imagen por L está definida de $L^p(0, T; E)$ en $L^p(0, T; F)$ por prolongación continua de la imagen de funciones continuas. Para cada $f \in L^p(0, T; E)$, se tiene

$$\|Lf\|_{L^p(0, T; F)} \leq \|L\|_{\mathcal{L}(E; F)} \|f\|_{L^p(0, T; E)}. \quad (13)$$

Dados tres espacios de Banach E_1 , E_2 y F , $T \in \mathcal{L}^2(E_1 \times E_2; F)$ y tres exponentes $1 \leq p_1 \leq \infty$, $1 \leq p_2 \leq \infty$ y $1 \leq p \leq \infty$ tales que

$$\frac{1}{p} = \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2},$$

la aplicación $(f_1, f_2) \mapsto T(f_1, f_2)$ está definida de $L^{p_1}(0, T; E_1) \times L^{p_2}(0, T; E_2)$ en $L^p(0, T; F)$ por prolongación continua de la imagen de funciones continuas, gracias a la desigualdad de Hölder. Para cada $f_1 \in L^{p_1}(0, T; E_1)$ y cada $f_2 \in L^{p_2}(0, T; E_2)$,

$$\|T(f_1, f_2)\|_{L^p(0, T; F)} \leq \|T\|_{\mathcal{L}^2(E_1 \times E_2; F)} \|f_1\|_{L^{p_1}(0, T; E_1)} \|f_2\|_{L^{p_2}(0, T; E_2)}. \quad (14)$$

Por ejemplo, en (5) y (7), $\langle f_1, v \rangle_{V' \times V} \in L^2(0, T)$, puesto que es la imagen de $f_1 \in L^2(0, T; V')$ por $\langle \cdot, v \rangle_{V' \times V} \in \mathcal{L}(V')$.

Y $a(u, v) \in L^1(0, T)$ es la imagen de $a \in L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$ y $u \in L^2(0, T; V)$ por $(a, u) \mapsto a(u, v)$ que pertenece a $\mathcal{L}^2(\mathcal{L}^2(V \times V) \times V)$.

Aplicaciones usadas en las proposiciones 3 y 4. La aplicación \cdot está definida de H en H' , para cada w y v en H , por

$$\langle \dot{w}, v \rangle_{H' \times H} \stackrel{\text{def}}{=} (w, v)_H. \quad (15)$$

La aplicación \sim está definida de $\mathcal{L}^2(V \times V)$ en $\mathcal{L}(V; V')$, para cada w y v en V , por

$$\langle \tilde{a}w, v \rangle_{V' \times V} \stackrel{\text{def}}{=} a(w, v). \quad (16)$$

Es una isometría, puesto que es biyectiva y además

$$\|\tilde{a}\|_{\mathcal{L}(V; V')} = \sup_{v \in V, v \neq 0} \frac{\|\tilde{a}v\|_{V'}}{\|v\|_V} = \sup_{\substack{v \in V, v \neq 0 \\ w \in V, w \neq 0}} \frac{|a(v, w)|}{\|v\|_V \|w\|_V} = \|a\|_{\mathcal{L}^2(V \times V)}.$$

Dada $q \in H'$, definimos $\bar{q} \in V'$, para cada $v \in V$, por

$$\langle \bar{q}, v \rangle_{V' \times V} \stackrel{\text{def}}{=} \langle q, v \rangle_{H' \times H}. \quad (17)$$

Debido a (1), $\bar{\cdot}$ es inyectiva y continua. Por tanto, identificando q con \bar{q} (lo que hacemos de ahora en adelante), obtenemos

$$H' \subseteq V'. \quad (18)$$

Denotamos \subseteq una inclusión con identidad continua y \equiv una igualdad con identidad bicontinua. (Teniendo en cuenta (1) y (18), si además identificáramos H con H' por la isometría $\bar{\cdot}$, resultaría $V \subseteq H \equiv H' \subseteq V'$.)

Distribuciones con valores vectoriales. La derivada $d\bar{u}/dt$ que aparece en (9) posee el sentido de las distribuciones con valores vectoriales. Demos a continuación la definición rigurosa.

Denotamos

$$\mathcal{D}(0, T) \stackrel{\text{def}}{=} \{\varphi \in \mathcal{C}^\infty(]0, T[) : \text{soporte } \varphi \subset]0, T[\},$$

con las semi-normas siguientes, indexadas por las funciones q continuas y positivas en $]0, T[$,

$$\|\varphi\|_{\mathcal{D}(0, T); q} \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{0 < t < T} \left(\sup_{0 \leq m \leq q(t)} q(t) \left| \frac{d^m \varphi}{dt^m}(t) \right| \right).$$

(Estas semi-normas definen la topología usual de $\mathcal{D}(0, T)$; en efecto forman una familia equivalente al sistema fundamental de semi-normas dado en [SCHWARTZ, 7, chap. III 1, p. 65].)

Dado un espacio de Banach E , $\mathcal{L}(\mathcal{D}(0, T); E)$ denota el espacio vectorial de las aplicaciones lineales continuas de $\mathcal{D}(0, T)$ en E . En lo sucesivo, ponemos

$$\mathcal{D}'(0, T; E) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}(\mathcal{D}(0, T); E),$$

con la topología de la convergencia puntual, esto es, la topología definida por las semi-normas

$$\|f\|_{\mathcal{D}'(0, T; E); \varphi} \stackrel{\text{def}}{=} \|\langle f, \varphi \rangle\|_E \quad (19)$$

indexadas por $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$. Esta topología es muy *simple*: $f_n \rightarrow f$ significa que

$$\langle f_n, \varphi \rangle \rightarrow \langle f, \varphi \rangle \text{ en } E \text{ para cada } \varphi.$$

Pondremos $\mathcal{D}'(0, T; E)$ en lugar de $\mathcal{D}'(]0, T[; E)$ porque no hay ambigüedad, puesto que el dominio de definición de una distribución o de una función derivable es necesariamente abierto.

Dada $f \in L^p(0, T; E)$ con $1 \leq p \leq \infty$, definimos $\underline{f} \in \mathcal{D}'(0, T; E)$, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$, por

$$\langle \underline{f}, \varphi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^T f \varphi.$$

La aplicación $\underline{\cdot}$ es inyectiva y continua, puesto que (por (19) y la desigualdad de Hölder), para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$,

$$\|\underline{f}\|_{\mathcal{D}'(0, T; E); \varphi} \leq \|f\|_{L^p(0, T; E)} \|\varphi\|_{L^{p'}(0, T)}.$$

Así, identificando f con \underline{f} (lo que hacemos en adelante), obtenemos

$$\mathcal{C}(]0, T[; E) \subseteq L^p(0, T; E) \subseteq \mathcal{D}'(0, T; E).$$

Derivada e imagen de distribuciones. Dada $f \in \mathcal{D}'(0, T; E)$, su derivada $df/dt \in \mathcal{D}'(0, T; E)$ está definida, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$, por

$$\left\langle \frac{df}{dt}, \varphi \right\rangle \stackrel{\text{def}}{=} - \left\langle f, \frac{d\varphi}{dt} \right\rangle. \quad (20)$$

La derivación es continua, ya que $\|df/dt\|_{\mathcal{D}'(0, T; E); \varphi} = \|f\|_{\mathcal{D}'(0, T; E); d\varphi/dt}$.

Dados otro espacio de Banach F y un aplicación $L \in \mathcal{L}(E; F)$, la imagen $Lf \in \mathcal{D}'(0, T; F)$ está definida, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$, por

$$\langle Lf, \varphi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} L(\langle f, \varphi \rangle). \quad (21)$$

Esta aplicación es continua de $\mathcal{D}'(0, T; E)$ en $\mathcal{D}'(0, T; F)$ puesto que, con (19), resulta que, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$,

$$\|Lf\|_{\mathcal{D}'(0, T; F); \varphi} \leq \|L\|_{\mathcal{L}(E; F)} \|f\|_{\mathcal{D}'(0, T; E); \varphi}. \quad (22)$$

Obviamente,

$$\frac{d(Lf)}{dt} = L\left(\frac{df}{dt}\right). \quad (23)$$

Cuando f es continuamente diferenciable o continua, encontramos la derivada y la imagen usuales, y encontramos las imágenes en los espacios L^p definidas más arriba.

3 Topologías débiles y espacios semi-normados separados

Un espacio *semi-normado separado* es un espacio vectorial con una topología separada definida por semi-normas. Por ejemplo, $\mathcal{D}(0, T)$ y $\mathcal{D}'(0, T; E)$ son semi-normados separados. De hecho, todo espacio vectorial topológico localmente convexo es semi-normado [NEUMANN, 6, thm. 26, p. 19].

Dado un espacio vectorial normado o, más generalmente, semi-normado separado E , su topología débil está definida por las siguientes semi-normas, indexadas por $e' \in E'$:

$$\|e\|_{E\text{-débil}; e'} \stackrel{\text{def}}{=} |\langle e', e \rangle|. \quad (24)$$

Denotamos E -débil el espacio E con estas semi-normas; es semi-normado separado (debido al teorema de Hahn-Banach) y

$$E \subseteq E\text{-débil} \quad (25)$$

(la inyección es continua porque $e \mapsto |\langle e', e \rangle|$ es continua para cada $e' \in E'$).

Cuando E es un espacio de Hilbert, su topología débil también es la generada por las siguientes semi-normas, indexadas por $v \in E$,

$$\|e\|_{E\text{-débil}; e} \stackrel{\text{def}}{=} |(e, v)_E|$$

puesto que, por el teorema de Riesz-Fréchet, E es isomorfo a E' por la aplicación $v \mapsto (\cdot, v)_E$.

Conseguiremos (en (44)) una solución u de (7) que es límite de soluciones aproximadas u_n gracias al resultado siguiente.

Lema 5 *En un espacio de Hilbert, toda sucesión acotada posee subsucesiones débilmente convergentes. \square*

Demos una prueba elemental que es válida incluso en el caso no separable (usaremos el lema en este caso, puesto que V no es necesariamente separable en (44)).

Demostración. Sea $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión acotada en un espacio de Hilbert E . Entonces, $|(u_n, v)_E| \leq c\|v\|_E$ para todo n y todo $v \in E$.

Si E es separable, sea $(v_i)_{i \in \mathbb{N}}$ una sucesión densa en E ; para cada i , se extrae una subsucesión tal que $(u_{ni}, v_i)_E$ converge (en \mathbb{R}); extrayendo subsucesiones sucesivas, la subsucesión diagonal $(u_{nn}, v_i)_E$ tiene un límite $\ell(v_i)$ para cada i . Los límites $\ell(v_i)$ verifican $|\ell(v_i)| \leq c\|v_i\|_E$ y, por tanto, ℓ posee una extensión lineal a todo E (de nuevo denotada ℓ) tal que $|\ell(v)| \leq c\|v\|_E$ para cada $v \in E$. Además $(u_{nn}, v)_E \rightarrow \ell(v)$. Por el teorema de Riesz-Fréchet, existe $u \in E$ tal que para todo $v \in E$ $\ell(v) = (u, v)_E$. Entonces $u_{nn} \rightarrow u$ en E -débil.

Cuando E no es separable, se considera la adherencia V del subespacio vectorial generado por las u_n . Es un espacio de Hilbert separable. Luego una subsucesión de $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en V -débil y por tanto en E -débil. \square

Usaremos la acotación siguiente de la norma de un límite débil (véase por ejemplo [2, prop. III.5 (iii) p. 35], donde está enunciado el resultado para un espacio de Banach, aunque la demostración [p. 36 y cor. I.4 p. 4] es válida en todo espacio normado).

Lema 6 *Sean E un espacio normado, $(u_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset E$ y $c \in \mathbb{R}$ tales que*

$$\begin{aligned} \|u_n\|_E &\leq c, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \\ u_n &\rightarrow u \text{ en } E\text{-débil.} \end{aligned}$$

Entonces

$$\|u\|_E \leq c. \quad \square$$

Toda aplicación lineal continua es *débilmente continua*, esto es, continua en los espacios débiles correspondientes. Probemos esta afirmación, para mostrar que este resultado es elemental incluso para espacios no normados (como en la prueba de (47), en donde tomaremos $F = \mathcal{D}'(0, T)$).

Lema 7 *Sean E y F dos espacios semi-normados separados y L una aplicación lineal continua de E en F . Entonces, L es continua de E -débil en F -débil. \square*

Demostración. Dada $f' \in F'$, tenemos $f' \circ L \in E'$ (puesto que es lineal continua). Entonces, para cada $e \in E$,

$$\|Le\|_{F\text{-débil}; f'} = |\langle f', Le \rangle| = |\langle f' \circ L, e \rangle| = \|e\|_{E\text{-débil}; f' \circ L}$$

lo que implica que L es continua de E -débil en F -débil. \square

Este lema, aplicado a la identidad, conduce a la propiedad siguiente.

Corolario 8 Sean E y F dos espacios semi-normados separados tales que $E \subseteq F$. Entonces

$$E\text{-débil} \subseteq F\text{-débil}. \quad \square$$

Utilizaremos (para probar (45)) el resultado secuencial análogo siguiente para una aplicación bilineal.

Lema 9 Sean E_1, E_2 y F tres espacios normados, T una aplicación bilineal continua de $E_1 \times E_2$ en F , $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ acotada en E_1 , $(b_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset E_2$, $a \in E_1$ y $b \in E_2$. Entonces

$$a_n \rightarrow a \text{ en } E_1\text{-débil}, b_n \rightarrow b \text{ en } E_2 \Rightarrow T(a_n, b_n) \rightarrow T(a, b) \text{ en } F\text{-débil}. \quad \square$$

Demostración. Supongamos $a_n \rightarrow a$ en E_1 -débil y $b_n \rightarrow b$ en E_2 y pongamos

$$T(a_n, b_n) - T(a, b) = T(a_n, b_n - b) + T(a_n - a, b).$$

La aplicación parcial $T(\cdot, b)$, siendo lineal continua de E_1 en F , es débilmente continua (lema 7), de donde $T(a_n - a, b) \rightarrow 0$ en F -débil.

Por otra parte, siendo T bilineal continua, existe c tal que

$$\|T(a_n, b_n - b)\|_F \leq c \|a_n\|_{E_1} \|b_n - b\|_{E_2},$$

de donde $T(a_n, b_n - b) \rightarrow 0$ en F y por tanto en F -débil (por (25)). Esto prueba el resultado. \square

Observación. El lema 9 también es cierto en espacios semi-normados separados. \square

Mostremos que el recíproco de (25) vale para $\mathcal{D}'(0, T)$.

Lema 10 Tenemos

$$\mathcal{D}'(0, T) \equiv \mathcal{D}'(0, T)\text{-débil}. \quad \square$$

Demostración. Dada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$, la aplicación $\bar{\varphi} = \langle \cdot, \varphi \rangle$ pertenece a $(\mathcal{D}'(0, T))'$ (es lineal continua, puesto que $|\langle f, \varphi \rangle| = \|f\|_{\mathcal{D}'(0, T); \varphi}$). Para cada $f \in \mathcal{D}'(0, T)$,

$$\|f\|_{\mathcal{D}'(0, T); \varphi} = |\langle f, \varphi \rangle| = |\langle \bar{\varphi}, f \rangle_{(\mathcal{D}'(0, T))' \times \mathcal{D}'(0, T)}| = \|f\|_{\mathcal{D}'(0, T)\text{-débil}; \bar{\varphi}}$$

y esto implica que la identidad es continua de $\mathcal{D}'(0, T)$ -débil en $\mathcal{D}'(0, T)$. \square

Observaciones. 1) El lema 10 no se extiende al caso de distribuciones con valores en un espacio de Banach E de dimensión infinita. En este caso, $\mathcal{D}'(0, T; E)$ -débil $\not\subseteq \mathcal{D}'(0, T; E)$.

2) La topología de $\mathcal{D}'(0, T; E)$ generada por (19), que será la que usemos, es intermedia entre la topología de Schwartz de la convergencia compacta [SCHWARTZ, 8, p. 50] y la topología débil asociada a ésta. Para $\mathcal{D}'(0, T)$, coincide con la topología débil de Schwartz (además de coincidir con la topología débil determinada por ella misma, según el lema 10). \square

Usaremos (para (52)) la propiedad de convergencia siguiente.

Lema 11 Sean $1 \leq p \leq \infty$ y $f_n \in W^{1,p}(0, T)$ tales que, cuando $n \rightarrow \infty$,

$$f_n \rightarrow f \text{ y } \frac{df_n}{dt} \rightarrow \frac{df}{dt} \text{ en } L^p(0, T)\text{-débil.}$$

Entonces

$$f_n \rightarrow f \text{ en } W^{1,p}(0, T)\text{-débil. } \square$$

Demostración. Sea

$$X = \left\{ (f, g) \in (L^p(0, T))^2 : g = \frac{df}{dt} \right\}$$

con la topología normada de $(L^p(0, T))^2$. Entonces la aplicación lineal $(f, g) \mapsto f$ es débilmente continua de X en $W^{1,p}(0, T)$ por el lema 7, ya que es continua. \square

4 Propiedades de aproximación en espacios de Lebesgue

Utilizaremos las aproximaciones constantes a trozos siguientes.

Lema 12 Sean E un espacio de Banach, $T > 0$, $1 \leq p < \infty$, $f \in L^p(0, T; E)$ y $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 1$. Sea f_n la distribución en $]0, T[$ constante a trozos de amplitud $\delta = T/n$ que toma los valores

$$f_n^i = \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} f$$

en los intervalos $]t_{i-1}, t_i[$ para $i = 1, 2, \dots, n$, con $t_i = i\delta$. Entonces

$$\|f_n\|_{L^p(0, T; E)} \leq \|f\|_{L^p(0, T; E)},$$

$f_n \rightarrow f$ en $L^p(0, T; E)$ cuando $n \rightarrow \infty$. \square

Demostración. La desigualdad de Hölder, con $1/p + 1/p' = 1$, implica

$$\|f_n^i\|_E \leq \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \|f\|_E \leq \frac{1}{\delta} \left(\int_{t_{i-1}}^{t_i} 1^{p'} \right)^{1/p'} \left(\int_{t_{i-1}}^{t_i} \|f\|_E^p \right)^{1/p},$$

de donde

$$\|f_n^i\|_E^p \leq \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} \|f\|_E^p.$$

Entonces

$$\|f_n\|_{L^p(0,T;E)} = \left(\sum_{i=1}^n \delta \|f_n^i\|_E^p \right)^{1/p} \leq \left(\sum_{i=1}^n \int_{t_{i-1}}^{t_i} \|f\|_E^p \right)^{1/p} = \|f\|_{L^p(0,T;E)}.$$

Por otra parte, como $\mathcal{C}([0, T]; E)$ es denso en $L^p(0, T; E)$, dado $\epsilon > 0$, existe $h \in \mathcal{C}([0, T]; E)$ tal que $\|f - h\|_{L^p(0,T;E)} \leq \epsilon/3$. Descompongamos

$$f_n - f = (f - h)_n + h_n - h + h - f. \quad (26)$$

Como h es continua, $\|h_n - h\|_{L^p(0,T;E)} \leq \epsilon/3$ para n suficientemente grande. Además, $\|(f - h)_n\|_{L^p(0,T;E)} \leq \|f - h\|_{L^p(0,T;E)} \leq \epsilon/3$. Luego tenemos que $\|f_n - f\|_{L^p(0,T;E)} \leq \epsilon$ para n suficientemente grande.

Esto prueba que $f_n \rightarrow f$. \square

También utilizaremos (para el lema 15) las aproximaciones continuas y afines a trozos siguientes.

Lema 13 *En las condiciones del lema 12, con $f_n^0 = 0$, sea $S_n f$ la función afín a trozos en $]0, T[$ tal que, para $i = 0, 1, \dots, n$,*

$$S_n f(t_i) = f_n^i.$$

Entonces, cuando $n \rightarrow \infty$,

$$S_n f \rightarrow f \text{ en } L^p(0, T; E). \quad \square$$

Demostración. Esto se prueba razonando como en la demostración del lema 12, usando (26) con S_n en lugar de \cdot_n y la estimación $\|S_n(f - h)\|_{L^p(0,T;E)} \leq 2\|f - h\|_{L^p(0,T;E)}$ (en efecto, obsérvese que en $]t_{i-1}, t_i[$ se tiene $\|S_n f(t)\|_E \leq \|f_n^i\|_E + \|f_n^{i-1}\|_E$). \square

Utilizaremos (en las pruebas de los lemas 16 y 17) las aproximaciones por convolución siguientes.

Lema 14 *Sean E un espacio de Banach, $f \in \mathcal{D}'(0, T; E)$, $n \in \mathbb{N}$, ρ_n tal que*

$$\rho_n \in \mathcal{D}\left(\frac{1}{n}, \frac{2}{n}\right), \quad \int_{\mathbb{R}} \rho_n = 1,$$

y

$$R_n f(t) = \langle f, \tau_{-t} \rho_n \rangle, \quad t \in \left] -\frac{1}{n}, T - \frac{2}{n} \right[,$$

donde $\tau_{-t} \rho_n(s) = \rho_n(s - t)$. Entonces:

(a) $R_n f \in C^\infty(]-1/n, T - 2/n[; E)$ y verifica

$$\frac{d}{dt} R_n f = R_n \left(\frac{df}{dt} \right).$$

Además, dados otro espacio de Banach F y una aplicación lineal $L \in \mathcal{L}(E; F)$,

$$L(R_n f) = R_n(Lf).$$

(b) Si $f \in L^p(0, T; E)$, $1 \leq p < \infty$, $0 < b < T$ y $n \geq 2/(T - b)$, $n \rightarrow \infty$, entonces

$$R_n f \rightarrow f \text{ en } L^p(0, b; E).$$

Esta convergencia es cierta en $\mathcal{C}([0, b]; E)$ si $f \in \mathcal{C}([0, T]; E)$. \square

Demostración. (Idea) La regularidad de $R_n f$ resulta de que la aplicación $t \mapsto \tau_{-t} \rho_n$ es indefinidamente derivable de $]-1/n, T - 2/n[$ en $C^\infty(\mathbb{R})$, y por tanto en $\mathcal{D}(0, T)$. Las otras propiedades que aparecen en (a) resultan de (20) y (21).

La convergencia (b) se prueba como en el lema 12, usando (26) con R_n en lugar de \cdot_n ,

$$R_n f(t) = \int_{1/n}^{2/n} f(t+s) \rho_n(s) ds \quad (27)$$

y la estimación $\|R_n(f - h)\|_{L^p(0, T - 2/n; E)} \leq \|f - h\|_{L^p(0, T; E)}$. \square

La acotación (51) de u en H resultará de la propiedad siguiente, que es nueva.

Lema 15 Sean E un espacio de Banach, $T > 0$, $1 \leq p < \infty$, $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ y f tales que

$$\begin{aligned} f_n &\in L^\infty(0, T; E), \|f_n\|_{L^\infty(0, T; E)} \leq c, \\ f_n &\rightarrow f \text{ en } L^p(0, T; E)\text{-débil.} \end{aligned}$$

Entonces

$$f \in L^\infty(0, T; E), \|f\|_{L^\infty(0, T; E)} \leq c. \quad \square$$

Observación. Cuando E es reflexivo y separable, $L^\infty(0, T; E)$ es isomorfo al dual de $L^1(0, T; E')$ que es un Banach separable, luego las hipótesis del lema 15 implican

$$f_n \rightarrow f \text{ en } L^\infty(0, T; E)\text{-*débil,} \quad (28)$$

identificando $L^\infty(0, T; E)$ con el dual de $L^1(0, T; E')$. En efecto, por un teorema de Banach, cada sucesión acotada en el dual de un espacio de Banach separable tiene una subsucesión * débilmente convergente. \square

Demostración del lema 15. Las aproximaciones continuas y afines a trozos definidas en el lema 13 satisfacen, para cada $m \in \mathbb{N}$ y $0 \leq t \leq T$,

$$\|(S_m f_n)(t)\|_E \leq \|f_n\|_{L^\infty(0,T;E)} \leq c.$$

La aplicación $f \mapsto S_m f(t)$ es lineal y continua de $L^p(0, T; E)$ en E . Por tanto, es débilmente continua (lema 7), $S_m f_n(t) \rightarrow S_m f(t)$ en E -débil y (lema 6)

$$\|(S_m f)(t)\|_E \leq c.$$

Teniendo en cuenta las definiciones (10) y (11), obtenemos las propiedades enunciadas, puesto que $S_m f \in \mathcal{C}([0, T]; E)$ y $S_m f \rightarrow f$ en $L^1(0, T; E)$ (por el lema 13 y (12)). \square

5 Propiedades de continuidad

Con las hipótesis del teorema 1, la continuidad respecto de t resultará del resultado de Lions-Tartar siguiente.

Lema 16 Sean V y H dos espacios de Hilbert que verifican (1), $T > 0$ y

$$u \in L^2(0, T; V), \quad f_1 \in L^2(0, T; V'), \quad f_2 \in L^1(0, T; H') \quad (29)$$

tales que, para cada $v \in V$,

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H = \langle f_1, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, v \rangle_{H' \times H}. \quad (30)$$

Entonces (u posee una única extensión, de nuevo denotada u , tal que)

$$u \in \mathcal{C}([0, T]; H),$$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|_H^2 = \langle f_1, u \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, u \rangle_{H' \times H}. \quad (31)$$

\square

J.-L. LIONS [4] probó este resultado para $f_2 = 0$ y L. TARTAR [11, p. 63] lo extendió introduciendo f_2 . Daremos una prueba más abajo. Nótese que, gracias a (18), las hipótesis (29) y (30) pueden escribirse en la forma

$$u \in L^2(0, T; V), \quad \frac{d\dot{u}}{dt} \in L^2(0, T; V') + L^1(0, T; H').$$

El lema 16 no es suficiente para probar la continuidad de la solución proporcionada por el teorema 2 porque, siendo en este teorema $a \in L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$, sólo tenemos que $d\dot{u}/dt \in L^1(0, T; V')$. En este caso, la continuidad (débil) será consecuencia del lema de Lions-Magenes [5, lema 8.1, p. 297] siguiente.

Lema 17 Sean V y H dos espacios de Hilbert que verifican (1), $T > 0$ y

$$u \in L^\infty(0, T; H),$$

tal que, para cada $v \in V$,

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H \in L^1(0, T). \quad (32)$$

Entonces (u posee una única extensión tal que)

$$u \in \mathcal{C}([0, T]; H\text{-débil}). \quad \square$$

Observación. Este resultado es también cierto [5, lemma 8.1, p. 297] si $(u, v)_H \in \mathcal{C}([0, T])$ en lugar de (32). \square

Demostración del lema 16.

Una desigualdad. Cuando $u \in \mathcal{C}^1([0, T]; V)$, (30) implica

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\|_H^2 &\leq \frac{1}{T} \|u\|_{L^2(0, T; H)}^2 + 2\|f_1\|_{L^2(0, T; V')} \|u\|_{L^2(0, T; V)} \\ &\quad + 2\|f_2\|_{L^1(0, T; H')} \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\|_H. \end{aligned} \quad (33)$$

En efecto

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\|_H^2 \leq \frac{1}{T} \int_0^T \|u\|_H^2 + \int_0^T \left| \frac{d}{dt} \|u\|_H^2 \right|$$

(esto se se obtiene integrando la desigualdad $\|u(t)\|_H^2 \leq \|u(s)\|_H^2 + \int_0^T |(d/dt)\|u\|_H^2|$ respecto de s) y, por (30) con $v = u(t)$ en el tiempo t ,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|_H^2 = \langle f_1, u \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, u \rangle_{H' \times H}.$$

Luego obtenemos (33), acotando la norma $L^1(0, T)$ del segundo miembro con la desigualdad de Hölder.

Regularización. Sean

$$u_n = R_n u, \quad f_{1n} = R_n f_1, \quad f_{2n} = R_n f_2,$$

las funciones regularizadas definidas en $] -1/n, T - 2/n[$ por el lema 14. Esta regularización conmuta con la derivación y las aplicaciones lineales. Por tanto, de la igualdad (30) se deduce que

$$\left(\frac{du_n}{dt}, v \right)_H = \langle f_{1n}, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_{2n}, v \rangle_{H' \times H}. \quad (34)$$

Dados $0 < b < T$ y $n_0 > 2/(T - b)$, mostremos que $(u_n)_{n \geq n_0}$ es una sucesión de Cauchy en $\mathcal{C}([0, b]; H)$. De acuerdo con (34), $u_m - u_n$ verifica la ecuación (30)

en $]0, b[$ relativa a $f_{1m} - f_{1n}$ y $f_{2m} - f_{2n}$. Por tanto, usando (33), tenemos

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq b} \|u_m(t) - u_n(t)\|_H^2 &\leq \frac{1}{b} \|u_m - u_n\|_{L^2(0,b;H)}^2 \\ &\quad + 2 \|f_{1m} - f_{1n}\|_{L^2(0,b;V')} \|u_m - u_n\|_{L^2(0,b;V)} \\ &\quad + 2 \|f_{2m} - f_{2n}\|_{L^1(0,b;H')} \sup_{0 \leq t \leq b} \|u_m(t) - u_n(t)\|_H. \end{aligned}$$

Tenemos (por (29) y el lema 14 (b)) que, cuando $n \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} u_n &\rightarrow u \text{ en } L^2(0, b; V), \\ f_{1n} &\rightarrow f_1 \text{ en } L^2(0, b; V'), \quad f_{2n} \rightarrow f_2 \text{ en } L^1(0, b; H'). \end{aligned} \tag{35}$$

Luego, dado $\epsilon > 0$, existe $n_1 \geq n_0$ tal que, si $m \geq n \geq n_1$, $\|u_m - u_n\|_{L^2(0,b;V)} \leq \epsilon$, $\|f_{1m} - f_{1n}\|_{L^2(0,b;V')} \leq \epsilon$, $\|f_{2m} - f_{2n}\|_{L^1(0,b;H')} \leq \epsilon$ y, de igual forma, $\|u_m - u_n\|_{L^2(0,b;H)} \leq \sqrt{b}\epsilon$. Entonces

$$\sup_{0 \leq t \leq b} \|u_m(t) - u_n(t)\|_H^2 \leq 3\epsilon^2 + 2\epsilon \sup_{0 \leq t \leq b} \|u_m(t) - u_n(t)\|_H$$

y también

$$\sup_{0 \leq t \leq b} \|u_m(t) - u_n(t)\|_H \leq 3\epsilon.$$

Continuidad. Por tanto, la sucesión $(u_n)_{n \geq n_0}$ es de Cauchy en $\mathcal{C}([0, b]; H)$, que es un espacio de Banach ya que H lo es. Luego u_n tiene un límite que es u por (35) y

$$u \in \mathcal{C}([0, b]; H).$$

Elijiendo ρ_n con soporte en $[-2/n, -1/n]$ en lugar de $[1/n, 2/n]$, obtenemos del mismo modo $u \in \mathcal{C}([b, T]; H)$ y por tanto $u \in \mathcal{C}([0, T]; H)$.

Igualdad de energía. Tomando $v = u_n(t)$ en la ecuación (34) en el tiempo t , resulta

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_n\|_H^2 = \langle f_{1n}, u_n \rangle_{V' \times V} + \langle f_{2n}, u_n \rangle_{H' \times H}.$$

Se puede tomar límite en los dos primeros términos respectivamente en $\mathcal{D}'(0, b)$ y $L^1(0, b)$ por (35). También se puede tomar límite en el último término en $L^1(0, b)$, puesto que $u_n \rightarrow u$ en $\mathcal{C}([0, b]; H)$, gracias a la continuidad de u . Así, conseguimos (31) en cada intervalo $]0, b[$ y en consecuencia en todo el intervalo $]0, T[$. \square

Demostración del lema 17. Sea $u_n = R_n u$ la regularizada definida en $] -1/n, T - 2/n[$ por el lema 14. Dados $0 < b < T$ y $n_0 > 2/(T - b)$, mostremos que $(u_n)_{n \geq n_0}$ es una sucesión de Cauchy en $\mathcal{C}([0, b]; H\text{-débil})$, cuya topología está definida por las siguientes semi-normas, indexadas por $h \in H$,

$$\|f\|_{\mathcal{C}([0,b]; H\text{-débil}); h} \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{0 \leq t \leq b} |(f(t), h)_H|.$$

Dados $h \in H$ y $\epsilon > 0$, existe $v \in V$ (puesto que es denso en H) tal que

$$\|h - v\|_H \leq \epsilon.$$

Por otra parte, $\|u_n(t)\|_H \leq \|u\|_{L^\infty(0,T;H)}$ (por (27)) para $0 \leq t \leq b$. Por tanto

$$\begin{aligned} \|u_m - u_n\|_{\mathcal{C}([0,b];H\text{-débil});h} &= \sup_{0 \leq t \leq b} |(u_m(t) - u_n(t), v + (h - v))_H| \\ &\leq \sup_{0 \leq t \leq b} |(u_m(t), v)_H - (u_n(t), v)_H| \\ &\quad + 2\epsilon \|u\|_{L^\infty(0,T;H)}. \end{aligned}$$

Además $(u_n, v)_H = R_n((u, v)_H)$ (por el lema 14 (a)), $(u, v)_H \in \mathcal{C}([0, T])$ (por (32)) y $(u_n, v)_H \rightarrow (u, v)_H$ en $\mathcal{C}([0, b])$ (por el lema 14 (b)). Así, existe n_1 tal que, para $m \geq n \geq n_1$,

$$\sup_{0 \leq t \leq b} |(u_m(t), v)_H - (u_n(t), v)_H| \leq \epsilon$$

y en consecuencia

$$\|u_m - u_n\|_{\mathcal{C}([0,b];H\text{-débil});h} \leq \epsilon(1 + 2\|u\|_{L^\infty(0,T;H)}).$$

La sucesión $(u_n)_{n \geq n_0}$ es por tanto de Cauchy en $\mathcal{C}([0, b]; H\text{-débil})$, que es secuencialmente completo, ya que $H\text{-débil}$ lo es. Luego u_n posee un límite y éste es u , ya que u es su límite en $L^2(0, T; H)$, por el lema 14. Así,

$$u \in \mathcal{C}([0, b]; H\text{-débil}).$$

Eligiendo ρ_n con soporte en $[-2/n, -1/n]$ en lugar de $[1/n, 2/n]$, obtenemos del mismo modo la continuidad débil en $[b, T]$ y finalmente en todo $[0, T]$. \square

6 Prueba del teorema 2

Vamos a construir una solución aproximada u_n lineal a trozos en intervalos temporales de amplitud T/n . Después pasaremos al límite cuando $n \rightarrow \infty$.

Lo haremos en primer lugar suponiendo que $\beta = 0$ en (2). Después construiremos explícitamente una solución para cualquier β a partir de la anterior.

Ecuación discretizada. Por el momento, suponemos

$$\beta = 0.$$

Sean $n \in \mathbb{N}$, $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, $\delta = T/n$, $t_i = i\delta$, $t_0 = 0$ y

$$a_n^i = \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} a, \quad f_{1n}^i = \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} f_1, \quad f_{2n}^i = \frac{1}{\delta} \int_{t_{i-1}}^{t_i} f_2.$$

Dada $z_{i-1} \in H$, por el teorema de Lax-Milgram existe una única solución $z_i \in V$ de la ecuación *discretizada* siguiente : para cada $v \in V$,

$$\left(\frac{z_i - z_{i-1}}{\delta}, v \right)_H + a_n^i(z_i, v) = \langle f_{1n}^i, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_{2n}^i, v \rangle_{H' \times H}. \quad (36)$$

En efecto, la forma bilinear $a_n^i + \frac{1}{\delta}(\cdot, \cdot)_H$ sobre V es continua (por (1) y (6)) y es coerciva (por (2) con $\beta = 0$), y $f_{1n}^i + f_{2n}^i + \frac{1}{\delta}(z_{i-1}, \cdot)_H \in V'$ (por (3) y (18)).

Solución aproximada. De este modo, arrancando de $z_0 = u_0$ (en H), construimos por recurrencia una sucesión z_1, z_2, \dots, z_n en V . Denotando a_n, f_{1n}, f_{2n} y u_n las distribuciones constantes a trozos tales que

$$a_n = a_n^i, \quad f_{1n} = f_{1n}^i, \quad f_{2n} = f_{2n}^i, \quad u_n = z_i \quad \text{en }]t_{i-1}, t_i[$$

y denotando \widehat{u}_n la función continua y afín a trozos tal que, para cada i ,

$$\widehat{u}_n(t_i) = z_i,$$

las relaciones (36) conducen a la siguiente ecuación *aproximada* en $\mathcal{D}'(0, T)$: para cada $v \in V$,

$$\frac{d}{dt}(\widehat{u}_n, v)_H + a_n(u_n, v) = \langle f_{1n}, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_{2n}, v \rangle_{H' \times H}. \quad (37)$$

Estimaciones discretas. Tomando $v = z_i$ en (36), conseguimos (tras multiplicación por 2δ)

$$(z_i - z_{i-1}, z_i)_H + \delta a_n^i(z_i, z_i) = \delta \langle f_{1n}^i, z_i \rangle_{V' \times V} + \delta \langle f_{2n}^i, z_i \rangle_{H' \times H}.$$

Multiplicando por 2, teniendo en cuenta que

$$2(z_i - z_{i-1}, z_i)_H = \|z_i\|_H^2 - \|z_{i-1}\|_H^2 + \|z_i - z_{i-1}\|_H^2$$

y usando la coercividad ((2) con $\beta = 0$), resulta

$$\begin{aligned} \|z_i\|_H^2 - \|z_{i-1}\|_H^2 + \|z_i - z_{i-1}\|_H^2 + 2\delta\alpha \|z_i\|_V^2 & \\ & \leq 2\delta \langle f_{1n}^i, z_i \rangle_{V' \times V} + 2\delta \langle f_{2n}^i, z_i \rangle_{H' \times H} \\ & \leq \delta\alpha \|z_i\|_V^2 + \frac{\delta}{\alpha} \|f_{1n}^i\|_{V'}^2 + 2\delta \|f_{2n}^i\|_{H'} \|z_i\|_H. \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\|z_i\|_H^2 - \|z_{i-1}\|_H^2 + \|z_i - z_{i-1}\|_H^2 + \delta\alpha \|z_i\|_V^2 \leq \frac{\delta}{\alpha} \|f_{1n}^i\|_{V'}^2 + 2\delta \|f_{2n}^i\|_{H'} \|z_i\|_H.$$

Sumando de $i = 1$ a m para $m \leq n$ y teniendo en cuenta que $\sum_i \|f_{1n}^i\|_{H'} \|z_i\|_H \leq (\sum_i \|f_{1n}^i\|_{H'}) \max_i \|z_i\|_H$, obtenemos

$$\begin{aligned} \|z_m\|_H^2 + \sum_{i=1}^m \|z_i - z_{i-1}\|_H^2 + \delta\alpha \sum_{i=1}^m \|z_i\|_V^2 & \\ \leq \|u_0\|_H^2 + \frac{\delta}{\alpha} \sum_{i=1}^n \|f_{1n}^i\|_{V'}^2 + 2\delta \left(\sum_{i=1}^n \|f_{2n}^i\|_{H'} \right) \max_{1 \leq i \leq n} \|z_i\|_H & \\ \leq \|u_0\|_H^2 + \frac{\delta}{\alpha} \sum_{i=1}^n \|f_{1n}^i\|_{V'}^2 + 2 \left(\delta \sum_{i=1}^n \|f_{2n}^i\|_{H'} \right)^2 + \frac{1}{2} \max_{1 \leq i \leq n} \|z_i\|_H^2. & \end{aligned}$$

Debido al lema 12, $\delta \sum_i \|f_{1n}^i\|_{V'}^2 = \|f_{1n}\|_{L^2(0,T;V')}^2 \leq \|f_1\|_{L^2(0,T;V')}^2$ y $\delta \sum_{i=1}^n \|f_{2n}^i\|_{H'} = \|f_2\|_{L^1(0,T;H')}$, de donde

$$\|z_m\|_H^2 + \sum_{i=1}^m \|z_i - z_{i-1}\|_H^2 + \delta\alpha \sum_{i=1}^m \|z_i\|_V^2 \leq C + \frac{1}{2} \max_{1 \leq i \leq n} \|z_i\|_H^2 \quad (38)$$

con $C = \|u_0\|_H^2 + \alpha^{-1} \|f_1\|_{L^2(0,T;V')}^2 + 2\|f_2\|_{L^1(0,T;H')}^2$.

Esto es cierto para todo m y en particular para el índice m que verifica $\|z_m\|_H = \max_{1 \leq i \leq n} \|z_i\|_H$, de donde

$$\max_{1 \leq i \leq n} \|z_i\|_H \leq \sqrt{2C}. \quad (39)$$

Por tanto, tomando $m = n$ en (38), conseguimos

$$\sum_{i=1}^n \|z_i - z_{i-1}\|_H^2 + \delta\alpha \sum_{i=1}^n \|z_i\|_V^2 \leq 2C \quad (40)$$

Estimaciones de la solución aproximada. Las desigualdades (39) y (40) implican

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u_n(t)\|_H = \sup_{0 \leq t \leq T} \|\widehat{u}_n(t)\|_H \leq \sqrt{2C}, \quad (41)$$

$$\int_0^T \|u_n - \widehat{u}_n\|_H^2 \leq 2\delta C, \quad (42)$$

$$\int_0^T \|u_n\|_V^2 \leq \frac{2C}{\alpha}. \quad (43)$$

Paso al límite. Como $L^2(0, T; V)$ es un espacio de Hilbert, la desigualdad (43) implica (lema 5) la existencia de una subsucesión (de nuevo denotada $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$) y de un elemento $u \in L^2(0, T; V)$ tales que, cuando $n \rightarrow \infty$,

$$u_n \rightarrow u \quad \text{en } L^2(0, T; V)\text{-débil.} \quad (44)$$

Como (lema 12) $a_n \rightarrow a$ en $L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$, para cada $v \in V$, se tiene

$$a_n(u_n, v) \rightarrow a(u, v) \quad \text{en } L^1(0, T)\text{-débil} \quad (45)$$

(por el lema 9 para la aplicación $(a, u) \mapsto a(u, v)$ de $L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V)) \times L^2(0, T; V)$ en $L^1(0, T)$, que es continua debido a (14)).

Por otra parte, gracias a (42), tenemos

$$\widehat{u}_n - u_n \rightarrow 0 \quad \text{en } L^2(0, T; H). \quad (46)$$

Con (44), resulta que, para cada $v \in V$,

$$(\widehat{u}_n, v)_H \rightarrow (u, v)_H \quad \text{en } L^2(0, T)\text{-débil} \quad (47)$$

(en efecto $(\widehat{u}_n - u_n, v)_H \rightarrow 0$ en $L^2(0, T)$ por (46) y (22) con $L = (\cdot, v)_H$ que pertenece a $\mathcal{L}(V)$; y $(u_n - u, v)_H \rightarrow 0$ en $L^2(0, T)$ -débil por (44) ya que L es continua de $L^2(0, T; V)$ -débil en $L^2(0, T)$ -débil por el lema 7 y (13)).

Por el corolario 8 y el lema 10, $L^2(0, T)$ -débil $\subseteq \mathcal{D}'(0, T)$ -débil $\equiv \mathcal{D}'(0, T)$. Por tanto, a la vista de (47), para cada $v \in V$, $(\widehat{u}_n, v)_H \rightarrow (u, v)_H$ en $\mathcal{D}'(0, T)$ y también

$$\frac{d}{dt}(\widehat{u}_n, v)_H \rightarrow \frac{d}{dt}(u, v)_H \quad \text{en } \mathcal{D}'(0, T). \quad (48)$$

Por fin (lema 12),

$$f_{1n} \rightarrow f_1 \text{ en } L^2(0, T; V'), \quad f_{2n} \rightarrow f_2 \text{ en } L^1(0, T; H'). \quad (49)$$

Teniendo en cuenta (45), (48) y (49), la ecuación aproximada (37) da, en el límite, la ecuación anunciada, a saber: para cada $v \in V$,

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H + a(u, v) = \langle f_1, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, v \rangle_{H' \times H}. \quad (50)$$

Pertenencia de u a $L^\infty(0, T; H) \cap \mathcal{C}([0, T]; H)$ -débil. La sucesión $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ está acotada en $L^\infty(0, T; H)$ (por (42)) y converge en $L^2(0, T; H)$ -débil (por (44) y el corolario 8), de donde (lema 15)

$$u \in L^\infty(0, T; H). \quad (51)$$

(Si H es separable, esto resulta de igual forma de la convergencia $u_n \rightarrow u$ en $L^\infty(0, T; H)$ -*débil, debido a (28).)

Por otra parte, la ecuación exacta (50) da

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H \in L^1(0, T)$$

para cada v en V , que es denso en H . Con (51), el lema 17 de Lions-Magenes da

$$u \in \mathcal{C}([0, T]; H\text{-débil}).$$

Condición inicial. Sea $v \in V$. Entonces

$$\frac{d}{dt}(\widehat{u}_n, v)_H \rightarrow \frac{d}{dt}(u, v)_H \quad \text{en } L^1(0, T)\text{-débil},$$

puesto que converge en $\mathcal{D}'(0, T)$ (por (48)) y los otros términos en la ecuación aproximada (37) convergen en $L^1(0, T)$ -débil por (45) y (49). Además se tiene (47), de donde (lema 11)

$$(\widehat{u}_n, v)_H \rightarrow (u, v)_H \quad \text{en } W^{1,1}(0, T)\text{-débil}. \quad (52)$$

Como la aplicación $h \mapsto h(0)$ es un elemento del dual de $W^{1,1}(0, T)$ (es lineal continua de $W^{1,1}(0, T)$ en \mathbb{R} ya que $|h(0)| \leq (1/T) \int_0^T |h| + \int_0^T |dh/dt|$), por la definición (24) de la topología débil, (52) implica

$$(\widehat{u}_n, v)_H(0) \rightarrow (u(0), v)_H.$$

Como las funciones u y \widehat{u}_n son continuas en H -débil, resulta, con la condición inicial $\widehat{u}_n(0) = u_0$, que

$$(u(0), v)_H = (u_0, v)_H.$$

Esto es cierto para cada $v \in V$; luego también por continuidad para cada $v \in H$ y, finalmente,

$$u(0) = u_0.$$

El caso $\beta \neq 0$. La forma bilineal definida por $A(w, v) = \beta(w, v)_H + a(w, v)$ satisface la hipótesis de coercividad (2) con $\beta = 0$. Además $F_1 = e^{-\beta t} f_1$ y $F_2 = e^{-\beta t} f_2$ pertenecen respectivamente a $L^2(0, T; V')$ y $L^1(0, T; H')$. Entonces existe una solución U relativa a estos datos y sólo queda observar que

$$u = e^{\beta t} U \tag{53}$$

es solución, relativa a a , f_1 y f_2 . \square

7 Prueba del teorema 1

Ahora, $a \in L^\infty(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$.

Continuidad en H fuerte. La aplicación \sim definida por (16) es lineal y continua de $\mathcal{L}^2(V \times V)$ en $\mathcal{L}(V; V')$. Luego la imagen de a satisface

$$\tilde{a} \in L^\infty(0, T; \mathcal{L}(V; V')).$$

Con $u \in L^2(0, T; V)$, resulta que la imagen por la aplicación bilineal continua $(\tilde{a}, u) \mapsto \tilde{a}u$ de $\mathcal{L}(V; V') \times V$ en V' satisface

$$\tilde{a}u \in L^2(0, T; V') \tag{54}$$

y (por (16)), para cada $v \in V$,

$$a(u, v) = \langle \tilde{a}u, v \rangle_{V' \times V}.$$

Luego la ecuación variacional (50) se escribe

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H = \langle f_1 - \tilde{a}u, v \rangle_{V' \times V} + \langle f_2, v \rangle_{H' \times H}. \tag{55}$$

Entonces el lema 16 de Lions-Tartar implica

$$u \in \mathcal{C}([0, T]; H).$$

Unicidad. Sea u la diferencia de dos posibles soluciones u_1 et u_2 . Entonces u verifica la ecuación (55) con $f_1 = f_2 = 0$, de donde el lema 16 de Lions-Tartar nos dice (por (54)) que

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|_H^2 + \langle \tilde{a}u, u \rangle_{V' \times V} = 0.$$

Además

$$\langle \tilde{a}u, u \rangle_{V' \times V} = a(u, u) \geq \alpha \|u\|_V^2 - \beta \|u\|_H^2.$$

En efecto, esta desigualdad es consecuencia de la coercividad (2), aproximando u con distribuciones constantes a trozos por el lema 12 y pasando al límite.

Por tanto,

$$\frac{d}{dt} \|u\|_H^2 - 2\beta \|u\|_H^2 \leq 0. \quad (56)$$

Multiplicando por $e^{-2\beta t}$, esto da, en $L^1(0, T)$,

$$\frac{d}{dt} (e^{-2\beta t} \|u\|_H^2) \leq 0.$$

Integrando de 0 a t , obtenemos

$$e^{-2\beta t} \|u(t)\|_H^2 \leq \|u(0)\|_H^2.$$

Aquí $u(0) = 0$, de donde $u = 0$ y $u_2 = u_1$. \square

Observación. Para probar que dos posibles soluciones u_1 y u_2 coinciden, bastaría con que la diferencia $u = u_1 - u_2$ verificara $u \in \mathcal{C}([0, T]; H)$ y (56) para algún $\beta > 0$. \square

8 Pruebas de las proposiciones 3 y 4

Prueba de la proposición 3.

Ahora, $a \in L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V))$.

Estimaciones (8). Aquí, u es la solución que se ha construido en la prueba del teorema 2.

Cuando $\beta = 0$, la estimación en $L^2(0, T; V)$ resulta de la acotación (43) de u_n por la convergencia (44) (gracias al lema 6) y la estimación en $L^\infty(0, T; H)$ resulta de (41) gracias al lema 15. En el caso general, las estimaciones se deducen de (53).

Ecuación fuerte (9). En adelante, u es cualquier solución de la ecuación variacional (7). Mostremos primero que (7) puede escribirse, como la siguiente igualdad en $\mathcal{D}'(0, T)$ para cada $v \in V$:

$$\left\langle \frac{d\dot{u}}{dt} + \tilde{a}u - f_1 - f_2, v \right\rangle_{V' \times V} = 0. \quad (57)$$

En efecto, por una parte $\dot{u} \in L^\infty(0, T; V')$ (se trata de la imagen de $u \in L^\infty(0, T; H)$ por $\dot{\cdot}$, que es lineal continua de H en H' y por tanto en V') y, en $L^\infty(0, T)$, se da la igualdad

$$(u, v)_H = \langle \dot{u}, v \rangle_{H' \times H} = \langle \dot{u}, v \rangle_{V' \times V}$$

(puesto que las aplicaciones $w \mapsto (w, v)_H$ y $w \mapsto \langle \dot{w}, v \rangle_{V' \times V}$ coinciden de H en \mathbb{R} , por (15) y (17)). Luego $d\dot{u}/dt \in \mathcal{D}'(0, T; V')$ y

$$\frac{d}{dt}(u, v)_H = \frac{d}{dt} \langle \dot{u}, v \rangle_{V' \times V} = \left\langle \frac{d\dot{u}}{dt}, v \right\rangle_{V' \times V}$$

(puesto que la derivación de distribuciones conmuta con las aplicaciones lineales continuas, en este caso $\langle \cdot, v \rangle_{V' \times V}$, por (23)). Por otra parte, $\tilde{a}u \in L^1(0, T; V')$ (puesto que $\tilde{a} \in L^2(0, T; \mathcal{L}(V; V'))$ y $u \in L^2(0, T; V)$) y

$$a(u, v) = \langle \tilde{a}u, v \rangle_{V' \times V}.$$

Además, $\langle f_2, v \rangle_{H' \times H} = \langle f_2, v \rangle_{V' \times V}$ (por (17), con la identificación (18)). Luego, efectivamente, (7) es equivalente a (57).

Ahora, observemos que (57) significa (gracias a la definición (21) con $L = \langle \cdot, v \rangle_{V' \times V}$) que, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$,

$$\left\langle \left\langle \frac{d\dot{u}}{dt} + \tilde{a}u - f_1 - f_2, \varphi \right\rangle, v \right\rangle_{V' \times V} = 0.$$

Esto vale para cada $v \in V$. Luego tenemos en V' que

$$\left\langle \frac{d\dot{u}}{dt} + \tilde{a}u - f_1 - f_2, \varphi \right\rangle = 0.$$

Lo que prueba la ecuación fuerte (9), siendo φ una función “test” cualquiera.

Integrabilidad de la derivada. La ecuación (9) implica $d\dot{u}/dt \in L^1(0, T; V')$, puesto que f_1, f_2 y $\tilde{a}u$ pertenecen a este espacio. La acotación de la norma de $d\dot{u}/dt$ resulta también de (9), usando la desigualdad de Hölder

$$\|f_1\|_{L^1(0, T; V')} \leq T^{1/2} \|f_1\|_{L^2(0, T; V')}. \quad \square$$

Prueba de la proposición 4.

La propiedad $d\dot{u}/dt \in L^2(0, T; V') + L^1(0, T; H')$ resulta de la ecuación fuerte (9), debido a (54). Finalmente, la igualdad de energía es consecuencia inmediata del lema 16 (Lions-Tartar). \square

9 Resolución de una ecuación parabólica general

Como primera aplicación, demos propiedades de existencia y unicidad de solución de la ecuación parabólica asociada a un operador elíptico general.

Teorema 18 Sean V y H dos espacios de Hilbert que verifican (1), $T > 0$,

$$A \in L^2(0, T; \mathcal{L}(V; V'))$$

tal que existen dos números reales $\alpha > 0$ y $\beta \geq 0$ tales que, para cada $v \in V$,

$$\langle Av, v \rangle_{V' \times V} \geq \alpha \|v\|_V^2 - \beta \|v\|_H^2$$

y, finalmente,

$$\begin{aligned} f &\in L^2(0, T; V') + L^1(0, T; H'), \\ u_0 &\in H, \end{aligned}$$

donde H' se identifica a un subespacio de V' por (18). Entonces :

(a) Existe u tal que

$$\begin{aligned} u &\in L^2(0, T; V) \cap L^\infty(0, T; H) \cap \mathcal{C}([0, T]; H\text{-débil}), \\ \frac{d\dot{u}}{dt} &\in L^1(0, T; V'), \end{aligned}$$

solución de

$$\begin{aligned} \frac{d\dot{u}}{dt} + Au &= f, \\ u(0) &= u_0, \end{aligned}$$

donde \cdot es la isometría de H sobre H' dada por el teorema de Riesz-Fréchet.

(b) Si

$$A \in L^\infty(0, T; \mathcal{L}(V; V'))$$

(y en particular si A es independiente del tiempo), existe una única solución u de (a), y ésta satisface

$$\begin{aligned} u &\in \mathcal{C}([0, T]; H), \\ \frac{d\dot{u}}{dt} &\in L^2(0, T; V') + L^1(0, T; H'). \quad \square \end{aligned}$$

Demostración. La imagen a de A por la inversa de la isometría definida por (16) verifica

$$a \in L^2(0, T; \mathcal{L}^2(V \times V)).$$

Luego (a) resulta del teorema 2 y de la proposición 3 y (b) resulta del teorema 1 y de la proposición 4. \square

Observación. En las condiciones de (b), la aplicación $(f, u_0) \mapsto u$, que está bien definida, es continua de $(L^2(0, T; V') + L^1(0, T; H')) \times H$ en $L^2(0, T; V) \cap \mathcal{C}([0, T]; H)$ por las estimaciones que aparecen en la proposición 3. \square

10 Resolución de la ecuación del calor

Como segunda aplicación, demos propiedades de existencia y unicidad para la ecuación del calor.

Teorema 19 Sean $T > 0$, Ω un abierto de \mathbb{R}^d , $\alpha > 0$,

$$\begin{aligned} \mu &\in L^2(0, T; L^\infty(\Omega)) \text{ tal que } \mu \geq \alpha > 0, \\ f &\in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)) + L^1(0, T; L^2(\Omega)), \\ g &\in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \text{ tal que } \frac{\partial g}{\partial t} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)) + L^1(0, T; L^2(\Omega)), \\ u_0 &\in L^2(\Omega). \end{aligned}$$

Entonces existe una solución u de

$$\begin{aligned} u &\in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap \mathcal{C}([0, T]; L^2(\Omega)\text{-débil}), \\ \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mu \nabla u) &= f, \\ u(0) &= u_0, \\ u - g &\in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)). \end{aligned}$$

Si $\mu \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$, u es única y pertenece a $\mathcal{C}([0, T]; L^2(\Omega))$. \square

El espacio $H_0^1(\Omega)$ es, por definición, la adherencia de $\mathcal{D}(\Omega)$ en $H^1(\Omega)$ con la norma de éste último, lo que no necesita ninguna hipótesis sobre Ω .

Notación abusiva. Puesto que, aquí, u y g son distribuciones en $]0, T[$ con valores en $H^1(\Omega)$, sus derivadas deberían ser denotadas du/dt y dg/dt , mejor que $\partial u/\partial t$ y $\partial g/\partial t$. Pero se puede identificar $\mathcal{D}'(]0, T[; \mathcal{D}'(\Omega))$ con $\mathcal{D}'(]0, T[\times \Omega)$ y por tanto las derivadas ordinarias precedentes con derivadas parciales. \square

Demostración. Resolución de la ecuación variacional asociada. La distribución

$$h = f - \frac{\partial g}{\partial t} + \mu \Delta g$$

es de la forma $h = h_1 + h_2$, con

$$h_1 \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)), \quad h_2 \in L^1(0, T; L^2(\Omega)).$$

Luego, por el teorema 2, existe w tal que :

$$\begin{cases} w \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap \mathcal{C}([0, T]; L^2(\Omega)\text{-débil}), \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} wv + \int_{\Omega} \mu \nabla w \cdot \nabla v = \langle h_1, v \rangle_{H^{-1}(\Omega) \times H_0^1(\Omega)} + \int_{\Omega} h_2 v, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \\ w(0) = u_0 - g(0). \end{cases}$$

Nótese que $g(0)$ está bien definido ya que, por el lema 16 de Lions-Tartar,

$$g \in \mathcal{C}([0, T]; L^2(\Omega)).$$

Nótese también que la coercividad resulta de la desigualdad

$$\int_{\Omega} \mu |\nabla v|^2 \geq \alpha \int_{\Omega} |\nabla v|^2 = \alpha \|v\|_{H^1(\Omega)}^2 - \alpha \|v\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Ecuación en el sentido de distribuciones. Cuando $v \in \mathcal{D}(\Omega)$, la ecuación variacional se escribe, en $\mathcal{D}'(0, T)$, como sigue:

$$\left\langle \frac{\partial w}{\partial t} - \mu \Delta w - h, v \right\rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)} = 0. \quad (58)$$

En efecto, $\int_{\Omega} wv = \langle w, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}$ en $\mathcal{C}([0, T])$ y por tanto, en $\mathcal{D}'(0, T)$, se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} wv = \frac{d}{dt} \langle w, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)} = \left\langle \frac{\partial w}{\partial t}, v \right\rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}.$$

Además, $\int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v = -\langle \Delta w, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}$, puesto que los dos miembros son las imágenes de w por aplicaciones de $H_0^1(\Omega)$ en \mathbb{R} que coinciden. De modo análogo, $\langle h_1, v \rangle_{H^{-1}(\Omega) \times H_0^1(\Omega)} = \langle h_1, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}$ y $\int_{\Omega} h_2 v = \langle h_2, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}$.

Ahora, observemos que (58) significa (por (21) con $L = \langle \cdot, v \rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)}$) que, para cada $\varphi \in \mathcal{D}(0, T)$,

$$\left\langle \left\langle \frac{\partial w}{\partial t} - \mu \Delta w - h, \varphi \right\rangle, v \right\rangle_{\mathcal{D}'(\Omega) \times \mathcal{D}(\Omega)} = 0.$$

Esto es cierto para cada $v \in \mathcal{D}(\Omega)$, pues $\langle \partial w / \partial t - \mu \Delta w - h, \varphi \rangle = 0$ en $\mathcal{D}'(\Omega)$, y de igual forma para cada $v \in H^{-1}(\Omega)$, ya que dw/dt , Δw y h pertenecen a $\mathcal{D}'(0, T; H^{-1}(\Omega))$. También, lo anterior es cierto para cada función test φ , lo que prueba que

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \mu \Delta w - h = 0. \quad (59)$$

Entonces $u = w + g$ tiene las propiedades enunciadas.

Unicidad. La diferencia $w = u_2 - u_1$ de dos posibles soluciones satisface la ecuación (59) con $h = 0$, lo que conduce a la ecuación variacional para cada $v \in \mathcal{D}(\Omega)$ y por tanto, por densidad, para cada $v \in H_0^1(\Omega)$. Así, $w = 0$ por la unicidad en el teorema 1 (puesto que ahora $\mu \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$). \square

¿ Identificar o no identificar ? Habríamos podido reducir la situación a la ecuación parabólica general resuelta en el teorema 18, identificando $H^{-1}(\Omega)$ con $(H_0^1(\Omega))'$ y $L^2(\Omega)$ con $(L^2(\Omega))'$. Preferimos volver al teorema de Lions-Tartar para evitar estas identificaciones, que hacen el resultado menos preciso y que no se extienden a otras condiciones de contorno como las de Neumann o a otros operadores como el de Stokes.

En efecto, si el espacio H es un subespacio cerrado propio de $L^2(\Omega)$, H' nunca es un subespacio de $\mathcal{D}'(\Omega)$, pues las identificaciones de H con H' y de $L^2(\Omega)$ con un subespacio de $\mathcal{D}'(\Omega)$, aunque sean ambas posibles, son incompatibles (véase [SIMON, 9, thm. 1 p. 227] o [10] en el caso de las ecuaciones de Navier-Stokes); luego, si se resuelve la ecuación en H' no es en el sentido de las distribuciones en la variable x . \square

Condición de contorno. Si la frontera $\partial\Omega$ de Ω es localmente el grafo de una función lipschitziana, el operador traza está definido de $H^1(\Omega)$ en $H_{\text{loc}}^{1/2}(\partial\Omega)$ y por tanto la propiedad $u - g \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ puede ser reemplazada en el teorema 19 por

$$u|_{\partial\Omega} = g|_{\partial\Omega}. \quad (60)$$

Si $\partial\Omega$ es uniformemente localmente el grafo de una función lipschitziana, la traza es continua y sobreyectiva de $H^1(\Omega)$ sobre $H^{1/2}(\partial\Omega)$ y, dada

$$h \in H^1(0, T; H^{1/2}(\partial\Omega)),$$

existe g verificando las hipótesis del teorema 19, tal que $g|_{\partial\Omega} = h$ (esto podría ser mejorado). Luego (60) puede ser reemplazada por

$$u|_{\partial\Omega} = h. \quad \square$$

Operador anisótropo. El teorema 19 es también cierto si μ es una matriz elíptica, es decir,

$$\mu \in L^2(0, T; (L^\infty(\Omega))^{d \times d}), \quad \mu\xi \cdot \xi \geq \alpha|\xi|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d,$$

lo que corresponde a un medio anisótropo. \square

La hipótesis sobre μ . No se puede reemplazar $\mu \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$ por

$$\mu \in L^\infty(]0, T[\times \Omega) \quad (61)$$

en la prueba del teorema 19. En efecto, cuando se reagrupan las variables, $L^\infty(]0, T[\times \Omega) \not\subset L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$ y, peor aún,

$$L^\infty(]0, T[\times \Omega) \not\subset L^2(0, T; L^\infty(\Omega)).$$

Por ejemplo, sea $S = T$ y sea $\mu \in L^\infty(]0, T[\times]0, S[)$ la función definida por $\mu(t, x) = 1$ si $x < t$ y $\mu(t, x) = 0$ si no. Esta función no pertenece a ningún espacio $L^p(0, T; L^\infty(0, T))$, porque no es medible de $]0, T[$ en $L^\infty(0, T)$ puesto que es discontinua en cada t (de hecho $\|\mu(t) - \mu(s)\|_{L^\infty(0, T)} = 1$ si $t \neq s$).

Este ejemplo muestra que existen funciones μ que verifican (61) tales que los teoremas 1 y 2 no se aplican, porque la forma bilineal asociada verifica

$$a \notin L^2(0, T; \mathcal{L}^2(H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)))$$

(puesto que $\|a\|_{\mathcal{L}^2(H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega))} \geq \|\mu\|_{L^\infty(\Omega)}$). \square

Agradecimientos. El autor agradece a Enrique Fernández-Cara sus sugerencias sobre el fondo del artículo y su imprescindible ayuda en el castellano.

Referencias

- [1] N. Bourbaki *Intégration*, *Actual. Sci. et Ind.*, No. 1175. Hermann, Paris, 1965.
- [2] H. Brézis *Analyse fonctionnelle*. Masson, Paris, 1983.
- [3] R. Edwards *Functional analysis. Theory and applications*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1965.
- [4] J.-L. Lions *Équations différentielles opérationnelles dans les espaces de Hilbert*, Centro Int. Mat. Estivo, Varenna, 1963 (= *Equazioni differenziali astratte*. Cremonese, Roma, 1963)
- [5] J.-L. Lions & E. Magenes *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, vol. 1. Dunod, Paris, 1968.
- [6] J. von Neumann On complete topological linear spaces. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 37 (1935), 1–20.
- [7] L. Schwartz *Théorie des distributions*, *Actual. Sci. et Ind.*, No. 1091 et 1122. Hermann, Paris, 1950–1951. Nouvelle édition augmentée, 1973.
- [8] L. Schwartz *Théorie des distributions à valeurs vectorielles*, I. *Ann. Inst. Fourier*, 7 (1957), 1–141.
- [9] J. Simon On the existence of the pressure for solutions of the variational Navier–Stokes equations, *J. Math. Fluid Mech.*, 1 (1999), 225–234.
- [10] J. Simon Ecuaciones de Navier–Stokes en cualquier abierto de \mathbb{R}^d . *Boletín SeMA*, 2008 (aparecerá).
- [11] L. Tartar *An introduction to Navier–Stokes equation and oceanography*, Lecture Notes of the Unione Matematica Italiana, 1. Springer-Verlag, Berlin; UMI, Bologna, 2006.

COMPUTATIONAL METHODS IN ALGEBRA AND ANALYSIS

FRANCISCO J. CASTRO-JIMÉNEZ

Departamento de Álgebra, Universidad de Sevilla

castro@us.es

Abstract

This paper describes some applications of Computer Algebra to Algebraic Analysis also known as \mathcal{D} -module theory, i.e. the algebraic study of the systems of linear partial differential equations. Gröbner bases for rings of linear differential operators are the main tools in the field. We start by giving a short review of the problem of solving systems of polynomial equations by symbolic methods. These problems motivate some of the later developed subjects.

Key words: *Polynomial ring, polynomial system, ring of linear differential operators, differential system, D -module, Gröbner basis, division theorem, characteristic variety, irregularity, Bernstein-Sato polynomial, logarithmic D -module, projective module, syzygy, free resolution.*

AMS subject classifications: *68W30 13D02 13Pxx 14Qxx 16S32 16Z05 32C38 33F10.*

Introduction

The nature of this article is somehow mixed. It contains for example some elementary and very well known results on commutative polynomial rings but on the other hand it also contains non trivial results about systems of linear partial differential equations. Nevertheless, anyone with a basic knowledge of ring and module theory could, at least, have a grasp on the referred matter. The interested reader will find in the text precises references for the proofs of the announced results.

Computer Algebra, Symbolic Computation (CA/SC in what follows) or *Computational Algebra* is a relatively new discipline. This new field of research is

Fecha de recepción: 07/12/2005. Aceptado (en forma revisada): 17/09/2007.

The title of this paper coincides with the one of one Special Session of the First Joint Meeting AMS-RSME (June 18-21, Seville, 2003). The Special Session was organized by E. Cattani and the author.

This work has been supported by MTM2004-01165 and FQM-333.

called *Calcul Formel* in French and *Cálculo Simbólico* or *Álgebra Computacional* in Spanish. The item *Álgebra Computacional* appears in the Spanish *Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica 2004-2007, Programa Nacional de Matemáticas*¹, as subsection 3.5.

In the Mathematics Subject Classification 2000 (MSC2000) used by Mathematical Reviews and Zentralblatt MATH, CA/SC appears as 68W30 Symbolic computation and algebraic computation [See also 11Yxx, 12Y05, 13Pxx, 14Qxx, 16Z05, 17-08, 33F10], and it provides methods and tools for many Mathematical areas as for example

Commutative Algebra	Algebraic Geometry
Number Theory	Algebraic Analysis or \mathcal{D} -modules
Differential Geometry	Associative Algebras
Group Theory	Algebraic Groups and Lie Algebras
Algebraic and Differential Topology	Combinatorics
Graph Theory	Computational Geometry
Coding Theory and Cryptography	Statistic and Probability

Recent CA/SC developments deeply interact with Numerical Analysis. Moreover, the study and analysis of the algorithms arising in CA/SC are also useful in other disciplines especially in Robotics (see e.g. [82, 37]), Computer Vision (see e.g. [27]), Computer Aided Geometric Design (see e.g. [38]), Artificial Intelligence (see e.g. [3]), Chemistry, Physics and Engineering (see e.g. [23] and [1]), Biology (see e.g. [28]), and Statistics and Economics (see e.g. [63] and [77, Chaps. 6,8]). Finally the *Journal of Symbolic Computation* and *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing* are international journals mainly directed to researchers who are interested in symbolic computation and a new section of the *Journal of Algebra* is titled and devoted to *Computational Algebra*. Journals as *Mathematics of Computation*, *Journal of Complexity*, *Computational Complexity*, *SIAM Journal of Computing*, *ACM Communications in Computer Algebra* publish regularly CA/SC papers.

The algorithms described in this paper have been implemented in several Computer Algebra Systems most of them freely available. The following are widely used: *Macaulay 2* [35], *CoCoA* [22], *Singular-Plural* [36], *Risa-Asir* [62], *kan* [62], *Bergman* [6], *Gap* [32]. *Mathematica*[®] *MAGMA*[®] *MuPAD*[®] and *Maple*[®] are some commercial Computer Algebra Systems of general purpose containing implementations of some of the algorithms treated in this article.

The article is intended to provide a short introduction to the use of some Computer Algebra methods in the algebraic study of linear partial differential systems. Our main tool will be Gröbner bases for linear partial differential operators. Some of the algebraic methods developed in this article have been

¹National Plan for Scientific Research and Technological Development 2004-2007, National Mathematics Program

treated by different authors elsewhere. A list of such works should include Ch. Riquier [66] and M. Janet [45] both inspired by the works of E. Cartan. This article does not deal with the general theory of Differential Algebra (see e.g. [67], [48]).

The article does not contain proofs but for any of them a reference is given.

The structure of the article is as follows: Section 1 is devoted to the description of some problems on systems of polynomial equations and their solutions by using Gröbner bases for polynomial rings. In Section 2 we recall the notion of Gröbner basis for rings of differential operators and its application to the algebraic study of systems of linear differential equations. We focus on the calculation of the characteristic variety of a linear partial differential system and on the computation of a free resolution of the module associated with the considered system. In Section 3 we sketch some applications of Gröbner bases to the computational study of the irregularity of differential systems and to logarithmic \mathcal{D} -modules.

1 Getting started

1.1 Polynomial rings and polynomial systems

On peut dire que l'origine historique et un des buts essentiels de l'Algèbre, depuis les Babyloniens, les Hindous et Diophante jusqu'à nos jours, est l'étude des *solutions des systèmes d'équations polynomiales*.²

In this subsection we will describe some problems related to the study of systems of polynomial equations in several variables.

Let us denote by $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_n]$ the set of polynomials in the variables x_1, \dots, x_n and with coefficients in the field of real numbers \mathbb{R} . We also write $\mathbb{R}[x] = \mathbb{R}[x_1, \dots, x_n]$ if no confusion arises. The letters f, g, h, \dots or the expressions $f(x), g(x), h(x), \dots$ (sometimes with subindexes) stand for polynomials. A polynomial in $\mathbb{R}[x]$ can be written as a finite sum

$$\sum_{\alpha=(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n} c_\alpha x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$$

where the coefficients c_α are real numbers. To simplify we write $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$. The degree of f , denoted by $\deg(f)$, is the maximum of the integer numbers $|\alpha| := \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$ for $c_\alpha \neq 0$.

The set $\mathbb{R}[x]$ is a commutative ring with respect to the addition and the product of polynomials.

Let us consider a finite system

$$\mathcal{S} \equiv \{f_1(x) = f_2(x) = \cdots = f_m(x) = 0\} \quad (1)$$

²Extracted from the Introduction of the book: Grothendieck, A. and Dieudonné, J.A. *Éléments de géométrie algébrique I*, Springer-Verlag, Berlin, (1971), ISBN:0387051139.

of polynomial equations. We denote

$$\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(\mathcal{S}) = \{w = (w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{R}^n \text{ such that } f_i(w) = 0, i = 1, \dots, m\}$$

the set of *real solutions* of the system \mathcal{S} . We also write $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(\mathcal{S}) = \mathcal{V}_{\mathbb{R}}(f_1, \dots, f_m)$. The subsets of \mathbb{R}^n of type $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(\mathcal{S})$ for some system \mathcal{S} , are called *real affine algebraic sets* or simply algebraic sets if no confusion is possible. For example, the graph in \mathbb{R}^2 of any polynomial $f(x_1)$ in one variable x_1 is an algebraic set in \mathbb{R}^2 as this graph is the set $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(x_2 - f(x_1)) = \{(a_1, a_2) \in \mathbb{R}^2 \mid a_2 = f(a_1)\}$.

If

$$f(x_1, x_2) = a_{00} + a_{10}x_1 + a_{01}x_2 + a_{11}x_1x_2 + a_{20}x_1^2 + a_{02}x_2^2$$

is a degree 2 polynomial in two variables x_1, x_2 then the set $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(f(x_1, x_2))$ is nothing but a real affine conic which could be degenerate.

If each equation in the system \mathcal{S} is linear –i.e. if each polynomial $f_i(x)$ has degree 1, then the solution set $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(\mathcal{S})$ is simply a linear affine variety in \mathbb{R}^n and Linear Algebra is devoted to the study of such objects.

The first objective of Algebraic Geometry is the study of the properties of algebraic sets $\mathcal{V}(\mathcal{S})$ when \mathcal{S} is a general system of polynomial equations. Let us remark that if $w = (w_1, \dots, w_n)$ is a real solution of System (1) then w is also a solution of any equation $f(x) = 0$ deduced from the $f_i(x) = 0$ by a linear combination with polynomial coefficients, i.e. $f(w) = 0$ for $f(x) = \sum_{i=1}^m q_i(x)f_i(x)$ for any choice of $q_i(x)$ in $\mathbb{R}[x]$. The set of such linear combinations is denoted by $\langle f_1(x), \dots, f_m(x) \rangle$ and it's called an *ideal* of the ring $\mathbb{R}[x]$ (an ideal in a commutative ring R is an additive subgroup of R closed by products with elements in R).

Formally, we can also consider non necessarily finite systems of polynomial equations but the Hilbert's Basissatz (see, e.g. [5, Th. 7.5.]) assures that each system is *equivalent* to a finite one. More precisely, let us consider a system

$$\{f(x) = 0\}_{f(x) \in T}$$

of polynomial equations where T is an arbitrary subset of $\mathbb{R}[x]$. Its solution set is denoted by $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(T)$. By Hilbert's Basissatz there is a finite subset $\{g_1(x), \dots, g_r(x)\}$ in T such that

$$\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(T) = \mathcal{V}_{\mathbb{R}}(g_1, \dots, g_r). \quad (2)$$

Moreover, if we denote by $\langle T \rangle$ the *ideal generated* by T , i.e. the set of all linear combinations of elements in T with polynomial coefficients, the Hilbert's Basissatz states precisely that there is a finite subset $\{g_1(x), \dots, g_r(x)\}$ in T such that

$$\langle g_1(x), \dots, g_r(x) \rangle = \langle T \rangle \quad (3)$$

and the equality (3) implies the equality (2). A commutative ring in which any ideal is finitely generated is called a *Noetherian ring*.

In what we have done before the field \mathbb{R} can be replaced by any other field \mathbb{K} . Then we can consider the polynomial ring $\mathbb{K}[x] = \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ on the variables

x_i and with coefficients in \mathbb{K} . In many practical applications \mathbb{K} will be one of the fields \mathbb{Q} , \mathbb{R} or \mathbb{C} while finite fields are widely used for example in Coding Theory and Cryptography.

So, let us consider a general system of polynomial equations

$$\mathcal{S} \equiv \{f_1(x) = f_2(x) = \dots = f_m(x) = 0\} \quad (4)$$

with coefficients in the field \mathbb{K} and let us denote its solution set in the affine space \mathbb{K}^n by $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S}) = \mathcal{V}(f_1, \dots, f_m) = \{w = (w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{K}^n \mid f_1(w) = \dots = f_m(w) = 0\}$.

A subset Y of the affine space \mathbb{K}^n is said to be an *affine algebraic set* or simply an *algebraic set* if there exists $T \subset \mathbb{K}[x]$ such that $Y = \mathcal{V}_{\mathbb{K}}(T)$. The empty set and \mathbb{K}^n are algebraic sets. The union of two algebraic sets is an algebraic set. The intersection of an arbitrary family of algebraic sets is also an algebraic set (see e.g. [41]). These last properties of algebraic sets show that they are the closed sets of a topology on \mathbb{K}^n which is called the *Zariski topology*.

Taking the system \mathcal{S} as input we are concerned with the following problems or questions that can be considered as effective problems in polynomial rings.

- (P1) Describe an algorithm to decide whether the set $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ is empty.
- (P2) If $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ is not empty, describe an algorithm to decide whether $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ is finite and to compute its cardinal.
- (P3) If $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ is finite, describe an algorithm to compute the elements of $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ i.e. to solve the system \mathcal{S} .
- (P4) If $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S})$ is not finite, can we describe its elements using parameters?

There are no known algorithms for solving Problems P1-P4 with the above generality. For example, if $f(x, y) \in \mathbb{Q}[x, y]$ is a cubic (i.e. if $\deg(f) = 3$) then there is no currently known algorithm to decide if $\mathcal{V}_{\mathbb{Q}}(f)$ is empty; see e.g. [74].

Nevertheless a weaker form of these problems will be solved in Subsection 1.2 by using Gröbner bases techniques. In these weaker forms, which will be denoted (P1'), (P2'), (P3') and (P4'), we will assume that even if the coefficients of \mathcal{S} belong to the given field \mathbb{K} , the solutions of the system $\mathcal{V}_{\mathbb{L}}(\mathcal{S})$ are to be searched over an algebraically closed³ field \mathbb{L} containing \mathbb{K} (for example \mathbb{L} could be the algebraic closure $\overline{\mathbb{K}}$ of \mathbb{K}).

One of the fundamental problems on effectiveness in polynomial rings is the so called *membership problem* as defined for example by G. Hermann [42] in 1926. It can be stated as follows:

- (P0) Given a finite set of polynomials $f_1(x), \dots, f_m(x)$ in $\mathbb{K}[x]$ describe an algorithm deciding if a given polynomial $f(x)$ belongs to the ideal $\langle f_1(x), \dots, f_m(x) \rangle$.

³A field \mathbb{K} is algebraically closed if the roots of every polynomial in one variable $f(t) \in \mathbb{K}[t]$ are in \mathbb{K} .

To solve this problem G. Hermann gave an upper bound for the degree of the polynomials $q_i(x)$ appearing in an expression $f(x) = \sum_i q_i(x)f_i(x)$ if they exist, and then she used Linear Algebra to algorithmically solve problem P0. The upper bound found by G. Hermann is of type $\deg(f) + (md)^{2^n}$ where d is the maximum of the degrees of the f_i . Moreover, as shown in [57], this upper bound is sharp. Hermann's upper bound is in fact related to the degree of a *Gröbner basis* of the ideal generated by the f_i , as we will see in the next section.

1.2 Gröbner bases for polynomial rings

If $f(x_1)$ is a nonzero polynomial in $\mathbb{K}[x_1]$ then the set $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(f)$ is nothing but the set of roots of $f(x_1) = 0$ in \mathbb{K} and its cardinal is bounded by the degree $\deg(f)$. Moreover, $\deg(f)$ equals the dimension of the quotient \mathbb{K} -vector space $\frac{\mathbb{K}[x_1]}{\langle f(x_1) \rangle}$.

For a general system \mathcal{S} as (4) we have

Proposition 1 (see e.g. [26, Chap. 2, Th. 2.10] or [54, Chap. 2 Prop. 1.4])
Let \mathcal{S} be the system $f_1(x) = f_2(x) = \dots = f_m(x) = 0$ and let us denote by $\langle \mathcal{S} \rangle$ the ideal in $\mathbb{K}[x]$ generated by the f_i . If $\dim_{\mathbb{K}} \frac{\mathbb{K}[x]}{\langle \mathcal{S} \rangle}$ is finite then

$$\#\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(\mathcal{S}) \leq \dim_{\mathbb{K}} \frac{\mathbb{K}[x]}{\langle \mathcal{S} \rangle}.$$

Here $\#Z$ denotes the cardinal of a set Z and $\frac{\mathbb{K}[x]}{\langle \mathcal{S} \rangle}$ is considered as the quotient vector space of $\mathbb{K}[x]$ by the ideal $\langle \mathcal{S} \rangle$ and $\dim_{\mathbb{K}}(\cdot)$ denotes the vector space dimension. The quotient $\frac{\mathbb{K}[x]}{\langle \mathcal{S} \rangle}$ also has a natural structure of commutative ring with unit with respect to the addition and the multiplication of classes modulo $\langle \mathcal{S} \rangle$.

The reciprocal of Proposition 1 is false in general. Consider $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$. We have $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(f) = \{(0, 0)\} \subset \mathbb{R}^2$ but $\dim_{\mathbb{R}}(\frac{\mathbb{R}[x_1, x_2]}{\langle f \rangle}) = +\infty$. Moreover, in Theorem 3 we will see a more precise result.

The computation of the dimension of the vector space $\mathbb{K}[x]/\langle \mathcal{S} \rangle$, even when it is finite, is more complicated than in the one variable case. It is not enough to consider only the degrees $\deg(f_i)$. To deal with we will start by introducing the notion of *monomial order*. A total ordering \prec on \mathbb{N}^n is a monomial order if $0 = (0, \dots, 0) \prec \alpha$ for all $\alpha \in \mathbb{N}^n$ and \prec is compatible with the sum (i.e. $\alpha \prec \beta$ implies $\alpha + \gamma \prec \beta + \gamma$ for all $\gamma \in \mathbb{N}^n$). The *lexicographical order* (denoted by $<_{\text{lex}}$) on \mathbb{N}^n is defined as follows: $(\alpha_1, \dots, \alpha_n) <_{\text{lex}} (\beta_1, \dots, \beta_n)$ if and only if the first nonzero component of $(\alpha_1 - \beta_1, \dots, \alpha_n - \beta_n)$ is negative. The total order $<_{\text{lex}}$ is a monomial order. The only monomial order in \mathbb{N} is the natural order. We can translate any order \prec in \mathbb{N}^n to the set of monomial $\{x^\alpha \mid \alpha \in \mathbb{N}^n\}$ just by writing $x^\alpha \prec x^\beta$ if and only if $\alpha \prec \beta$.

Once a monomial order has been fixed on \mathbb{N}^n , we can associate to each nonzero polynomial $f = f(x) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x^{\alpha} \in \mathbb{K}[x]$ its *privileged exponent* $\exp_{\prec}(f)$ with respect to \prec , defined as the maximum with respect to \prec of the set $\{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid c_{\alpha} \neq 0\}$. We write simply $\exp(f)$ if no confusion is possible. One

has $\exp(fg) = \exp(f) + \exp(g)$ for all nonzero $f, g \in \mathbb{K}[x]$. If $0 \neq f = f(x_i)$ only involves one variable x_i , then $\exp(f) = \deg(f)\epsilon_i$ where ϵ_i is the i -th element in the canonical basis of \mathbb{N}^n .

For each non empty subset A of $\mathbb{K}[x]$ let us denote by $E_{\prec}(A)$ (or simply $E(A)$) the set

$$E_{\prec}(A) = \cup_{f \in A} (\exp_{\prec}(f) + \mathbb{N}^n).$$

It is easy to prove the equality $E(A) + \mathbb{N}^n = E(A)$. There exists a finite subset $A' \subset A$ such that $E(A) = E(A')$ (this is a consequence of Dickson's Lemma; see e.g. [26, p. 12]). We say that $E(A)$ is generated by the set $\{\exp(f) \mid f \in A'\}$. So, if $A = I$ is an ideal of $\mathbb{K}[x]$ there exists a finite subset $G \subset I$ such that $E(I) = E(G)$ is generated by $\{\exp(g) \mid g \in G\}$.

Definition 1 *Let $I \subset \mathbb{K}[x]$ be a nonzero ideal. A finite subset $G \subset I$ is said to be a Gröbner basis of I with respect to the fixed monomial order \prec if $E_{\prec}(I) = E_{\prec}(G)$.*

Example 1 *a) If the ideal $I = \langle f \rangle$ is principal and generated by a polynomial f then $E(I)$ is the (hyper)-quadrant generated by $\exp(f)$, i.e. $E(I) = \exp(f) + \mathbb{N}^n$ and then $\{f\}$ is a Gröbner basis of I .*

b) Let us consider $f_1 = x_1 - x_2, f_2 = x_1 + x_2$ and $I \subset \mathbb{R}[x_1, x_2]$ the ideal generated by f_1, f_2 . With respect to the lexicographical order $<_{\text{lex}}$ on \mathbb{N}^2 we have $\exp(f_1) = \exp(f_2) = (1, 0)$ since $x_2 <_{\text{lex}} x_1$. It is easy to prove that $E(I)$ is the union of the quadrants $(1, 0) + \mathbb{N}^2$ and $(0, 1) + \mathbb{N}^2$. So, $\{f_1, f_2\}$ is not a Gröbner basis of I with respect to $<_{\text{lex}}$. Nevertheless, $\{f_1, x_2\}$ is a Gröbner basis of I , with respect to $<_{\text{lex}}$.

If $E \subset \mathbb{N}^n$ we denote by $c(E) = \mathbb{N}^n \setminus E$ its complement and by $\mathbb{K}[x]^{c(E)}$ the vector space of polynomials of type $\sum_{\beta \in c(E)} c_{\beta} x^{\beta}$. For the sake of simplicity we denote $c_{\prec}(I)$ instead of $c(E_{\prec}(I))$ (or simply $c(I)$ if no confusion is possible).

Let us consider a vector (f_1, \dots, f_m) of nonzero polynomials in $\mathbb{K}[x]$. The Division Theorem in $\mathbb{K}[x]$ is stated as follows:

Theorem 2 (e.g. [26, p. 9] or [2, Th. 1.5.9]) *For each $f \in \mathbb{K}[x]$ there exists a polynomial $r \in \mathbb{K}[x]^{c(f_1, \dots, f_m)}$ such that $f - r = \sum_i q_i f_i$ for some polynomials q_i . Here $c(f_1, \dots, f_m) = c(\cup_{i=1}^m (\exp(f_i) + \mathbb{N}^n))$.*

The q_i and r can be chosen to be unique if they satisfy certain combinatorial conditions about their supports. The support of a polynomial $f = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x^{\alpha}$ is the set $\{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid c_{\alpha} \neq 0\}$. There exists an algorithm computing the remainder r and the quotients q_i starting from f and the f_i (see e.g. [2, Algorithm 1.5.1]).

If $n = 1$ the Division Theorem 2 is nothing but the classical Euclidean Division Theorem. As a corollary of Theorem 2 one can prove that any Gröbner basis of an ideal $I \subset \mathbb{K}[x]$ generates I .

A famous algorithm, due to B. Buchberger [12], takes as input a monomial order \prec on \mathbb{N}^n and a finite set $\mathcal{F} = \{f_1(x), \dots, f_m(x)\}$ of polynomials, and

computes a Gröbner basis –with respect to \prec , of the ideal I of $\mathbb{K}[x]$ generated by \mathcal{F} . As a consequence one can also compute a finite system of generators of the set $E(I)$.

The worst-case complexity of the computation of a Gröbner basis is doubly exponential on the degrees of the f_i as proved in [57]. Nevertheless, despite this theoretical bad behavior lots of invariants can be effectively computed in Algebraic Geometry using Gröbner basis theory (see e.g.[7]).

The proof of the following Theorem uses some properties of Gröbner bases. Recall the notation $c(I) = \mathbb{N}^n \setminus E(I)$ for any ideal $I \subset \mathbb{K}[x]$ and that $\#Z$ is the cardinal of the set Z . The *radical* \sqrt{I} of an ideal $I \subset \mathbb{K}[x]$ is the ideal of polynomials $f \in \mathbb{K}[x]$ such that $f^e \in I$ for some integer e (which depends on f).

Theorem 3 [26, pp. 37-42] *Let \mathbb{K} be a field and $\{f_1 = f_2 = \dots = f_m = 0\}$ a polynomial system. Let $I \subset \mathbb{K}[x]$ be the ideal generated by the f_i . Then*

$$\#c(I) = \dim_{\mathbb{K}}\left(\frac{\mathbb{K}[x]}{I}\right).$$

Moreover, if \mathbb{K} is algebraically closed then

- 1) $\#\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(I) < +\infty$ if and only if $\dim_{\mathbb{K}}\left(\frac{\mathbb{K}[x]}{I}\right) < +\infty$
- 2) $\#\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(I) \leq \dim_{\mathbb{K}}\left(\frac{\mathbb{K}[x]}{I}\right)$ and equality holds if and only if I is a radical ideal (i.e. if and only if $\sqrt{I} = I$).

If the ideal $I \subset \mathbb{K}[x]$ satisfies $\dim_{\mathbb{K}}(\mathbb{K}[x]/I) < +\infty$ we will say that I is *zero dimensional*.⁴

Let us give a solution to problems P0, P1', P2', P3' and P4' described in Subsection 1.1.

Solution to P0.- Although G. Hermann gave a solution to this problem, we can give a new one by using Gröbner basis. We first compute –using Buchberger's algorithm, a Gröbner basis $\{g_1, \dots, g_r\}$ of the ideal I generated by the f_i and then we compute the remainder r of the division of the polynomial f by $\{g_1, \dots, g_r\}$ (see Theorem 2). Then $f \in I$ if and only if $r = 0$.

Solution to P1' and P2'.– By Buchberger's algorithm a finite system of generators of $E(I)$ and $\dim_{\mathbb{K}}\left(\frac{\mathbb{K}[x]}{I}\right)$ can be computed. By Hilbert's Nullstellensatz (e.g. [50, p. 16]), the set $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(I)$ is empty if and only if $I = \mathbb{K}[x]$ and so, if and only if any Gröbner basis of I contains a nonzero constant polynomial. Here $\overline{\mathbb{K}}$ is an algebraic closure of \mathbb{K} . This result gives the answer to P1'. Moreover, by Theorem 3 we can test the finiteness of $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(I)$ since $\dim_{\overline{\mathbb{K}}}\left(\frac{\overline{\mathbb{K}}[x]}{\overline{\mathbb{K}}[x]I}\right) = \dim_{\mathbb{K}}(\mathbb{K}[x]/I)$. To compute the exact number of solutions $\mathcal{V}_{\mathbb{K}}(I)$ we can apply Theorem 3 again and the fact that \sqrt{I} can be computed (i.e. a finite system

⁴The *Krull dimension* (see e.g. [10, Chap. 8]) of the quotient ring $\mathbb{K}[x]/I$ is zero in this case. See **Solution to P4'** in Subsection 1.2.

of generators of the radical ideal \sqrt{I} can be computed in an effective way,⁵ see e.g. [26, Chap. 2, Prop. 2.7]). This solves problem P2'. As suggested by one referee this can be seen as a generalization of the one variable case. Let I be the principal ideal $I = \langle t^3 \rangle \subset \mathbb{C}[t]$ then $\mathcal{V}_{\mathbb{C}}(I) = \{0\}$ has only one element but the dimension of the quotient vector space $\mathbb{C}[t]/I$ is 3. In this case $\sqrt{I} = \langle t \rangle$ and the dimension of $\mathbb{C}[t]/\sqrt{I}$ is 1.

Solution to P3'.- For any field \mathbb{K} , if the solution set $V := \mathcal{V}_{\mathbb{K}}(f_1, \dots, f_m)$ is finite then there is an algorithm based in the *elimination principle* (see [80]) to compute V in a finite field extension of the base field \mathbb{K} . To have a grasp of how it works, we can show that if we calculate a Gröbner basis of the ideal $\langle f_1, \dots, f_m \rangle$ with respect to an ordering for which $x_i > x_n$ for $i = 1, \dots, n-1$ —this is a special case of what are called *elimination orderings*— we obtain a nonzero polynomial $g(x_n)$ in the Gröbner basis. Once the roots of this polynomial $g(x_n)$ are known (maybe in a finite extension \mathbb{K}' of the field \mathbb{K}) we can substitute them in the original system to obtain (a finite number of) systems in x_1, \dots, x_{n-1} with coefficients in \mathbb{K}' . This strategy is a generalization of Gaussian elimination in the linear case. It should be said that an elimination order leads to computations which are very often untractable. To avoid this bottleneck, the so-called FGLM (from J.C. Faugère, P. Gianni, D. Lazard and T. Mora) method can be applied in this case [29].

In practical situations a *numerical approximation* of a real or complex solution of a system is useful and very often even necessary if the results are accurate enough. So, in general, symbolic and numerical methods are combined to solve real or complex polynomial systems. Nevertheless, the elimination-extension methods can produce errors accumulation which are difficult to manage (see e.g. [26, p. 28-34]). To overcome these problems several strategies are used as for example the one based on the computation of the eigenvalues of some matrices attached to our starting system (cf. [26, Chap. 2, Sec. 4]).

Solution to P4'.- If $V = \mathcal{V}_{\mathbb{K}}(f_1, \dots, f_m)$ is infinite the previous method using *elimination strategy* fails. The key idea in this case is to consider some of the variables as “parameters” and to solve the system giving a finite number of solutions as function of these parameters. This is a generalization of what is done when the system has only finitely many solutions. This “parametric” method can be done in a systematic way applying for example Noether’s Normalization Lemma (e.g. [5]) to find an integer r , $1 \leq r \leq n$ and new coordinates y_1, \dots, y_n such that for each point $(a_1, \dots, a_r) \in \mathbb{K}^r$ the system defined by $\{g_1(a_1, \dots, a_r, y_{r+1}, \dots, y_n), \dots, g_m(a_1, \dots, a_r, y_{r+1}, \dots, y_n)\}$ has finitely many solutions and we can apply the previous case to solve it. Here the polynomials $g_i(y)$ come from the $f_j(x)$ by the variable change. This procedure is also algorithmic and the integer r is called the (*Krull*) *dimension* (see e.g. [10, Chap. 8]) of the algebraic set V . (See e.g. [54]).

Let us finish this subsection by quoting that the Division Theorem and

⁵In our case, since $\dim_{\mathbb{K}}(\mathbb{K}[x]/I) < +\infty$, the computation of \sqrt{I} is much easier than for general ideals.

Gröbner bases techniques can be generalized for submodules of a free module $\mathbb{K}[x]^r$ (see e.g. [31] or [2, Chap. 3]).

2 Rings of differential operators and systems of linear partial differential equations

For simplicity we are going to consider either the complex numbers \mathbb{C} or the real numbers \mathbb{R} as the base field. Nevertheless, in what follows many algebraic results also hold for any base field \mathbb{K} of characteristic zero.

Let us recall that a linear differential operator (LDO) in n variables, with polynomial coefficients is a finite sum of the form

$$P(x, \partial) = \sum_{\beta \in \mathbb{N}^n} p_\beta(x) \partial^\beta$$

where each $p_\beta(x)$ is a polynomial in $\mathbb{K}[x]$, $\partial = (\partial_1, \dots, \partial_n)$ with $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ and $\partial^\beta = \partial_1^{\beta_1} \dots \partial_n^{\beta_n}$.

The set of such LDOs is denoted by $A_n(\mathbb{K})$ (or simply A_n if no confusion is possible) and it is called the *Weyl algebra* of order n with coefficients in the field \mathbb{K} . The expressions $P(x, \partial), Q(x, \partial), R(x, \partial), \dots$ and P, Q, R, \dots (sometimes with subindexes) will denote LDOs.

The elements in A_n can be added and multiplied in a natural way. Leibniz's rule holds for the multiplication in the ring A_n : $\partial_i a(x) = a(x) \partial_i + \frac{\partial a(x)}{\partial x_i}$ for any $a(x) \in \mathbb{K}[x]$. So A_n is an associative non commutative ring with unit (the unit being the 'constant' operator $1 = x_1^0 \dots x_n^0 \partial_1^0 \dots \partial_n^0$).

The *order* of a nonzero operator $P = \sum_{\beta \in \mathbb{N}^n} p_\beta(x) \partial^\beta$, denoted by $\text{ord}(P)$, is the maximum of the integer numbers $|\beta| = \beta_1 + \dots + \beta_n$ for $p_\beta(x) \neq 0$ and the *principal symbol* of P is the polynomial

$$\sigma(P) = \sum_{|\beta|=\text{ord}(P)} p_\beta(x) \xi_1^{\beta_1} \dots \xi_n^{\beta_n}.$$

Here $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ are new variables and so $\sigma(P) \in \mathbb{K}[x, \xi]$ is a polynomial in $2n$ variables. Sometimes we will write $\sigma(P)(x, \xi)$ to emphasize this fact. Notice that $\sigma(P)$ is homogeneous in ξ of degree $\text{ord}(P)$. One has the equality $\sigma(PQ) = \sigma(P)\sigma(Q)$ for $P, Q \in A_n$ and by definition $\sigma(0) = 0$.

Remark 1 *One can also consider LDOs with coefficients in other rings as the ring $\mathcal{O}_{\mathbb{C}^n}(U)$ (resp. $\mathcal{O}_{\mathbb{R}^n}(U)$) of holomorphic (resp. analytic) functions in some open set $U \subset \mathbb{C}^n$ (resp. $U \subset \mathbb{R}^n$) or the ring of convergent power series $\mathbb{C}\{x\} = \mathbb{C}\{x_1, \dots, x_n\}$ (or $\mathbb{R}\{x\} = \mathbb{R}\{x_1, \dots, x_n\}$). If R is any of these rings we will denote by $\text{Diff}(R)$ the corresponding ring of LDOs.*

One of the goals of the theory of Differential Equations is to study the existence, uniqueness and the properties of the solutions of linear partial

and this quotient is also called a *differential system*.

As A_n is left-Noetherian (see Subsection 2.2) any finitely generated left A_n -module is isomorphic to a quotient of type

$$\frac{A_n^m}{A_n(\underline{P}_1, \dots, \underline{P}_\ell)}.$$

As in the polynomial case, see Subsection 1.1, the attached quotient module encodes important information about the system.

Different systems could have the same associated module, i.e. the corresponding quotient modules could be isomorphic. For example, we have the isomorphism

$$\frac{A_2}{A_2(\partial_1^2 + \partial_2^2)} \simeq \frac{A_2^3}{N}$$

where $N \subset A_2^3$ is the submodule generated by the family $(\partial_1, -1, 0)$, $(\partial_2, 0, -1)$, $(0, \partial_1, \partial_2)$. This isomorphism encodes the fact that the systems

$$(\partial_1^2 + \partial_2^2)(u) = 0 \tag{8}$$

and

$$\begin{cases} \partial_1(u_1) - u_2 & = 0 \\ \partial_2(u_1) - u_3 & = 0 \\ \partial_1(u_2) + \partial_2(u_3) & = 0 \end{cases} \tag{9}$$

are equivalent in the sense that the computation of their solutions (wherever they lie) are equivalent problems since they can be reduced to each other. More precisely, a suitable function $u = u(x_1, x_2)$ is a solution of Equation (8) if and only if the vector $(u_1 = u, u_2 = \partial_1(u_1), u_3 = \partial_2(u_1))$ is a solution of System (9).

The study of such A_n -modules is the object of the so-called *Algebraic Analysis*⁸ or \mathcal{D} -module theory.⁹

In the next three Subsections we are going to recall the classical definition of characteristic vector of a linear partial differential equation (Subsection 2.1), then we will recall the definition and basic properties of Gröbner bases for LDOs and we will show how they can be used to compute the characteristic variety of a LPDS (Subsections 2.2 and 2.3).

2.1 Classical characteristic vectors

If we have just one linear partial differential equation (LPDE)

$$P(x, \partial)(u) = \left(\sum_{\beta} p_{\beta}(x) \partial^{\beta} \right) (u) = v$$

⁸Introduced by M. Sato. See http://en.wikipedia.org/wiki/Mikio_Sato

⁹Mathematics Subject Classification 2000 (MSC2000): 32C38 Sheaves of differential operators and their modules, D-modules [See also 14F10, 16S32, 35A27, 58J15].

with analytic coefficients $p_\beta(x)$ in some open subset $U \subset \mathbb{R}^n$, a vector $\xi_0 \in \mathbb{R}^n$ is called *characteristic* for P at $x_0 \in U$ if $\sigma(P)(x_0, \xi_0) = 0$ and the set of all such ξ_0 is called the *characteristic variety* of the operator P (or of the equation $P(u) = v$) at $x_0 \in U$ and is denoted by $\text{Char}_{x_0}(P)$. Notice that here, in contrast to some textbooks, the zero vector could be characteristic. More generally, the *characteristic variety* of the operator P is by definition the set

$$\text{Char}(P) = \{(x_0, \xi_0) \in U \times \mathbb{R}^n \mid \sigma(P)(x_0, \xi_0) = 0\}.$$

Assume $\text{ord}(P) \geq 1$, then P is said to be *elliptic* at x_0 if P has no nonzero characteristic vectors at x_0 (i.e. $\text{Char}_{x_0}(P) \subset \{0\}$) and it is said to be *elliptic* on U if $\text{Char}(P) \subset U \times \{0\}$.

The *Laplace operator* $\sum_{i=1}^n \partial_i^2$ is elliptic on \mathbb{R}^n . The characteristic variety of the *wave operator* $P = \partial_1^2 - \sum_{i=2}^n \partial_i^2$ is nothing but the hyperquadric defined in $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ by the equation $\xi_1^2 - \sum_{i=2}^n \xi_i^2 = 0$.

Characteristic vectors are important in the study of singularities of solutions as can be seen in any classical book on Differential Equations.

To define the principal symbol and the characteristic vectors for a system (5) of linear differential equations in many variables is more involved and in general the naive approach of simply considering the principal symbols of the equations turns out to be unsatisfactory (see Example 2). We will use *graded ideals* and Gröbner bases for LDOs (see Subsections 2.2 and 2.3) to define and to compute the *characteristic variety* of a general LPDS.

2.2 Gröbner bases for rings of differential operators

The definition and construction of Gröbner bases for polynomial rings can be adapted to the case of rings of linear differential operators [11, 15], see also [70].

Let $P = P(x, \partial) = \sum_{\beta \in \mathbb{N}^n} p_\beta(x) \partial^\beta$ be a differential operator in A_n . The operator P can be rewritten as

$$P = \sum_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} x^\alpha \partial^\beta$$

just by considering the polynomial p_β as $p_\beta(x) = \sum_\alpha p_{\alpha\beta} x^\alpha$, with $p_{\alpha\beta} \in \mathbb{C}$.

Let us fix a monomial order \prec on \mathbb{N}^{2n} . We call *privileged exponent* with respect to \prec of a nonzero operator P –and we denote it by $\exp_\prec(P)$ – the maximum $(\alpha, \beta) \in \mathbb{N}^{2n}$ such that $p_{\alpha\beta} \neq 0$. We will write simply $\exp(P)$ if no confusion is possible. The equality $\exp(PQ) = \exp(P) + \exp(Q)$ is satisfied for all nonzero $P, Q \in A_n$.

If I is a nonzero ideal in A_n , we denote (as in the polynomial case) by $E_\prec(I)$ (or simply $E(I)$) the set of privileged exponents of the nonzero elements in I . Since $E(I) + \mathbb{N}^{2n} = E(I)$ there exists a finite subset $G \subset I$ such that $E(I)$ is generated by $\{\exp(P) \mid P \in G\}$ (see Subsection 1.2).

Definition 2 Let $I \subset A_n$ be a nonzero ideal. A finite subset $G = \{P_1, \dots, P_r\} \subset I$ such that $E(I)$ is generated by $\{\exp(P_i) \mid i = 1, \dots, m\}$, is called a *Gröbner basis* of I with respect to the fixed monomial order \prec .

A Division Theorem (analogous to Theorem 2) can be proved for elements in A_n (see [11, 15]) and as a consequence, each Gröbner basis of I is a generating system of I and in particular the ring A_n is left-Noetherian.

If the ideal I is principal and generated by an operator P then $E(I)$ is the hyper-quadrant generated by $\exp(P)$ in \mathbb{N}^{2n} : one has $E(I) = \exp(P) + \mathbb{N}^{2n}$.

The Buchberger's algorithm for polynomials can be adapted to the ring of differential operators [11, 15], see also [70]. Considering as input a monomial order \prec in \mathbb{N}^{2n} and a finite set $\mathcal{F} = \{P_1, \dots, P_m\}$ of differential operators, one can compute a Gröbner basis, with respect to \prec , of the ideal $I \subset A_n$ generated by \mathcal{F} . So, one can also compute a finite set of generators of the subset $E(I) \subset \mathbb{N}^{2n}$ (see Subsection 1.2).

The Division Theorem and the theory of Gröbner basis can be extended for submodules of free modules A_n^m for any m or more generally for submodules of \mathcal{D}_n^m [15]. Here \mathcal{D}_n denotes the ring $\text{Diff}(\mathbb{C}\{x\})$ of LDOs with coefficients in the convergent power series ring. Moreover, Division Theorem and Gröbner basis can be also considered, in a straightforward way, for right ideals (or more generally for right submodules of a free module A_n^m or \mathcal{D}_n^m). In particular, A_n (resp. \mathcal{D}_n) is a right-Noetherian ring and so actually a Noetherian ring.

2.3 Graded ideal, characteristic variety and dimension.

Assume $I \subset A_n$ is a ideal (e.g. the ideal generated by operators P_1, \dots, P_m in the system (7)). The graded ideal $\text{gr}(I)$ associated with I is defined as the ideal in $\mathbb{C}[x, \xi]$ generated by the set of principal symbols $\{\sigma(P) \mid P \in I\}$. Notice that $\text{gr}(I)$ is a homogeneous polynomial ideal with respect to the (ξ) -degree.

If $I = A_n P$ is the principal ideal generated by P then $\text{gr}(I)$ is also principal in $\mathbb{C}[x, \xi]$ and it is generated by $\sigma(P)$.

Definition 3 *The characteristic variety of the quotient A_n -module A_n/I (or of the system defined by I) -denoted by $\text{Char}(A_n/I)$, is by definition the affine algebraic variety defined in \mathbb{C}^{2n} by the ideal $\text{gr}(I) \subset \mathbb{C}[x, \xi]$.*

If $I = A_n P$ is a principal ideal then the characteristic variety of A_n/I coincides with the classical characteristic variety of P (see Subsection 2.1). We will omit here, because it is more involved, the definition of the characteristic variety $\text{Char}(M)$ of any finitely generated A_n -module M (see e.g. [24]) which is an affine algebraic subvariety of \mathbb{C}^{2n} .

Definition 4 *The singular locus of a finitely generated A_n -module M is the Zariski closure of the image of $\text{Char}(M) \setminus \mathbb{C}^n \times \{0\}$ under the projection $\pi : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$, $\pi(a, b) = a$.*

In general, if I is generated by a family P_1, \dots, P_m , the ideal $\text{gr}(I)$ could be strictly bigger than the ideal generated by $\sigma(P_1), \dots, \sigma(P_m)$ ¹⁰. This is analogous to a common situation in Algebraic Geometry. Let $Z = \mathcal{V}_{\mathbb{C}}(J) \subset \mathbb{C}^n$

¹⁰See Example 2.

be the algebraic set defined by a polynomial ideal $J \subset \mathbb{C}[x]$ and assume J is generated by polynomials f_1, \dots, f_m . Assume $0 \in \mathcal{V}_{\mathbb{C}}(J)$. The *tangent cone* to Z at 0 is by definition the algebraic set $C = \mathcal{V}_{\mathbb{C}}(\text{in}(J))$ where $\text{in}(J) \subset \mathbb{C}[x]$ is the ideal generated by the family $\{\text{in}(f) \mid f \in J\}$. Here the *initial form* $\text{in}(f)$ of a polynomial f is the homogeneous component of lowest degree in f (i.e. the sum of the monomials of minimal degree in f). In general the ideal $\langle \text{in}(f_1), \dots, \text{in}(f_m) \rangle$ is strictly contained in $\text{in}(J)$.

Gröbner basis theory in A_n can be used to calculate $\text{gr}(I)$ ¹¹. Namely, if P_1, \dots, P_ℓ is a Gröbner basis of I ¹² then $\sigma(P_1), \dots, \sigma(P_\ell)$ generate $\text{gr}(I)$ and so these principal symbols define the characteristic variety of A_n/I ; see [11], [15], [70].

Example 2 If $I = A_2(P_1, P_2)$ with $P_1 = x_1\partial_1 + x_2\partial_2$ and $P_2 = x_1\partial_2 + x_2^2\partial_1$ then $\text{gr}(I) = \langle \xi_1, \xi_2 \rangle$ that is strictly bigger than $\langle \sigma(P_1), \sigma(P_2) \rangle = \langle x_1\xi_1 + x_2\xi_2, x_1\xi_2 + x_2^2\xi_1 \rangle$.

The following Macaulay 2 script can be used to compute generators of the graded ideal $\text{gr}(I)$. The corresponding Macaulay 2 command is called `charIdeal`. We need `D-modules.m2` package to this end (see [35]). Input lines in Macaulay are denoted by `i1`, `i2`, ... while the corresponding output lines are `o1`, `o2`, ...

The command `R=QQ[x,y]` defines the ring R to be the polynomial ring in the variables x , y and with rational coefficients. The command `W=makeWA R` defines the ring W to be the Weyl algebra of order 2 with coefficients in R .

```
Macaulay 2, version 0.9.2 --Copyright 1993-2001, D. R. Grayson and
M. E. Stillman --Singular-Factory 1.3b, copyright 1993-2001, G.-M.
Greuel, et al. --Singular-Libfac 0.3.2, copyright 1996-2001, M.
Messollen
```

```
i1 : R=QQ[x,y]
i2 : load "D-modules.m2"
i3 : W=makeWA R
i4 : P1=x*dx+y*dy,P2=x*dy+y^2*dx
o4 = (x*dx + y*dy, y^2*dx + x*dy)
i5 : I=ideal(P1,P2)
o5 = ideal (x*dx + y*dy, y^2*dx + x*dy)
i6 : charIdeal I
o6 = ideal (dy, dx)
```

¹¹Analogous to the commutative case: we use a (special) Gröbner basis of the polynomial ideal J to compute $\text{in}(J)$, see e.g. [49, Cor. 6.2.25].

¹²With respect to a monomial ordering compatible with the (ξ) -degree.

```

o6 : Ideal of QQ [x, y, dx, dy]
i7 : J=ideal(dx,dy)
o7 = ideal (dx, dy)
o7 : Ideal of W
i8 : J==I
o8 = true

```

Input line i4 defines the operators P1, P2 generating the ideal I (the corresponding definition in Macaulay is the input line i5.

The computation of the input line i6: charIdeal I gives the ideal o6: ideal (dy, dx). Notice that as remarked by Macaulay output o6 : Ideal of QQ [x, y, dx, dy] the ideal given by o6: ideal (dy, dx) is in fact an ideal of the ring QQ [x, y, dx, dy] which is considered to be a commutative polynomial ring while W is the Weyl algebra of order 2.

In fact, the last part of the script (from i7 to o8) proves that the ideal I equals the ideal $A_2(\partial_1, \partial_2)$. We are using here $x = x_1, y = x_2$.

In the Weyl algebra W the expressions dx, dy stand for ∂_1 and ∂_2 while in QQ [x, y, dx, dy] they stand for ξ_1 and ξ_2 respectively.

The previous computation can be also made by hand although they are not completely obvious.

If $I = A_2(P_1, P_2)$ as in Example 2 we have proven that $\text{gr}(I) = \langle \xi_1, \xi_2 \rangle$ and then the equality $\text{Char}(A_2/I) = \mathbb{C}^2 \times \{(0, 0)\}$.

Let's see another example using Macaulay 2.

Example 3 *The following Macaulay 2 script computes $\text{gr}(J)$ for $J = A_2(Q_1, Q_2)$ and $Q_1 = \partial_1^2 - \partial_2, Q_2 = x_1\partial_1 + 2x_2\partial_2$.*

```

i2 : R=QQ[x,y]
i3 : W2=makeWA R
i4 : Q1=dx^2-dy,Q2=x*dx+2*y*dy
o4 = (dx^2 - dy, x*dx + 2y*dy)
o4 : Sequence
i5 : J = ideal (Q1,Q2)
o5 = ideal (dx^2 - dy, x*dx + 2y*dy)
o5 : Ideal of W2
i6 : charIdeal J
o6 = ideal (dx^2 , x*dx + 2y*dy)
o6 : Ideal of QQ [x, y, dx, dy]

```

The input $J = \text{ideal}(Q1, Q2)$ defines the ideal J of the Weyl algebra W generated by the linear differential operators $Q1, Q2$. Then the input `i6 : charIdeal J` computes the graded ideal $\text{gr}(J)$. Then $\text{gr}(J)$ is generated by the polynomials $\xi_1^2, x_1\xi_1 + 2x_2\xi_2$ and the characteristic variety $\text{Char}(A_2/I)$ is the union of the two planes $\xi_1 = x_2 = 0$ and $\xi_1 = \xi_2 = 0$ in \mathbb{C}^4 .

By definition the *dimension* of a finitely generated nonzero A_n -module M , denoted by $\dim(M)$, is the dimension¹³ of its characteristic variety $\dim(\text{vchar}(M))$ viewed as an algebraic variety in \mathbb{C}^{2n} . The modules A_2/I and A_2/J of Examples 2 and 3 have both dimension 2 since their characteristic varieties are, in the first case, the plane $\mathbb{C}^2 \times 0$ in \mathbb{C}^4 and the union of the planes $\xi_1 = x_2 = 0$ and $\xi_1 = \xi_2 = 0$ (again in \mathbb{C}^4) in the second case.

A fundamental result due to I.N. Bernstein [8] says that if $M \neq 0$ then $\dim(M) \geq n$.

If $M = A_n/I$ (and more generally if M is a quotient of a free A_n -module) the dimension of M can be computed using Gröbner basis in A_n . To this end we first notice that $\dim(A_n/I) = \dim \text{Char}(A_n/I)$ if the Krull dimension of the quotient ring $\mathbb{C}[x, \xi]/\text{gr}(I)$ (see e.g. [10, Chap. 8]). We first compute a system of generators of $\text{gr}(I)$ –assuming that a system of generators of I is given– and then, applying again Gröbner basis computation, this time in the polynomial ring $\mathbb{C}[x, \xi]$, we compute the Krull dimension of $\mathbb{C}[x, \xi]/\text{gr}(I)$ ¹⁴.

Definition 5 A finitely generated A_n -module M is said to be holonomic (or a holonomic system) if either $M = (0)$ or M is nonzero and $\dim(M) = n$.

Holonomic systems generalize the classical notion of maximally overdetermined systems (see [46]). The previous examples A_2/I and A_2/J are holonomic.

Remark 2 If $K = A_n P$ is the principal ideal generated by $P \in A_n$ and the quotient $M = A_n/K$ is non zero then M is holonomic if and only if $n = 1$. In fact $\text{gr}(K)$ is just generated by the principal symbol $\sigma(P) \in \mathbb{C}[x, \xi]$ and the characteristic variety $\text{Char}(M)$ is the hypersurface defined by the polynomial $\sigma(P)(x, \xi)$ in \mathbb{C}^{2n} . So $\dim(M) = 2n - 1$ and $\dim(M) = n$ if and only if $n = 1$.

Let $I \subset A_n$ be an ideal. We define, following [70], the *holonomic rank* of the ideal I as

$$\text{rank}(I) = \dim_{\mathbb{C}(x)} \frac{\mathbb{C}(x)[\xi]}{\mathbb{C}(x)[\xi]/\text{gr}(I)}$$

where $\mathbb{C}(x)$ is the field of rational functions and $\text{gr}(I) \subset \mathbb{C}[x, \xi]$ is the graded ideal associated with I .

It is easy to see that if A_n/I is holonomic then $\text{rank}(I) < +\infty$ and that the converse is not true (see e.g. [70, Prop. 1.4.9]).

¹³We are considering here the Krull dimension (see e.g. [10, Chap. 8]).

¹⁴Actually only a single Gröbner basis of I is needed if the monomial ordering is suitably chosen.

2.4 Solutions of a system. Homological algebra over A_n

We start by recalling some basics of homological algebra.

A (cochain) complex (V_\bullet, d_\bullet) of \mathbb{C} -vector spaces is a collection of \mathbb{C} -vector spaces V_i , $i \in \mathbb{Z}$, and \mathbb{C} -linear maps $d_i : V_i \rightarrow V_{i+1}$ such that $d_{i+1} \circ d_i = 0$ for all i (or equivalently if $\text{im}(d_{i-1}) \subset \text{ker}(d_i)$ for all i). We make analogous definition for complexes of A_n -modules and morphisms of A_n -modules.

Given a complex (V_\bullet, d_\bullet) its cohomology in degree i (or its i -th cohomology group) is the quotient $\text{ker}(d_i)/\text{im}(d_{i-1})$.

Definition 6 *A complex (V_\bullet, d_\bullet) is exact in degree i if $\text{im}(d_{i-1}) = \text{ker}(d_i)$ and the complex is said to be exact (or an exact sequence) if it is exact in degree i for all i .*

Let us consider a LPDE

$$P(u) = P(x, \partial)(u) = 0$$

and suppose we want to compute its solutions in some function space \mathcal{F} where A_n acts naturally. The space \mathcal{F} should be then an A_n -module. Typical examples of such spaces are function spaces (continuous functions, real analytic or holomorphic functions, polynomial functions ...), spaces of multivalued functions and spaces of distributions.

A central question in the theory of Differential Equations is to compute the solution set

$$\text{Sol}(P; \mathcal{F}) = \{u \in \mathcal{F} \text{ such that } P(u) = 0\}.$$

Actually, this solution vector space is nothing but the kernel of the morphism $P() : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$ defined by the action of P on \mathcal{F} . So one has $\text{Sol}(P; \mathcal{F}) = \text{ker}(P())$. Notice that as A_n is non commutative $P()$ is only a \mathbb{C} -linear map.

Let us denote $M = A_n/A_nP$. We will see that $\text{Sol}(P; \mathcal{F})$ is isomorphic, as vector space, to $\text{Hom}_{A_n}(M, \mathcal{F})$ the space of A_n -morphisms from M to \mathcal{F} ¹⁵.

Each solution $u \in \text{Sol}(P; \mathcal{F})$ determines the morphism (of A_n -modules)

$$\phi_u : M \rightarrow \mathcal{F}$$

defined by $\phi_u(\bar{Q}) = Q(u)$ for $Q \in A_n$, where \bar{Q} stands for the class of Q modulo the ideal A_nP . On the other hand, each A_n -module morphism

$$\phi : M \rightarrow \mathcal{F}$$

(i.e. each $\phi \in \text{Hom}_{A_n}(M, \mathcal{F})$) determines the solution

$$u_\phi = \phi(\bar{1})$$

¹⁵Someway, an analogous situation happens when solving a system \mathcal{S} of complex polynomial equations with only finitely many solutions (that is the set $\mathcal{V}_{\mathbb{C}}(\mathcal{S})$ is finite). There exists a natural bijection from $\mathcal{V}_{\mathbb{C}}(\mathcal{S})$ to $\text{Hom}_{\mathbb{C}}(\mathbb{C}[x]/(\mathcal{S}), \mathbb{C})$ defined by attaching to each solution $\underline{a} \in \mathcal{V}_{\mathbb{C}}(\mathcal{S})$ the corresponding evaluation homomorphism $\overline{g(x)} \mapsto g(\underline{a})$

since $P(\phi(\bar{1})) = \phi(P \cdot \bar{1}) = \phi(\bar{0}) = 0$. So the solution space $Sol(P; \mathcal{F})$ is naturally isomorphic to the vector space $\text{Hom}_{A_n}(M, \mathcal{F})$.

Similarly we can prove that if $I \subset A_n$ is an ideal then the solution space

$$Sol(I; \mathcal{F}) = \{u \in \mathcal{F} \mid P(u) = 0, \forall P \in I\}$$

is naturally isomorphic, as a vector space, to $\text{Hom}_{A_n}(A_n/I, \mathcal{F})$.

Let us return to the case of the complete equation $P(u) = v$ where v is in \mathcal{F} . The obstruction to solve this equation is given by the vector space $\mathcal{F}/P(\mathcal{F}) = \text{coker}(P())$ that is the cokernel of the map $P() : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$. That is, for a fixed $v \in \mathcal{F}$, the equation $P(u) = v$ has a solution u in \mathcal{F} if and only if $v \in P(\mathcal{F})$ or equivalently if and only if the class of v in the quotient space $\mathcal{F}/P(\mathcal{F})$ is zero.

More concretely, the complete equation has a solution u for each v if and only if $\mathcal{F} = P(\mathcal{F})$ (or equivalently if and only if $\mathcal{F}/P(\mathcal{F}) = \text{coker}(P()) = (0)$). This situation can be interpreted by using a little bit of homological algebra. This homological algebra interpretation can be also considered for more general LPDS.

We will see that $\text{coker}(P())$ is naturally isomorphic, as vector space, to $\text{Ext}_{A_n}^1(M, \mathcal{F})$ the first extension group (in this case it is a vector space) of M by \mathcal{F} (see e.g. [68]).

First of all, let us consider the natural exact sequence of modules and morphisms

$$0 \rightarrow A_n \xrightarrow{\phi_P} A_n \xrightarrow{\pi} M = \frac{A_n}{A_n P} \rightarrow 0. \quad (10)$$

where the morphism ϕ_P is defined by $\phi_P(Q) = QP$ for $Q \in A_n$ and π is the natural projection. Then by truncating the previous one we consider the complex (of A_n -modules)

$$0 \rightarrow A_n \xrightarrow{\phi_P} A_n \rightarrow 0. \quad (11)$$

We then apply to this complex the functor $\text{Hom}_{A_n}(-, \mathcal{F})$ and we get the complex of vector spaces

$$0 \rightarrow \text{Hom}_{A_n}(A_n, \mathcal{F}) \xrightarrow{(\phi_P)^*} \text{Hom}_{A_n}(A_n, \mathcal{F}) \rightarrow 0 \quad (12)$$

where $(\phi_P)^*(\eta) = \eta \circ \phi_P$ for $\eta \in \text{Hom}_{A_n}(A_n, \mathcal{F})$.

The vector space $\text{Hom}_{A_n}(A_n, \mathcal{F})$ has a natural structure of A_n -module which is in fact isomorphic to \mathcal{F} . This is a general fact in ring theory: to each morphism $\eta \in \text{Hom}_{A_n}(A_n, \mathcal{F})$ we associate $\eta(1) \in \mathcal{F}$ and this correspondence is in fact an isomorphism. Under this isomorphism the last complex can be read as

$$0 \rightarrow \mathcal{F} \xrightarrow{P()} \mathcal{F} \rightarrow 0$$

Homological algebra tells us that we have natural isomorphisms of vector spaces $\ker(P()) \simeq \text{Hom}_{A_n}(M, \mathcal{F}) = \text{Ext}_{A_n}^0(M, \mathcal{F})$ and $\mathcal{F}/P(\mathcal{F}) = \text{coker}(P()) \simeq \text{Ext}_{A_n}^1(M, \mathcal{F})$.

Then the vector spaces $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathcal{F})$ for $i = 0, 1$ are called the *solutions spaces* of the equation $P(u) = 0$ (or more precisely of the A_n -module $M = A_n/A_nP$) in \mathcal{F} .

In order to generalize this notion of *solutions spaces* for general systems as (5) we have to consider the corresponding A_n -module $M = A_n^m/\text{im}(\mathcal{P})$ where $\text{im}(\mathcal{P})$ is the submodule of A_n^m generated by the rows of the matrix $(P_{ij})_{ij}$ (appearing in System (5)). By definition the *solutions spaces* of M in \mathcal{F} are the vector spaces $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathcal{F})$ for $i = 0, \dots, n$ defined using the right derived functors (see e.g. [68]) of the functor $\text{Hom}_{A_n}(-, \mathcal{F})$.

By definition $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathcal{F})$ is the i -th cohomology group of the complex $\text{Hom}_{A_n}(\mathcal{L}_\bullet, \mathcal{F})$ where \mathcal{L}_\bullet is a *free resolution* (see Subsection 2.5) of M .

For general systems as (5) and general function spaces \mathcal{F} there is no algorithm to compute the solution spaces $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathcal{F})$. Nevertheless, if $M = A_n/I$ is holonomic (see Definition 5) and $\mathcal{F} = \mathbb{C}[x]$ there are algorithms computing a basis of $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathcal{F})$ for all i , ([61], [81]).

As a consequence of Cauchy Theorem (see e.g. [70, Th. 1.4.19]) we have

$$\dim_{\mathbb{C}} \text{Sol}(I; \mathcal{O}_{\mathbb{C}^n}(U)) = \text{rank}(I)$$

where the system A_n/I is holonomic and $\mathcal{O}_{\mathbb{C}^n}(U)$ stands for the space of holomorphic functions on an open set $U \subset \mathbb{C}^n \setminus Z$ where Z is the singular locus of A_n/I (see Definition 4). This result could be compared with Theorem 3.

2.5 Free resolutions

The exact sequence (10) is an example of free resolution of the A_n -module A_n/A_nP .

A free resolution of a finitely generated A_n -module M is an exact sequence

$$0 \rightarrow \mathcal{L}_{-r} \xrightarrow{\phi_{-r}} \mathcal{L}_{-r+1} \xrightarrow{\phi_{-r+1}} \dots \xrightarrow{\phi_{-2}} \mathcal{L}_{-1} \xrightarrow{\phi_{-1}} \mathcal{L}_0 \xrightarrow{\phi_0} M \rightarrow 0$$

where each \mathcal{L}_i is a free A_n -module of finite rank.

As an application of Gröbner basis theory over the ring A_n one can compute (see e.g. [15], [70]), starting from a system of generators $\{P_1, \dots, P_\ell\}$ of an ideal $I \subset A_n$, a system of generators of the *first syzygy module* of $\{P_1, \dots, P_\ell\}$ which is by definition the module

$$\text{Syz}(P_1, \dots, P_\ell) := \{(Q_1, \dots, Q_\ell) \in A_n^\ell \mid \sum_i Q_i P_i = 0\}.$$

In fact one can also compute $\text{Syz}(\underline{P}_1, \dots, \underline{P}_\ell)$ for any finite set of vectors \underline{P}_i in A_n^m , for any m .

Given $M = A_n^m/\langle \underline{P}_1, \dots, \underline{P}_\ell \rangle$ one can consider the exact sequence

$$A_n^\ell \xrightarrow{\phi} A_n^m \rightarrow M \rightarrow 0$$

where ϕ is the map defined by the matrix whose rows are the vectors \underline{P}_i and we have, by definition of syzygy, $\ker(\phi) = \text{Syz}(\underline{P}_1, \dots, \underline{P}_\ell) \subset A_n^\ell$.

One can compute, using Gröbner bases, a system of generators $\{\underline{S}_1, \dots, \underline{S}_k\}$ of $\ker(\phi)$. This leads to a new exact sequence

$$A_n^k \xrightarrow{\psi} A_n^\ell \xrightarrow{\phi} A_n^m \longrightarrow M \longrightarrow 0$$

where $\psi(e_i) = \underline{S}_i$, e_i being the i -th canonical vector in A_n^k .

Let us rename $r_0 = m, r_1 = \ell, r_2 = k, \phi_1 = \phi, \phi_2 = \psi$. Restarting with the matrix ϕ_2 one can compute, for each $i \geq 0$ and by applying the same process, a finite sequence of modules and morphisms

$$A_n^{r_p} \xrightarrow{\phi_p} \dots \longrightarrow A_n^{r_2} \xrightarrow{\phi_2} A_n^{r_1} \xrightarrow{\phi_1} A_n^{r_0} \longrightarrow M \rightarrow 0$$

which is exact (see Definition 6).

One can apply the same argument as in the Syzygies Hilbert Theorem (see e.g. [26, Chap. 6], [15]) to assure that there is an integer p such that $\ker(\phi_p) = 0$. This process gives up a finite *free resolution* of the given A_n -module M .

Finite free resolutions are useful to study finitely generated A_n -modules. As we have seen before, given a system as (5) we consider the associated module $M = A_n^m / \langle \underline{P}_1, \dots, \underline{P}_\ell \rangle$ where $\underline{P}_i = (P_{i1}, \dots, P_{im})$. The polynomial solutions (u_1, \dots, u_m) of System (5) can be simply viewed as the vector space $\text{Hom}_{A_n}(M, \mathbb{C}[x])$.

If we apply the functor $\text{Hom}_{A_n}(-, \mathbb{C}[x])$ to the complex

$$0 \longrightarrow A_n^{r_p} \xrightarrow{\phi_p} \dots \longrightarrow A_n^{r_2} \xrightarrow{\phi_2} A_n^{r_1} \xrightarrow{\phi_1} A_n^{r_0} \longrightarrow 0$$

and then we compute the cohomology of the resulting complex we get the vector spaces $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathbb{C}[x])$ for $i = 1, \dots, n$ which are considered as the *higher order* polynomial solutions of System (5).

As we have said before, if M is holonomic (see Definition 5) one can effectively compute, using Gröbner bases, a generating system for the vector spaces $\text{Ext}_{A_n}^i(M, \mathbb{C}[x])$ for any i (see [61], [81]). Since these algorithms uses Gröbner bases computation in the Weyl algebra A_n they have a high complexity.

Syzygies and finite free resolutions are fundamental tools in Computational Algebraic Analysis. They are intensively used in the computation of the four operations –localization, local cohomology, restriction and integration, on differential systems [60] (see also [70]) and in the computation of truncated holomorphic solutions of holonomic systems as shown in [78].

3 More applications of Gröbner bases for LDOs

Gröbner basis theory is also used in many other situations related to A_n -modules. Let's just quote its use in the computational study of *projective*¹⁶ A_n -modules. In [30] there is an algorithm to compute a basis of a projective

¹⁶A module M is projective provided there is a module N such that the direct sum $M \oplus N$ is a free module.

module over A_n , if it has one (see [76] for a proof that every projective A_n -module with rank greater than 1 is free). These results are also related to [53] and [43].

In Subsections 3.1 and 3.2 we will sketch two more areas of \mathcal{D} -modules where the use of computational methods give significant insights into the theory.

3.1 Regular singular points. Regular \mathcal{D} -modules and slopes

Let us consider a single equation

$$P(t, \frac{d}{dt})(u) = \left(p_0(t) + p_1(t) \frac{d}{dt} + \cdots + p_m(t) \frac{d^m}{dt^m} \right) (u) = 0 \quad (13)$$

of order $m \geq 1$ defined on an open disc $\Delta \subset \mathbb{C}$ centered at the origin and where each coefficient $p_i(t)$ is a holomorphic function on Δ .

A point $t_0 \in \Delta$ is said to be *singular* for $P(u) = 0$ if $p_m(t_0) = 0$ ¹⁷. Assume the origin $0 \in \Delta$ is the only singular point of $P(u) = 0$ on Δ . In particular the characteristic variety of this linear differential equation is

$$\text{Char}(P) = \{0\} \times \mathbb{C} \cup \Delta \times \{0\}.$$

By a classical result of Ordinary Linear Differential Equations (cf. [34, 410-411]) each multivalued holomorphic solution φ of $P(u) = 0$ on $\Delta^* = \Delta \setminus \{0\}$, can be written as

$$\varphi = \sum_{i=1}^{\ell} c_i(t) t^{\alpha_i} \log^{\nu_i} t$$

where $\alpha_i \in \mathbb{C}$, $\nu_i \in \mathbb{N}$ and $c_i(t)$ is a uniform analytic function on Δ^* .

The equation $P(u) = 0$ has a *regular singular point* at 0 if for all solutions φ multivalued on Δ^* the corresponding analytic functions $c_i(t)$ are meromorphic for all i . If some of the $c_i(t)$ has an essential singularity at 0 then the origin is said to be an *irregular singular point* for $P(u) = 0$.

The Maple command `DEtools[formal_sol]` gives the formal series solutions –up to any order, of a given ordinary differential equation at a fixed point. This is the Maple script for the Euler equation which has an irregular singular point at 0.

```
> Eu:=t^2*Dt+1;
                2
Eu := t  Dt + 1
> sol:=formal_sol(Eu,[Dt,t],S,'terms'=12,t=0);
                12
sol := [[exp(1/S) (1 + O(S )), S = t]]
```

¹⁷This notion agrees with the one of singular locus given in Definition 4.

The classical Gauss hypergeometric equation

$$\left(t(1-t) \frac{d^2}{dt^2} + (\gamma - t(\alpha + \beta + 1)) \frac{d}{dt} - \alpha\beta \right) (u) = 0$$

where $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$, has two *regular singular* points in the complex line \mathbb{C} , namely the points $0, 1 \in \mathbb{C}$.

The following Maple script gives the two linearly independent formal solutions –up to order 4, of the given Gauss hypergeometric equation for $\alpha = \beta = 1$ and $\gamma = i \in \mathbb{C}$

```
> with(DEtools):
> L:=t*(1-t)*Dt^2+(I-3*t)*Dt-1;
      2
      L := t (1 - t) Dt + (I - 3 t) Dt - 1
> sol:=formal_sol(L,[Dt,t],T,'terms'=4,t=0);
      2      3      4
      sol := [[1 - I T + (-1 - I) T + (-9/5 - 3/5 I) T + 0(T), T = t],
      (1 - I)
      [T (1 + (2 - I) T + (5/2 - 5/2 I) T + (5/2 - 25/6 I) T + 0(T)), T = t]]
```

From the very definition it is difficult to see whether a given point is regular singular. The fundamental theorem of Fuchs (cf. [44, 15.3]) states that the origin is a regular singular point for Equation (13) if and only if the order of the pole at 0 of the meromorphic function $p_i(t)/p_m(t)$ is less or equal than $m - i$, $i = 0, \dots, m$. This theorem can be restated in terms of the so-called *Newton* or *Newton-Puiseux* polygon of the equation $P(u) = 0$ (see e.g. [51]).

The notion of regular singular point for a differential system as (5) in higher dimension –dated only on the last 70’s, is due to several authors, especially to Z. Mebkhout, M. Kashiwara and T. Kawai. This definition of regular singular point of a differential system in dimension n is highly abstract and uses derived categories and functors.

To this end Z. Mebkhout introduced the *irregularity sheaves* of a holonomic module along hypersurfaces [58].

In [51] the notion of *slope* of a differential system at a point in \mathbb{C}^n is introduced. In [52] the authors gave an equivalent definition of regular singular point (or more precisely of *regular* system) that can be effectively computed starting with a system of differential equations and using again Gröbner basis theory, provides the system is holonomic. The key point is the computation of the *slopes* of a holonomic A_n -module. A holonomic module M is said to be *regular* at a point in \mathbb{C}^n if M has no slopes at that point. The computation of the slopes can be done by the so-called ACG algorithm [4]. This algorithm uses Gröbner bases as a fundamental tool. The works [17], [39, 40], [73] are related to the computation of the slopes for hypergeometric systems¹⁸.

¹⁸For the theory of hypergeometric systems see [33]. The book [70] deals with the computational treatment of this kind of differential systems.

3.2 Bernstein-Sato polynomial

Let $f \in \mathbb{C}[x] = \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ nonconstant and let s be a new variable.

Consider the Weyl algebra $A_n(\mathbb{C}(s))$ over the field $\mathbb{C}(s)$ of rational functions in s and the $A_n(\mathbb{C}(s))$ -module $N = \mathbb{C}(s)[x_1, \dots, x_n, f^{-1}] \cdot f^s$, where f^s is considered as a formal symbol and the $A_n(\mathbb{C}(s))$ -action on N is defined by

$$\partial_j(f^s) = s f^{-1} \frac{\partial f}{\partial x_j} f^s$$

the product rule and the formal differentiation of rational functions.

Let $M = A_n(\mathbb{C}(s))f^s$ be the submodule of N generated by f^s . We can see in [8] that both modules are holonomic (see Definition 5) over $A_n(\mathbb{C}(s))$, and that M has finite length. This means that there exists $Q(s) \in A_n(\mathbb{C}(s))$ such that $f^s = Q(s)(f^{s+1})$. If $b(s)$ is the common multiple of the denominators of the coefficients of $Q(s)$ and $P(s) = b(s)Q(s)$ we have

$$P(s)(f^{s+1}) = b(s)f^s \tag{14}$$

where $P(s) \in A_n[s]$ and $b(s)$ are not uniquely defined by the functional equation (14).

The set of all $b(s)$ satisfying Equation (14) for some $P(s)$ is a nonzero ideal in $\mathbb{C}[s]$ whose (monic) generator $b_f(s)$ is called *the Bernstein-Sato polynomial of f* or *the b -function of f* . It was introduced by I.N. Bernstein [8] and by M. Sato [71].

As an example of Bernstein-Sato polynomial, taking $f = \sum_{i=1}^n x_i^2$ one has the identity

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) (f^{s+1}) = 4b(s)f^s,$$

where $b(s) = (s+1)(s+\frac{n}{2})$. It is not difficult to prove that in this case $b(s) = b_f(s)$.

The Bernstein-Sato polynomial $b_f(s)$ is always multiple of $(s+1)$ and equality holds if f is smooth. M. Kashiwara proved that its roots are always rational and negative [47]. B. Malgrange pointed out the connection between the singularity structure of $f^{-1}(0)$ and the roots of $b_f(s)$ [56].

Until [59] there were not an algorithm for the computation of $b_f(s)$. We can use **Risa-Asir** [62] for example, to compute the b -function of a polynomial.

Another interesting information included in $b_f(s)$ is related to the module structure of the *localization* of the ring $\mathbb{C}[x]$ by f , noted by $\mathbb{C}[x]_f$, that is, the ring of rational functions with poles along f (that is along the hypersurface $f=0$)

$$\mathbb{C}[x]_f = \left\{ \frac{g}{f^m} \mid g \in \mathbb{C}[x], m \in \mathbb{N} \right\}.$$

$\mathbb{C}[x]_f$ is a $\mathbb{C}[x]$ -module and an A_n -module in a natural way. Of course if f is not a constant $\mathbb{C}[x]_f$ is not a finitely generated $\mathbb{C}[x]$ -module. We have an analogous situation in the *analytic* setting, i.e. starting from $f \in \mathbb{C}\{x\}$, the

ring of convergent power series around 0, and considering $\mathbb{C}\{x\}_f$, the ring of (germs of) meromorphic functions with poles along f , as a \mathcal{D}_n -module, where $\mathcal{D}_n = \text{Diff}(\mathbb{C}\{x\})$ is the ring of linear differential operators over $\mathbb{C}\{x\}$ (see Remark 1).

One of the main results in \mathcal{D} -module theory is the following theorem:

Theorem 4 ([8]) *For any $f \in \mathbb{C}[x]$, the A_n -module $\mathbb{C}[x]_f$ is finitely generated. More precisely, there exists a positive integer number α such that $\mathbb{C}[x]_f$ is the A_n -module generated by the rational function $\frac{1}{f^\alpha}$.*

The analogous version for the analytic case was proved in [9]. The main ingredient in the proof of Theorem 4 is the existence of the b -function attached to f and the positive integer postulated is $-\alpha_0$ if α_0 is the smallest integer root of $b_f(s)$. So we have the following problem:

Problem.- Let $f \in \mathbb{C}[x]$. Give a presentation of $\mathbb{C}[x]_f$ as a finitely generated A_n -module.

A way to solve the problem is to:

Compute $b_f(s)$ and α_0 .

As $\mathbb{C}[x]_f \equiv A_n f^{\alpha_0}$, compute a system of generators of the annihilating ideal

$$\text{ann}_{A_n}(f^{\alpha_0}) = \{P \in A_n \mid P(f^{\alpha_0}) = 0\},$$

and then

$$\mathbb{C}[x]_f \simeq \frac{A_n}{\text{ann}_{A_n}(f^{\alpha_0})}.$$

There are algorithms based in Gröbner bases for LDOs to obtain $b_f(s)$ (see [59, 60]) and the annihilating ideal of a power of f [60]. Unfortunately, many interesting examples can not be treated due to the size of the intermediate computations. Nonetheless, it is possible to obtain the so called *logarithmic* \mathcal{D} -modules that are natural approximations to $\mathbb{C}[x]_f$.

3.3 Logarithmic \mathcal{D} -modules

The starting point of this approach are the works of K. Saito [69] about *logarithmic vector fields* and *logarithmic differential forms*. After [13] the connection with \mathcal{D} -modules of this subject became very important. Here we will treat only the global (algebraic) case of logarithmic A_n -modules to simplify.

Let $D \subset \mathbb{C}^n$ be a hypersurface —usually called a *divisor* in algebraic geometry— defined by $f \in \mathbb{C}[x]$. A vector field with polynomial coefficients

$$\delta = \sum_{i=1}^n a_i(x) \partial_i$$

is said to be *logarithmic* with respect to D if $\delta(f) = af$ for some $a \in \mathbb{C}[x]$. The $\mathbb{C}[x]$ -module of logarithmic vector fields is denoted by $\text{Der}(-\log D)$.

We will consider some ideals in A_n associated to any divisor D :

$$I^{\log D} = A_n \text{Der}(-\log D)$$

$$\tilde{I}^{\log D} = A_n \left\{ \delta + \frac{\delta(f)}{f} \mid \delta \in \text{Der}(-\log D) \right\}.$$

Notice that if $\delta(f) = af$ then $(\delta + a)(1/f) = 0$ and so $\delta + \frac{\delta(f)}{f} \in \text{ann}_{A_n}(1/f)$ and

$$\tilde{I}^{\log D} \subset \text{ann}_{A_n}(1/f).$$

We will write $\tilde{I}^{\log D} = \text{ann}_{A_n}^{(1)}(1/f)$ to emphasize that this ideal is generated by order 1 LDOs.

It is important to notice that $\text{Der}(-\log D)$ can be computed –using commutative Gröbner bases– since

$$\text{Der}(-\log D) \simeq \text{Syz}\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}, f\right)$$

a natural isomorphism sending each logarithmic vector field $\delta = \sum_i a_i(x)\partial_i$ to the syzygy $(a_1(x), \dots, a_n(x), -\frac{\delta(f)}{f})$.

In this context we have the following problem:

Open Problem.- If $D \subset \mathbb{C}^n$ is the divisor defined by a polynomial $f \in \mathbb{C}[x]$, when

$$\text{ann}_{A_n}^{(1)}(1/f) = \text{ann}_{A_n}(1/f) ?$$

That is, when the annihilating ideal of $1/f$ is generated by elements of order 1?

Some advances have been obtained for the analytical case in [18], [19], [20], [21] and [79] for the family of *free* divisors i.e. for the divisors for which $\text{Der}(-\log D)$ is a free $\mathbb{C}[x]$ -module ([69]).

This open problem is intimately related to the *Logarithmic Comparison Theorem (LCT)* (see e.g. [16], [19], [14]): we say that LCT holds for a divisor $D \subset \mathbb{C}^n$ if the cohomology of the complement of D in \mathbb{C}^n is computed by the complex of logarithmic differential forms. It has been conjectured in [79] that LCT holds for D if and only if $\text{ann}_{A_n}^{(1)}(1/f) = \text{ann}_{A_n}(1/f)$ (at least locally).

Conclusions

We have described some applications of Computer Algebra methods to the algebraic study of systems of linear partial differential equations. Using Gröbner basis theory for linear differential operators we have described how to calculate the characteristic variety of such systems and how to construct a free resolution of the associated module. Free resolutions are used in particular in the computation of the *solution spaces* of the given system. Computational methods are also used to study the *irregularity* of a system, the Bernstein-Sato polynomials and the so-called logarithmic \mathcal{D} -modules.

The use of Gröbner basis theory in this context is motivated by analogous situations in Commutative Algebra and Algebraic Geometry.

Acknowledgements

I would like to thank my colleagues J. Gago, M.I. Hartillo and J.M. Ucha for their help in writing this paper. I have freely used some parts of their works and ideas. I would also thank one referee for his comments, suggestions and criticisms. My especial thanks to S.R. for her intangible support.

References

- [1] S.S. Abhyankar. *Algebraic geometry for scientists and engineers*. Mathematical Surveys and Monographs, 35. AMS, 1990.
- [2] W.W. Adams and Ph. Loustanaunau. *An introduction to Gröbner bases*. Graduate Studies in Mathematics, 3. American Mathematical Society, 1994.
- [3] *Artificial intelligence and symbolic mathematical computing*. Lecture Notes in Comput. Sci., 737, Springer-Verlag, 1993.
- [4] A. Assi, F. J. Castro-Jiménez and J.M. Granger. *How to calculate the slopes of a \mathcal{D} -module*. *Compositio Math.*, 104:107–123, 1996.
- [5] M.F. Atiyah and I.G. MacDonald *Introduction to commutative algebra*. Addison-Wesley, 1969
- [6] J. Backelin. BERGMAN. Available at <http://servus.math.su.se/bergman/>, 1998.
- [7] D. Bayer and D. Mumford. *What can be computed in algebraic geometry?*. *Sympos. Math.*, XXXIV, Cambridge Univ. Press, 1993.
- [8] I.N. Bernstein. *The analytic continuation of generalized functions with respect to a parameter*. *Functional Anal. Appl.*, 6:273-285, 1972.
- [9] J.E. Björk. *Rings of differential operators*. North-Holland, 1979.
- [10] N. Bourbaki. *Algèbre commutative*, Chaps. 8 et 9. Masson, Paris, 1983.
- [11] J. Briançon and Ph. Maisonobe. *Idéaux de germes d'opérateurs différentiels à une variable*. *Enseign. Math.* (2) 30(1-2):7–38, 1984.
- [12] B. Buchberger. *Ein algorithmisches Kriterium für die Lösbarkeit eines algebraischen Gleichungssystems*. *Aequationes Math.*, 4:374–383, 1970.
- [13] F.J. Calderón-Moreno. *Logarithmic Differential Operators and Logarithmic De Rham Complexes relative to a Free Divisor*. *Ann. Sci. École Norm. Sup.* (4), 32:701–714, 1999.
- [14] F.J. Calderón Moreno and L. Narváez Macarro. *Dualité et comparaison sur les complexes de de Rham logarithmiques par rapport aux diviseurs libres*. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)* 55 (2005), no. 1, 47–75.

- [15] F.J. Castro. *Théorème de division pour les opérateurs différentiels et calcul des multiplicités*. Thèse de 3ème cycle, Paris VII, 1984.
- [16] F.J. Castro-Jiménez, D. Mond and L. Narváez-Macarro. *Cohomology of the complement of a free divisor*. Trans. Amer. Math. Soc. 348(8):3037–3049, 1996.
- [17] F.J. Castro-Jiménez and N. Takayama. *Singularities of a hypergeometric System Associated with a Monomial Curve*. Trans. Amer. Math. Soc. 355(9): 3761–3775, (2003).
- [18] F.J. Castro-Jiménez and J.M. Ucha-Enríquez. *Explicit comparison theorems for \mathcal{D} -modules*. J. Symbolic Comput., 32(6):677–685 (2001).
- [19] F. J. Castro-Jiménez and J. M. Ucha Enríquez. *Free Divisors and Duality for \mathcal{D} -modules*. Proc. Steklov Inst. of Math., 238:88–96. 2002.
- [20] F.J. Castro-Jiménez and J.M. Ucha-Enríquez. *Testing the Logarithmic Comparison Theorem for Spencer free divisors*. Experiment. Math., 13(4):441-449, 2004.
- [21] F.J. Castro-Jiménez and J.M. Ucha-Enríquez. *Logarithmic Comparison Theorem and some Euler homogeneous free divisors*. Proc. Amer. Math. Soc., 133:1417–1422, (2005).
- [22] CoCoA Team. CoCoA: *a system for doing Computations in Commutative Algebra*. Available at <http://cocoa.dima.unige.it>.
- [23] *Computer algebra handbook. Foundations. Applications. Systems*. Edited by J. Grabmeier, E. Kaltofen and V. Weispfenning, Springer-Verlag, 2003.
- [24] S.C. Couthino. *A primer of Algebraic D -modules*. London Math. Soc. Student Texts 33, Cambridge (UK), 1995.
- [25] D. Cox, J. Little and D. O’Shea. *Ideals, varieties, and algorithms*. UTM, Springer-Verlag, 1997.
- [26] D. Cox, J. Little and D. O’Shea. *Using algebraic geometry*. GTM, 185, Springer-Verlag, 2005.
- [27] H. Derksen and G. Kemper. *Computational invariant theory*. Invariant Theory and Algebraic Transformation Groups, I, Encyclopaedia of Mathematical Sciences, 130. Springer-Verlag, 2002.
- [28] I.Z. Emiris and B. Mourrain. *Computer algebra methods for studying and computing molecular conformations*. Algorithmica, 25 (2-3):372–402, 1999.
- [29] J.C. Faugère, P. Gianni, D. Lazard, and T. Mora. *Efficient computation of zero-dimensional Gröbner bases by change of ordering*. J. Symbolic Comput. 16 (1993), no. 4, 329–344.

- [30] J. Gago-Vargas. *Bases for projective $A_n(k)$ -modules*. J. Symbolic Comput., 36(6):845–853, 2003.
- [31] A. Galligo. *Algorithmes de calcul de bases standard*. Prépublication Univ. Nice. 9, (1983).
- [32] The GAP Group. *GAP – Groups, Algorithms, and Programming, Version 4.4*. 2005, (<http://www.gap-system.org>).
- [33] I.M. Gel'fand, A.V. Zelevinskiĭ and M.M. Kapranov. *Hypergeometric functions and toric varieties*. Funktsional. Anal. i Prilozhen. 23(2): 12–26, (1989). Correction in ibid, 27(4): 91, (1993).
- [34] E. Goursat. *Cours d'Analyse Mathématique, Vol.II*. Gauthier-Villars, 1933.
- [35] D.R. Grayson and M.E. Stillman. Macaulay2, a software system for research in algebraic geometry. Available at <http://www.math.uiuc.edu/Macaulay2/>. (D-modules package by A. Leykin and H. Tsai).
- [36] G.-M. Greuel, G. Pfister and H. Schönemann. SINGULAR 3.0. A Computer Algebra System for Polynomial Computations. Centre for Computer Algebra, University of Kaiserslautern (2005). <http://www.singular.uni-kl.de>.
- [37] C. Guyon. *Motion planning problem: parametrized inputs and drift problem*. Math. Comput. Simulation 42(4-6):693–706, 1996,
- [38] *Handbook of Computer Aided Geometric Design*. Edited by G. Farin, J. Hoschek and M.-S. Kim. North-Holland, 2002.
- [39] M.I. Hartillo-Hermoso. *Slopes of hypergeometric systems of codimension one*. Rev. Mat. Iberoamericana. 19(2): 455–466 (2003).
- [40] M.I. Hartillo-Hermoso. *Irregular hypergeometric systems associated with a singular monomial curve*. Trans. Amer. Math. Soc. 357(11): 4633–4646 (2005).
- [41] R. Hartshorne. *Algebraic geometry*. Graduate Texts in Mathematics, No. 52. Springer-Verlag, New York-Heidelberg, 1977.
- [42] G. Hermann. *Die Frage der endlich vielen Schritte in der Theorie der Polynomideale*. Math. Ann. 95:736-788, 1926.
- [43] A. Hillebrand and W. Schmale. *Towards an effective version of a theorem of Stafford*. Effective methods in rings of differential operators. J. Symbolic Comput. 32 (2001), no. 6, 699–716.
- [44] E.L. Ince. *Ordinary Differential Equations*. Dover, 1956.

- [45] M. Janet. *Sur les systèmes d'équations aux dérivées partielles*. Journal de Math. Pures et Appliquées (8) 3, 65-151, 1920.
- [46] M. Kashiwara. *Algebraic study of systems of partial differential equations*. Mém. Soc. Math. France (N.S.) No. 63 (1995), xiv+72 pp. (Translation by J.-P. Schneiders and A. D'Agnolo of ["An algebraic study of systems of partial differential equations" (Japanese), Master's Thesis, Univ. Tokyo, Tokyo, 1971]).
- [47] M. Kashiwara. *B-functions and holonomic systems. Rationality of roots of B-functions*. Invent. Math. 38 (1976/77), no. 1, 33–53.
- [48] E. R. Kolchin. *Differential Algebra and Algebraic Groups*. Academic Press, 1973.
- [49] M. Kreuzer and L. Robbiano. *Computational commutative algebra, 2*. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- [50] E. Kunz. *Introduction to commutative algebra and algebraic geometry*. Birkhäuser Boston Inc., 1985.
- [51] Y. Laurent. *Polygone de Newton et b-fonctions pour les modules micro-différentiels*. Ann. Sci. École Norm. Sup. (4) 20 (3):391–441, 1987.
- [52] Y. Laurent and Z. Mebkhout. *Pentes algébriques et pentes analytiques d'un \mathcal{D} -module*. Ann. Sci. École Norm. Sup. (4) 32 (1):39–69, 1999.
- [53] A. Leykin. *Algorithmic proofs of two theorems of Stafford*. J. Symbolic Comput. 38 (2004), no. 6, 1535–1550.
- [54] M. Lejeune-Jalabert. *Effectivité des calculs polynomiaux*. Cours de DEA, Université de Grenoble, 1984.
- [55] B. Malgrange. *Sur les systèmes différentiels à coefficients constants*. (French) 1963 Les Équations aux Dérivées Partielles (Paris, 1962) pp. 113–122 Editions du CNRS (see also Séminaire Leray (1961-62)).
- [56] B. Malgrange. *Polynômes de Bernstein-Sato et cohomologie évanescence*. Astérisque, 101-102, p. 243–267, Soc. Math. France, Paris, 1983.
- [57] E.W. Mayr and A. Meyer. *The complexity of the word problems for commutative semigroups and polynomial ideals*. Adv. in Math., 46, 3:305–329, 1982.
- [58] Z. Mebkhout. *Le théorème de comparaison entre cohomologies de de Rham d'une variété algébrique complexe et le théorème d'existence de Riemann*. Publications Mathématiques de l'IHÉS, 69:47-89, 1989.
- [59] T. Oaku. *An algorithm of computing b-functions*. Duke Math. J. 87:115–132, 1997.

- [60] T. Oaku and N. Takayama. *Algorithms for D -modules—restriction, tensor product, localization, and local cohomology groups*. J. Pure Appl. Algebra, 156 (2-3):267–308, 2001.
- [61] T. Oaku, N. Takayama and H. Tsai. *Polynomial and rational solutions of holonomic systems*. J. Pure Appl. Algebra, 164(1-2):199–220, 2001.
- [62] OpenXM, a project to integrate mathematical software systems, 1998–2005, <http://www.openxm.org>.
- [63] G. Pistone, E. Riccomagno and H. P. Wynn. *Computational commutative algebra in discrete statistics*. Contemp. Math., 287:267–282, 2001.
- [64] D. Quillen. *Formal Properties of Over-Determined Systems of Linear Partial Differential Equations*. PhD Thesis, Harvard University, 1964.
- [65] D. Quillen. *Projective modules over polynomial rings*. Invent. Math., 36:167–171, 1976.
- [66] Ch. Riquier. *Les systèmes d'équations aux dérivées partielles*. Gauthier-Villars, 1910.
- [67] J. F. Ritt. *Differential Algebra*. American Mathematical Society, 1950.
- [68] J. Rotman. *An introduction to Homological Algebra*. Academic Press, 1979.
- [69] K. Saito. *Theory of logarithmic differential forms and logarithmic vector fields*. J. Fac. Sci. Univ. Tokyo 27(2):256-291, 1980.
- [70] M. Saito, B. Sturmfels and N. Takayama. *Gröbner deformations of hypergeometric differential equations*. Springer-Verlag, 2000.
- [71] M. Sato. *Theory of prehomogeneous vector spaces (algebraic part)*—the English translation of Sato's lecture from Shintani's note. Notes by T. Shintani. Translated from the Japanese by M. Muro. Nagoya Math. J. 120 (1990), 1–34.
- [72] M. Sato, T. Kawai and M. Kashiwara. *Microfunctions and pseudo-differential equations*. Hyperfunctions and pseudo-differential equations (Proc. Conf., Katata, 1971; dedicated to the memory of André Martineau), pp. 265–529. Lecture Notes in Math., Vol. 287, Springer, Berlin, 1973.
- [73] M. Schulze and U. Walther. *Slopes of hypergeometric systems along coordinates varieties*. [arXiv:math/0608668](https://arxiv.org/abs/math/0608668).
- [74] J.H. Silverman and J. Tate. *Rational points on elliptic curves*. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, New York, 1992.
- [75] D. C. Spencer. *Overdetermined systems of partial differential equations*. Bull. Amer. Math. Soc., 1965, vol. 75, p. 1-114.

- [76] J.T. Stafford. *Module structure of Weyl algebras*. J. London Math. Soc., 18:429–442, 1977.
- [77] B. Sturmfels. *Solving systems of polynomial equations*. American Mathematical Society, 2002.
- [78] N. Takayama. *An Algorithm for Constructing Cohomological Series Solutions of Holonomic Systems*. Arxiv preprint math.AG/0309378, 2003.
- [79] T. Torrelli. *On meromorphic functions defined by a differential system of order 1*. Bull. Soc. Math. France 132(4):591–612, 2004.
- [80] W. Trinks. *Über B. Buchbergers Verfahren, Systeme algebraischer Gleichungen zu lösen*. J. Number Theory 10 (1978), no. 4, 475-488.
- [81] H. Tsai and U. Walther. *Computing homomorphisms between holonomic D -modules*. J. Symbolic Comput. 32(6):597–617, 2001.
- [82] W.T. Wu. *Mathematics mechanization. Mechanical geometry theorem-proving, mechanical geometry problem-solving and polynomial equations-solving*. Mathematics and its Applications, 489, Kluwer, 2000.
- [83] D.C. Youla and P.F. Pickel. *The Quillen-Suslin theorem and the structure of n -dimensional elementary polynomial matrices*. IEEE Trans. Circuits and Systems, 31(6):513–518, 1984.

MATRICES INVERSAS GENERALIZADAS

NÉSTOR THOME

Instituto de Matemática Multidisciplinar
Universidad Politécnica de Valencia

`njthome@mat.upv.es`

Resumen

En este trabajo se repasan algunos tipos de matrices inversas generalizadas. Se presentan unos cuantos campos de la Matemática Aplicada y de la Ingeniería en los que estas inversas han sido aplicadas y se hace una reseña de diversos problemas que han sido estudiados. El trabajo termina con un listado de líneas de investigación actuales en el área.

Palabras clave: *Matrices, inversas generalizadas, Moore-Penrose, inversa de grupo, Drazin*

Clasificación por materias AMS: *15A09*

1 Introducción

Las distintas generalizaciones del concepto de matriz inversa permiten resolver diversos problemas como, por ejemplo, el cálculo de soluciones aproximadas de un sistema incompatible a través de la útil teoría de mínimos cuadrados (véanse [38] y las citas [1477, 1478] de [13]); la caracterización de la existencia de las soluciones de un sistema compatible y la expresión de su forma general (véase [11]); la expresión de los estimadores mínimo-cuadráticos cuando la matriz del modelo lineal no es de rango completo (véanse [8] y las citas [82, 738] de [13]) y también cuestiones relacionadas con las cadenas de Markov (véanse las citas [1044, 1110, 1282] de [13]), entre otros. Por su parte, también permiten dar solución al problema modelizado por Leslie sobre crecimiento de población (véase la cita [316] de [13]). En el contexto de la teoría de ecuaciones diferenciales y de la teoría de control, se pueden resolver ecuaciones diferenciales matriciales singulares y sistemas singulares de control en los que aparecen matrices que carecen de inversa ordinaria. Estos problemas, que pertenecen a los campos de ecuaciones diferenciales lineales y sistemas lineales de control, respectivamente,

Fecha de recepción: 04/09/2006. Aceptado (en forma revisada): 15/07/2007.

Este trabajo ha sido subvencionado por el Proyecto DGI número MTM2007-64477.

se resuelven utilizando la teoría de inversas generalizadas (véanse [33, 34] y la cita [316] de [13]). Otro problema en esta última área es el de encontrar una función de control que regule cierto proceso manipulando los estados para que la salida sea la deseada y que además se minimice una función de coste prefijada. Este tipo de problemas pertenece al campo del control óptimo y también pueden ser resueltos por medio de inversas generalizadas (véase la cita [329] de [13]) y, siguiendo en este sentido, podríamos indicar muchos más problemas que se resuelven aplicando la teoría de inversas generalizadas como se indicará más adelante.

A partir de una serie de propiedades evidentes que cumple la inversa de una matriz cuadrada (en caso de tener garantizada su existencia) parece lógico intentar generalizar el concepto de matriz inversa al caso de una matriz no invertible, buscando matrices que verifiquen propiedades análogas a las mencionadas. Dependiendo del número de estas condiciones que se exija que cumpla la matriz en cuestión, se obtienen diferentes generalizaciones del concepto de inversa.

En este trabajo, se introducen los conceptos básicos de la teoría de inversas generalizadas en la sección 2. En la sección 3 se hace un pequeño análisis, sólo unas pinceladas, de los diversos problemas que han ido surgiendo en este campo de la Matemática Aplicada en relación a las inversas generalizadas. Por último, quedarán evidenciadas algunas líneas de investigación de este campo en la sección 4. El lector interesado podrá profundizar el tema consultando la bibliografía de la segunda edición del libro de Adi Ben-Israel y Thomas N.E. Greville titulado “Generalized Inverses: Theory and Applications” que se encuentra en la página <http://rutcor.rutgers.edu/pub/bisrael/GI.pdf> donde aparecen más de dos mil citas de trabajos de esta área.

2 Conceptos básicos en la teoría de inversas generalizadas

Es conocido que una matriz cuadrada $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ es invertible o no singular si cumple que existe otra matriz $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tal que $AB = BA = I_n$, donde I_n representa la matriz identidad de tamaño $n \times n$.

En Álgebra Matricial básica se demuestra que es suficiente que sea válida una de las condiciones $AB = I_n$ o bien $BA = I_n$, para concluir que B es la inversa de A y se denota por A^{-1} , puesto que en caso de existir, es única. También se dan una serie de condiciones que caracterizan la invertibilidad de una matriz cuadrada en función de: su determinante, sistemas de ecuaciones lineales, la forma escalonada reducida, teoría de espacios vectoriales, teoría de aplicaciones lineales, el rango, teoría espectral, teoría de espacios euclídeos y teoría de mínimos cuadrados. Más precisamente, para $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, las siguientes condiciones son equivalentes:

- (a) A es invertible.
- (b) A tiene determinante no nulo.
- (c) La ecuación matricial $Ax = 0$ tiene sólo la solución trivial $x = 0$.

- (d) La ecuación matricial $Ax = b$ tiene solución única para cada $b \in \mathbb{C}^n$.
- (e) La forma escalonada reducida de A es I_n .
- (f) A es producto de matrices elementales.
- (g) Las filas (o columnas) de A son linealmente independientes.
- (h) Las filas (o columnas) de A generan \mathbb{C}^n .
- (i) Las filas (o columnas) de A forman una base de \mathbb{C}^n .
- (j) La dimensión del espacio nulo de A es cero.
- (k) La dimensión del espacio imagen de A es n .
- (l) La aplicación lineal $T : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ definida por $T(x) = Ax$ es un isomorfismo entre espacios vectoriales sobre el cuerpo \mathbb{C} .
- (m) 0 no es valor propio de A .
- (n) El subespacio ortogonal del espacio nulo de A es \mathbb{C}^n .
- (o) El subespacio ortogonal del espacio fila de A es $\{0\}$.
- (p) AA^* (o A^*A) es invertible (donde A^* denota la traspuesta conjugada de A).

Se trata de generalizar la idea de matriz inversa al caso de una matriz rectangular, o bien de una matriz cuadrada singular. El estudio de algunos tipos de inversas generalizadas está motivado por su utilización, entre otras áreas, en:

Estadística: Sirven para:

- Obtener la expresión de los estimadores mínimo-cuadráticos para el caso en que A tenga rango menor que $\min\{m, n\}$ (véanse [11] y la cita [1570] de [13]).
- Resolver problemas de regresión lineal (véase [11]).

Ingeniería Electrónica: Se utilizan en redes eléctricas (véase [13]).

Programación Lineal: Permiten resolver problemas con coeficientes enteros (véanse [11, 13]).

Análisis Numérico: Sirven para la resolución de sistemas de ecuaciones (lineales y no lineales) (véanse [13, 17]).

Ingenierías en general: Sirven para resolver problemas de aproximación por mínimos cuadrados.

Las inversas laterales de una matriz pueden definirse para matrices rectangulares y corresponden a un primer tipo de generalización de la inversa ordinaria.

Sea $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$. Se llama *inversa a izquierda* (resp. *derecha*) de A a cualquier matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times m}$ tal que $XA = I_n$ (resp. $AX = I_m$). Pueden no existir inversas laterales, o bien puede existir más de una inversa lateral de una matriz rectangular dada. Más aún, es conocido que existe una inversa a izquierda de la matriz A si y sólo si A tiene rango n . En este caso, la solución general de $XA = I_n$ es $X = (A^*VA)^{-1}A^*V$, donde V es cualquier matriz de tamaño $m \times m$ tal que A^*VA tenga el mismo rango que A . Un resultado totalmente análogo es válido para inversas laterales a derecha, es decir, existe una inversa a derecha de la matriz A si y sólo si A tiene rango m y en este caso la solución general de $AX = I_m$ es $X = VA^*(AVA^*)^{-1}$ donde V es cualquier matriz de tamaño $n \times n$ tal que AVA^* tenga el mismo rango que A . Se concluye pues que las inversas laterales, en caso de existir, podrían ser infinitas.

Sea $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$. La matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times m}$ se dice que es una $\{1\}$ -inversa de A si satisface la ecuación matricial:

$$(1) \quad AXA = A$$

y es una $\{2\}$ -inversa de A si satisface la ecuación matricial:

$$(2) \quad XAX = X.$$

La matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times m}$ se dice que es la *inversa de Moore-Penrose* de A si satisface las cuatro ecuaciones matriciales siguientes:

$$(1) \quad AXA = A,$$

$$(2) \quad XAX = X,$$

$$(3) \quad (AX)^* = AX, \text{ es decir } AX \text{ es Hermítica,}$$

$$(4) \quad (XA)^* = XA, \text{ es decir } XA \text{ es Hermítica.}$$

Si $m = n$, la matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ se dice que es la *inversa de grupo* de $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ si satisface las tres ecuaciones matriciales siguientes:

$$(1) \quad AXA = A,$$

$$(2) \quad XAX = X,$$

$$(5) \quad AX = XA.$$

Si $m = n$, al menor entero no negativo k tal que A^{k+1} tenga el mismo rango que A^k se le llama el *índice* de la matriz A y se denotará por $\text{ind}(A)$. En este caso, la matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ se dice que es la *inversa de Drazin* de A si satisface las tres ecuaciones matriciales siguientes:

- (2) $XAX = X$,
- (5) $AX = XA$,
- (6) $A^{k+1}X = A^k$, donde $k = \text{ind}(A)$.

En caso de existir la inversa ordinaria A^{-1} de una matriz cuadrada A , todas las inversas generalizadas coinciden con A^{-1} .

Además de existir siempre, las $\{1\}$ -inversas y las $\{2\}$ -inversas de una matriz dada A son infinitas, excepto que A sea invertible o bien que sea $A = O$ en el caso de las $\{2\}$ -inversas. La inversa de Moore-Penrose de A existe siempre, es única y se denotará por A^\dagger . Esta inversa generalizada es la más conocida por dar solución al problema de mínimos cuadrados. De hecho es conocido que el programa MATLAB permite resolver sistemas de ecuaciones lineales singulares calculando la inversa de Moore-Penrose mediante la descomposición en valores singulares de la matriz de coeficientes.

Para una matriz singular $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, las condiciones siguientes son equivalentes:

- (a) Existe una matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ que satisface las afirmaciones (1), (2) y (5) de la definición de inversa de grupo.
- (b) A^2 y A tienen en mismo rango.
- (c) $\text{ind}(A) = 1$.
- (d) El espacio vectorial \mathbb{C}^n es suma directa del espacio imagen de A y del espacio nulo de A .

Estas condiciones caracterizan pues la existencia de una inversa de grupo de A . Además, se puede probar que, si existe una matriz X en esas condiciones, es única, puede llamarse entonces la *inversa de grupo* de A , y se denotará por $A^\#$.

La inversa de Drazin es una generalización de la inversa de grupo¹ y, por supuesto, de la inversa ordinaria². La inversa de Drazin de toda matriz cuadrada existe siempre, es única y se denotará por A^D .

Si bien sólo se han comentado algunos tipos de inversas generalizadas, cabe indicar que existen otra serie de ellas como la inversa generalizada de Bott-Duffin, la inversa $A_{S,T}^{(2)}$, inversas con pesos, etc. (véanse [13, 47]).

Dentro de la teoría de matrices inversas generalizadas es necesario, en una primera instancia, conocer la existencia y unicidad de las mismas, como se ha indicado hasta ahora. Luego, contar con una serie de propiedades y representaciones, que en muchas ocasiones, vienen dadas tras alguna factorización de la matriz original A . Por su parte, el resto de la teoría de inversas generalizadas trata de extender las propiedades válidas para las inversas ordinarias a cada caso de inversa generalizada. Por ejemplo, se analizan cuestiones vinculadas con:

¹En este caso, $\text{ind}(A) = 1$.

²En este caso, $\text{ind}(A) = 0$. A veces se habla de inversa de grupo de A cuando se tiene $\text{ind}(A) \in \{0, 1\}$.

la inversas generalizadas de matrices por bloques (véanse [9, 10, 20]).

la ley del orden inverso para las diferentes inversas generalizadas (véanse [19, 46, 52]).

problemas relativos a perturbaciones sobre matrices y las expresiones de sus inversas generalizadas (véanse [31, 45, 47, 48, 49, 53, 54] y las citas [1073, 2023] de [13]).

la relación entre las inversas generalizadas y matrices especiales (Hermíticas, normales, EP^3 , etc.) (véanse [25, 37]).

inversas generalizadas de combinaciones lineales de ciertos tipos de matrices, etc. (véanse [3, 4, 5, 15]).

3 Algunos estudios realizados en la teoría de inversas generalizadas

Esta teoría se originó cuando, en 1935, E.H. Moore introdujo el concepto de inversa generalizada, definiéndola a partir de ciertos proyectores. Esta definición, olvidada por un tiempo, volvió a cobrar importancia cuando en el año 1955 R. Penrose planteó el mismo problema cambiando el enfoque. Esta vez se trataba de un análisis desde el punto de vista algebraico a partir de cuatro ecuaciones matriciales. Aparentemente, Penrose no estaba en conocimiento de la definición que Moore había dado. El primer hecho importante en relación con este tipo de inversas generalizadas fue la demostración de la equivalencia de ambas definiciones (véase la cita [329] de [13]). A partir de este momento pasó a conocerse con el nombre de *inversa de Moore–Penrose*. Luego, de manera natural, fueron apareciendo el resto de inversas generalizadas como soluciones a problemas concretos.

Muchos autores trabajaron con las $\{1\}$ -inversas, también llamadas *inversas generalizadas* (Rao (véase la cita [1557] de [13])), *pseudoinversas* (Sheffield (véase la cita [1690] de [13])) o simplemente *inversas* (Bjerhammar (véase [18])). Se dieron una gran cantidad de representaciones y utilidades de la misma. También fueron de gran importancia las $\{1, 2\}$ -inversas. Estas se encuentran en la literatura con los nombres de *semi-inversas* (Frame (véase la cita [619] de [13])), *inversas recíprocas* (Bjerhammar) e *inversas generalizadas reflexivas* (Rohde (véase la cita [1617] de [13])). Como un caso particular dentro de las $\{1, 2\}$ -inversas, se encuentra la denominada *inversa de grupo*⁴ (Erdelyi (véase la cita [566] de [13])).

La inversa de Moore–Penrose llamada así por A. Ben–Israel y A. Charnes (véase la cita [158] de [13]), suele aparecer también como *recíproca general* (Moore (véase la cita [1364] de [13]), *inversa generalizada* (Penrose (véase la cita [1477] de [13])), o *pseudoinversa* (Greville (véase la cita [705] de [13])).

Como se ha indicado, es conocido que tanto las $\{1\}$ -inversas como las $\{1, 2\}$ -inversas de una matriz A existen siempre y es posible hallar infinitas matrices

³Una matriz $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ se llama *EP* si A y A^* tienen el mismo espacio imagen.

⁴En inglés se denomina *group inverse*.

que satisfagan esas condiciones salvo que se trate de matrices invertibles o de la matriz nula. Por otra parte, la inversa de Moore–Penrose y la *inversa de Drazin* (véase la cita [507] de [13]) de una matriz A , existen siempre y son únicas. Sin embargo, la inversa de grupo puede no existir, pero si existe también es única. En 1968, P. Robert dio condiciones necesarias y suficientes que caracterizan la existencia de la inversa de grupo de una matriz cuadrada A , extendiendo algunos de los resultados al caso de espacios vectoriales de dimensión infinita (véase la cita [1598] de [13]). También indicó una expresión para la inversa de grupo de una matriz cuadrada. A partir de esta expresión es posible extraer condiciones para determinar cuándo la inversa de grupo coincide con la inversa de Moore–Penrose. La técnica que utilizó para encontrar dicha expresión fue una factorización especial de la matriz A que se obtiene basándose en la definición de rango. Concretamente, si $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ es una matriz de rango $r > 0$ entonces existen dos matrices $M \in \mathbb{C}^{m \times r}$ y $N \in \mathbb{C}^{r \times n}$ ambas de rango r tales que $A = MN$. Además, para esta descomposición de rango completo de A resulta

$$A^\dagger = N^*(NN^*)^{-1}(M^*M)^{-1}M^* \quad \text{y} \quad A^\# = M(NM)^{-2}N.$$

Más tarde, en 1981, R.E. Hartwig extendió el método de Robert para calcular la inversa de Drazin. Hartwig dio un algoritmo que, además de calcular la inversa de Drazin de A , permite calcular su rango, su índice y la multiplicidad algebraica del valor propio 0.

Otro hecho importante relacionado con las inversas generalizadas es la invarianza respecto del rango, de los valores propios, de los valores singulares, etc., de ciertos productos en los que interviene algún tipo de inversa generalizada. En este aspecto, D. Carlson estudió la invarianza de algunos elementos que involucran cierta inversa generalizada, independientemente de la elección que se haga de la misma (véase la cita [345] de [13]). Hartwig también hizo un aporte a este tema en la cita [812] de [13], donde además de encontrar la $\{1, 2\}$ -inversa más general de una matriz con coeficientes en un anillo, caracterizó la invarianza de cierto producto de matrices. Siguiendo en esta misma línea, J.K. Baksalary en colaboración con varios autores analizó situaciones semejantes a esta última, como por ejemplo la caracterización de la invarianza de los valores propios y de la traza de ciertos productos de matrices en los que intervienen matrices inversas generalizadas, utilizando como argumentos condiciones geométricas sencillas derivadas del subespacio imagen o del subespacio nulo de las matrices (véanse [6, 7, 8, 35] y las citas [80, 82, 1234] de [13]).

En su trabajo “*The role of the group generalized inverse in the theory of finite Markov chains*”, C.D. Meyer, Jr. (véase la cita [1282] de [13]) hizo una importante contribución a la teoría de las inversas generalizadas mostrando su aplicación a las cadenas de Markov y continuando una idea propuesta por Decell y Odell en la cita [467] de [13] para la inversa de Moore–Penrose, pero aplicándola ahora al caso de la inversa de grupo. En esta ocasión, mostró que toda la información que es necesaria conocer sobre las cadenas de Markov viene dada a través de la inversa de grupo de la matriz $A = I - T$, donde T es la

matriz de transición de una cadena de Markov homogénea finita. El hecho de introducir la teoría de cadenas de Markov finitas en términos de la inversa de grupo $A^\#$ de una manera natural, da un importante aspecto práctico al tema de inversas generalizadas, además de impulsar el avance teórico del mismo teniendo la seguridad de su inminente aplicación.

Hartwig también estudió, conjuntamente con X. Chen en 1996 la inversa de grupo de una matriz triangular, no sólo para las matrices Toeplitz y diagonales, como ya había hecho Hartwig en 1976 (véase la cita [846] de [13]), sino que esta vez abordaron el caso general (véase la cita [831] de [13]). A tal efecto, dieron condiciones sobre los bloques en que puede particionarse una matriz, para asegurar la existencia de la inversa de grupo de una matriz triangular (sobre un cuerpo) necesitando introducir para su análisis un tipo de complemento de Schur especial definido sobre una matriz triangular. También en 1987, en Alabama, E.U.A., presentó un trabajo donde estudiaba la inversa de grupo de una matriz triangular por bloques, dando condiciones necesarias y suficientes para su existencia (véase la cita [831] de [13]).

En 1996, Y. Wei presentó una nueva caracterización de la inversa de Drazin y también una representación de la misma (véase la cita [1998] de [13]). Esta caracterización es una extensión del hecho conocido para la inversa ordinaria: la inversa ordinaria de una matriz $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ es la única matriz $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ que satisface la ecuación

$$\text{rango} \begin{bmatrix} A & I_n \\ I_n & X \end{bmatrix} = \text{rango}(A).$$

También se conocía un resultado análogo para la inversa de Moore–Penrose, dado por M. Fiedler y T. L. Markham en 1993, donde los autores muestran cómo hallar la inversa de Moore–Penrose utilizando una matriz auxiliar que se calcula mediante ciertas condiciones sobre productos y rangos de matrices (véase la cita [597] de [13]). La representación dada por Y. Wei no utiliza ni la “autoproyección” que usa U. G. Rothblum (véanse [42] y la cita [1630] de [13]) ni el paso al límite con que C.D. Meyer, Jr. lo resuelve en su trabajo (véase la cita [1281] de [13]). En 1994, J. Ji ya había presentado una expresión alternativa mediante un límite de la inversa de Drazin. Esta expresión le permitió dar una nueva demostración para un algoritmo finito que determina la inversa de Drazin y que previamente había introducido T.N.E. Greville en la cita [711] de [13]. Cabe aclarar que este algoritmo está basado en otro, atribuido a Leverrier y Faddeev, también conocido como algoritmo de Souriau–Frame.

En 1998, fue publicado otro trabajo de Y. Wei (véase la cita [1999] de [13]) en el cual un resultado similar dado en la cita [1998] de [13] por el mismo autor para la inversa de Drazin se establece ahora para las matrices inversas generalizadas $A_{T,S}^{(2)}$. Así, los demás resultados anteriormente mencionados pueden obtenerse como consecuencias inmediatas de este último. Una parte del estudio de la inversa $A_{T,S}^{(2)}$ puede verse en [50], donde se presentaron también expresiones límites para dicha inversa y métodos numéricos para calcularla, además de efectuar un breve análisis de la teoría de perturbación.

Cambiando las matrices identidades por matrices genéricas B y C en la ecuación de rango anterior, J. Groß resolvió el problema recíproco (i.e., encontró la forma de B y C adecuadas) de cuándo la inversa de Moore-Penrose de A satisface dicha ecuación (véase la cita [745] de [13]), N. Thome y Y. Wei lo hicieron para inversas de grupo (véase [44]) y D. S. Cvetkovic-Ilic para inversas de Drazin (véase [26]).

Por otro lado, en el campo de la teoría de redes eléctricas surgió de manera natural otra clase de inversa generalizada denominada *inversa de Bott-Duffin* (véase la cita [249] de [13]). Para poder asegurar su existencia debe existir la inversa ordinaria de otra matriz que denotaremos, por claridad, con la letra P (debido a que en ella intervienen proyectores). Ésto permite concluir que la inversa de Bott-Duffin no siempre existe y, este hecho de nuevo da pie para poder definir una serie de inversas que generalizan el concepto original de inversa de Bott-Duffin, considerando diferentes inversas generalizadas en lugar de la inversa ordinaria de P . A tal efecto, por ejemplo, C. Yonglin introdujo una inversa del tipo Bott-Duffin, pero de carácter más general, utilizando la inversa de Moore-Penrose P^\dagger en lugar de P^{-1} , y la denominó *inversa generalizada BD* de una matriz dada A (véase la cita [372] de [13]). Esta clase de matrices fueron utilizadas para resolver problemas de minimización cuadrática con condiciones establecidas por medio de igualdades. Como es bien sabido, estos problemas pertenecen al área de optimización.

Hay un gran número de artículos relacionados con las matrices inversas de Moore-Penrose. Por ejemplo, Bruening en 1989 presentó una nueva fórmula para calcular la inversa de Moore-Penrose de una matriz de rango completo A , a partir de combinaciones lineales en las que intervienen ciertas matrices adjuntas de la matriz A y los valores de ciertos determinantes (véase la cita [293] de [13]). Otras formas alternativas de cálculo habían aparecido, por ejemplo, en el excelente libro de A. Ben-Israel y T.N.E. Greville, publicado en el año 1971 (véase [13]), con una segunda edición en 2003. También en este libro se encuentra la forma de utilizar la inversa de Moore-Penrose para hallar la solución de mínimos cuadrados que fue dada originalmente por R. Penrose en (véase la cita [1478] de [13]). Concretamente, si $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ y $b \in \mathbb{C}^{m \times 1}$ no pertenece al espacio imagen de A entonces $A^\dagger b$ es la solución por mínimos cuadrados de norma mínima del sistema lineal incompatible $Ax = b$.

Cuatro años más tarde de la aparición de la primera edición del libro de Ben-Israel y Greville apareció otra obra de gran significado en la teoría de inversas generalizadas. Se trata de "*Generalized Inverses of Linear Transformations*" de S.L. Campbell y C.D. Meyer, Jr., autores cuyos trabajos han dejado huella en el sendero del Álgebra Matricial tanto por la diversidad de temas que han abarcado como por la calidad de sus trabajos (véase la cita [329] de [13]). En este libro presentan una serie de resultados que ya habían sido publicados previamente por los autores (véanse las citas [305, 316, 329, 330, 1275, 1281, 1282, 1290] de [13]), además de un amplio tratamiento del tema de las inversas generalizadas enfocado desde el punto de vista funcional.

A excepción de un resultado de Hartwig, todo lo dicho hasta el momento, es válido para matrices con elementos en un cuerpo, o más precisamente en

el cuerpo de los números reales o en el los complejos. Sin embargo, autores como M.C. Gouveia y R. Puystjens entre otros (véanse [28] y la cita [690] de [13]), han dado resultados sobre las inversas de grupo y sobre las inversas de Moore–Penrose de matrices con elementos en un dominio de integridad o más general aún, en el caso de un anillo. Resultados más recientes en esta área han sido obtenidos por M.C. Gouveia y R. Puystjens en [40] y un compendio de los resultados que hay hasta la actualidad han sido publicados en el libro “*The Theory of Generalized Inverses Over Commutative Rings*” (véase [41]).

Teniendo siempre en mente la idea de llevar a cabo objetivos aplicables en la práctica, R.B. Bapat estudió una gran multitud de propiedades de las inversas generalizadas y su aplicación a la inferencia estadística lineal. También, por ejemplo, en relación con la teoría de grafos, en 1997 calculó la inversa de Moore–Penrose de la matriz de incidencia de un árbol (véase la cita [95] de [13]). Bapat junto a A. Ben–Israel trabajaron también en lo relacionado con valores singulares y menores de rango máximo de inversas generalizadas (véase la cita [102] de [13]), utilizando una noción de volumen introducida anteriormente por el propio Ben–Israel en la cita [153] de [13].

Ya en 1971, N. Shinozaki, M. Sibuya y K. Tanabe incurrieron en el campo de los algoritmos numéricos. Calcularon la inversa de Moore–Penrose a través de métodos directos, y también hicieron una reseña de los métodos conocidos hasta ese momento y una comparación entre los mismos. Concluyeron que son numéricamente más estables aquellos métodos en los que aparecen factorizaciones de la matriz original (véase la cita [1696] de [13]). En los últimos años y con el auge que ha tenido la aplicación de la informática al cálculo numérico, y dentro de él a los métodos iterativos utilizados para resolver una gran diversidad de problemas, las inversas generalizadas han cobrado importancia en el diseño de tales métodos iterativos. Estos métodos permiten resolver sistemas de la forma $Ax = b$, donde A es una matriz invertible de tamaño $n \times n$ y x y b son dos vectores, ambos de tamaño $n \times 1$. Para ello, se expresa la matriz de coeficientes del sistema como $A = M - N$, donde la matriz M es invertible. En el caso en que el radio espectral de la matriz de iteración $M^{-1}N$ sea estrictamente menor que 1, se tiene garantizada la convergencia del método. Si la matriz A es singular, puede darse la posibilidad que la matriz M no sea invertible. Esto induce a considerar las diferentes inversas generalizadas de la matriz M en lugar de su inversa ordinaria. A través de este tipo de inversas se pueden dar condiciones para la convergencia del método, los cuales son similares a la que acabamos de mencionar para el caso en que la matriz A sea invertible (véase [50]). Continuando desde el punto de vista del cálculo numérico, Y. Wei analizó cómo solucionar sistemas singulares de la forma $Ax = b$ mediante la introducción de particiones que llamó particiones de índice (véase la cita [2001] de [13]). Estas particiones permiten utilizar la inversa de Drazin para obtener la solución del sistema planteado. En su trabajo desarrolla un método para construir dicho índice y además da algunos criterios de convergencia para el método propuesto.

También, en relación al cálculo numérico, las inversas generalizadas permitieron estudiar un conocido resultado debilitando sus hipótesis. En efecto,

permitieron debilitar las hipótesis requeridas en el método iterativo de Newton para el cálculo de raíces en el caso de ecuaciones no lineales. Para aplicar este método era imprescindible conocer que la matriz jacobiana fuese invertible, y a través de las inversas generalizadas esta condición pudo relajarse pidiendo tan sólo que dicha matriz satisfaga la condición de $\{2\}$ -inversa (véase [13]).

Por otra parte, continuando en el tema de métodos iterativos, vamos a considerar brevemente el llamado método de la hiperpotencia que fue originalmente introducido en 1933 por A. Ben-Israel en la cita [136] de [13] y se basa en un método de G. Schultz dado en [43]. Si bien Ben-Israel fue el primero en utilizarlo para calcular inversas generalizadas, M. Altman ya lo había utilizado para invertir un operador lineal acotado en un espacio de Hilbert (véase [1]). En lugar de generar todos los elementos de cierta sucesión, este método consiste en generar sólo algunos de sus elementos pero puede comprobarse que el comportamiento de las dos sucesiones es el mismo. Más adelante, fue estudiado por numerosos autores como Ben-Israel y Greville (véase [13]), Zhou (véase [55]), J.M. Garnet III, Ben-Israel y S.S. Yau (véase la cita [651] de [13]), entre otros. En 1975, K. Tanabe después de representar las matrices $\{2\}$ -inversas mediante series de tipo Neumann, analizó las condiciones necesarias y suficientes que deben cumplir las matrices del método iterativo de la hiperpotencia para que dicha serie converja a la $\{2\}$ -inversa. En 1996, R. E. Hartwig hizo un estudio más refinado del método mediante la introducción de una matriz idempotente para el cálculo de las iteraciones (véase la cita [368] de [13]) y también, en la cita [412] de [13], J.J. Climent, N. Thome y Y. Wei extendieron el trabajo de Tanabe a inversas de Moore-Penrose, inversas de grupo y de Drazin.

Por su parte, la teoría de perturbación ha adquirido un gran auge en los últimos años. Sólo hay que ver la cantidad de artículos que se han publicado sobre el tema (véanse [31, 45, 47, 48, 49, 53, 54] y las citas [1073, 2023] de [13]). Es conocido que si $A, E \in \mathbb{C}^{n \times n}$ cumplen que A es invertible y $\|A^{-1}\| \|E\| < 1$ entonces $A + E$ es invertible y

$$\frac{\|(A + E)^{-1} - A^{-1}\|}{\|A^{-1}\|} \leq \frac{\kappa(A)\|A + E\|/\|A\|}{1 - \kappa(A)\|E\|/\|A\|}$$

donde $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ es el número de condición de A . Propiedades de este tipo han sido analizadas para algunos tipos de inversas generalizadas (véase [47]). Por ejemplo, para inversas de Moore-Penrose se tiene que si $A, E \in \mathbb{C}^{m \times n}$ cumplen que $\text{rango}(A + E) = \text{rango}(A)$ y $\|A^\dagger\|_2 \|E\|_2 < 1$ entonces

$$\frac{\|(A + E)^\dagger - A^\dagger\|_2}{\|A^\dagger\|_2} \leq \left(1 + \frac{1}{1 - \|A^\dagger\|_2 \|E\|_2} + \frac{1}{(1 - \|A^\dagger\|_2 \|E\|_2)^2} \right) \|A^\dagger\|_2 \|E\|_2$$

y esto significa que si A tiene una pequeña perturbación tal que $\text{rango}(A + E) = \text{rango}(A)$ entonces A^\dagger sólo produce una pequeña perturbación. Resultados del mismo tipo relativos a inversas de Drazin se pueden encontrar en los trabajos de N. Castro en colaboración con otros autores (véanse [21, 22, 23]). Además, en este campo se estudia el número de condición de un problema y el análisis de perturbación propiamente dicho de las diferentes inversas generalizadas,

pasando, muchas veces, por el análisis y diseño de algoritmos recursivos, finitos y en paralelo (véase [47]).

En la cita [329] de [13], S.L. Campbell y C.D. Meyer, Jr. dedicaron parte del capítulo 4 de su libro al tratamiento de las matrices EP . Como se ha dicho, estas son matrices que vienen caracterizadas por la condición que tanto la matriz como su traspuesta conjugada tienen el mismo espacio imagen. Además, es un hecho conocido (véase [13]) que la igualdad entre la inversa de Moore–Penrose y la inversa de grupo de una misma matriz se cumple si y sólo si la matriz es del tipo EP . En 1997, R.E. Hartwig junto a I. Katz indicaron condiciones necesarias y suficientes para que el producto de matrices EP vuelva a ser una matriz del tipo EP (véase la cita [839] de [13]). Este problema permanecía abierto desde 1969 y fue planteado por T.S. Baskett e I.J. Katz en la cita [120] de [13]. La caracterización mencionada se basó en condiciones geométricas que incluyen ciertas inversas de grupo.

Abordando ahora el campo de la lógica algebraica, podemos decir que se han definido una serie de órdenes parciales, estudiando propiedades que se desprenden de los retículos que pueden construirse a partir de dicho orden. Por ejemplo, M.P. Drazin en 1978 definió, para $A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$, la relación de orden parcial llamada *estrella* como sigue

$$A \stackrel{*}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad A^*A = A^*B \quad \text{y} \quad AA^* = BA^*$$

y comprobó que es equivalente a la relación de orden

$$A \stackrel{*}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad A^\dagger A = A^\dagger B \quad \text{y} \quad AA^\dagger = BA^\dagger$$

en la que interviene la inversa de Moore–Penrose (véase la cita [508] de [13]). En 1980, Hartwig definió el llamado orden parcial *más*⁵ a partir de una $\{1\}$ -inversa generalizada (véase la cita [825] de [13]) como sigue

$$A \stackrel{-}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad A_1^- A = A_1^- B \quad \text{y} \quad AA_2^- = BA_2^-$$

donde $A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$ y A_1^-, A_2^- son dos $\{1\}$ -inversas de A , y más tarde fue caracterizado por

$$A \stackrel{-}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad \text{rango}(B - A) = \text{rango}(B) - \text{rango}(A).$$

D. Carlson en 1986 estudió algunas propiedades más acerca de los órdenes parciales citados (véase la cita [345] de [13]). S.J. Mitra en 1987 definió una nueva relación de orden sobre el conjunto de matrices cuadradas de índice 1, como es lógico, por medio de la inversa de grupo (véase la cita [1323] de [13]) como sigue

$$A \stackrel{\#}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad A^\# A = A^\# B \quad \text{y} \quad AA^\# = BA^\#.$$

⁵Renombrando al orden parcial *menos* conocido hasta ese momento.

En ese trabajo se dan varias condiciones que aseguran la equivalencia entre distintos tipos de órdenes conocidos hasta ese momento. En 1997 fue publicado en *Linear Algebra and its Applications* (véase la cita [759] de [13]) un trabajo de J. Groß y S.O. Troschke en el que se hacen observaciones adicionales, a las que J.K. Baksalary y F. Pukelsheim dieron en 1990, acerca de órdenes definidos sobre el conjunto de las matrices definidas no negativas (véase la cita [85] de [13]). En el mismo volumen de dicha revista apareció también, en un trabajo conjunto de J. Groß con G. Trenkler (véase la cita [753] de [13]), un artículo acerca de órdenes parciales y proyectores hipergeneralizados. Éstos últimos son matrices que satisfacen la condición que su cuadrado coincide con su inversa de Moore–Penrose. También se los relacionó con las matrices EP anteriormente mencionadas, estableciendo que para que una matriz que está mayorizada según el orden menos por un proyector hipergeneralizado, sea también un proyector hipergeneralizado, debe suceder que dicha matriz satisfaga la condición de ser EP .

Otro ámbito en el que han sido introducidas las inversas generalizadas es el campo de la teoría combinatoria. Primeramente, J. Maybee y J. Quirk estudiaron los llamados problemas cualitativos con sus aplicaciones a la economía, donde aparecieron los patrones de signos, es decir, se trata de analizar propiedades que pueden derivarse de matrices reales conociendo tan sólo el signo de sus elementos aunque desconociendo, tal vez, su magnitud. Más adelante, estos fueron utilizados en el estudio de ciertos problemas donde aparecen una matriz y su inversa. En este sentido, C.R. Johnson, F.T. Leighton y H.A. Robinson en 1979 ya habían introducido ideas relacionadas con matrices inversas ordinarias y patrones de signos, identificando cuáles de estos patrones pueden darse sobre matrices reales no singulares con todos sus elementos no nulos y cuyas inversas sólo tienen elementos positivos (véase [32]). En un trabajo de C. Eschenbach, F. Hall y Z. Li de 1994 fueron introducidas las ideas anteriormente mencionadas a la teoría de inversas generalizadas (véase la cita [578] de [13]). Estos autores investigaron la clase de todos los patrones cuadrados (es decir, la clase de las matrices cuadradas con el mismo patrón de signos que una matriz fija) para los cuales existen otras dos matrices de modo que una de ellas es una $\{1\}$ -inversa de la otra, y todas con el mismo patrón de signos. Concretamente, a una matriz real $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ con un patrón de signos determinado, los autores le asociaron el conjunto

$$Q(A) = \{B \in \mathbb{R}^{n \times n} : A \text{ y } B \text{ tienen los mismos signos en las mismas posiciones}\}$$

de todas las matrices del mismo tamaño y con el mismo patrón de signos que A y estudiaron los siguientes problemas:

- (i) Analizaron la clase de matrices definida por:

$$\mathcal{G} = \{ \text{patrón de signos de } A \in \mathbb{R}^{n \times n} : \exists B, C \in Q(A) \text{ con } BCB = B \}$$

- (ii) Para patrones no negativos caracterizaron \mathcal{G} mostrando que:

$$\mathcal{G} = \{ \text{patrón de signos de } A \in \mathbb{R}^{n \times n} : \exists B \in Q(A) \text{ con } B^3 = B \}.$$

- (iii) Caracterizaron patrones de matrices cuadradas no negativas que admiten una matriz idempotente y los que admiten una matriz $\{1, 3\}$ -inversa generalizada.

En la parte del estudio dedicado a analizar matrices con patrones de signos no negativos se utilizaron técnicas de la teoría de grafos.

También, S. Kirkland, publicó en 1995 un trabajo en el que se calcula la inversa de grupo asociada con una matriz no negativa periódica e irreducible, discutiendo además sus posibles patrones de signos (véase la cita [1044] de [13]). Además, hay trabajos donde se dan condiciones necesarias y suficientes que indican el tipo de matrices que, teniendo un patrón de signos determinado, admiten alguna inversa generalizada también con patrón de signos determinado. Por ejemplo, condiciones de este tipo fueron dadas por I.W. Kuo en (véase la cita [1102] de [13]) para el caso de la inversa de Moore–Penrose de M -matrices singulares. En 1997, nuevamente C. Eschenbach, F. Hall y Z. Li analizaron algunos patrones de signos de matrices, pero esta vez lo hicieron para $\{1\}$ -inversas generalizadas y para cierta clase de matrices no negativas, dejando planteados en su trabajo algunos problemas abiertos (véase [27]).

El artículo “*Idempotency of linear combinations of two idempotent matrices*” de J.K. Baksalary y O.M. Baksalary (véase [3]) dio origen a un amplio estudio en el campo de las combinaciones lineales de ciertos tipos de matrices especiales (proyectores, proyectores generalizados, proyectores hipergeneralizados, etc.) en los que la combinación lineal cumple alguna propiedad particular, como la de ser proyector, una matriz tripotente, etc. Concretamente, se considera el problema de hallar matrices complejas A y B y todos los números complejos a y b tales que $C = aA + bB$ satisfaga $A^{r+1} = A$, $B^{s+1} = B$, $C^{t+1} = C$ para algunas potencias enteras positivas r, s y t . En la siguiente tabla se muestran casos resueltos hasta el momento indicando las referencias de las artículos donde se han publicado

r	s	t	Condición	Referencia
1	1	1	–	[3]
1	2	1	–	[5]
1	1	arbitrario ≥ 1	–	[15]
1	arbitrario ≥ 1	1	$AB = BA$	[14]
2	2	2	$AB = BA$	[4]
1	arbitrario ≥ 1	1	$AB \neq BA$	[16]

La relación de estas expresiones con las inversas generalizadas es que, por ejemplo, si se cumple $A^3 = A$ se tiene que esto implica que A es una $\{1\}$ -inversa generalizada de A , una $\{2\}$ -inversa generalizada de A , $A^\# = A^D = A$, etc., es decir, las inversas generalizadas son fáciles de calcular puesto que resultan ser potencias de la propia matriz A (véase la cita [290] de [13]).

Por último, es conocido que gran cantidad de problemas numéricos pueden ser planteados por medio de sistemas de ecuaciones lineales del tipo $Ax = b$, donde A es una matriz de tamaño $m \times n$ y x y b son vectores de tamaños $n \times 1$ y $m \times 1$, respectivamente. Ahora bien, otra forma en que pueden modelizarse una gran variedad de problemas es a través de sistemas lineales de ecuaciones

diferenciales, si se trabaja con variables continuas o bien, por medio de sistemas lineales de ecuaciones en diferencias, si se trabaja con variables discretas, a saber

$$Ax'(t) = Bx(t) + Cu(t)$$

o bien

$$Ax(k+1) = Bx(k) + Cu(k),$$

respectivamente, siendo A, B y C matrices y x y u vectores, todos de órdenes adecuados. Los sistemas en los que la matriz A es no invertible requieren las inversas de Drazin para su resolución. Para finalizar esta sección, cabe mencionar como se ha indicado en la introducción, que una de las importantes aplicaciones de la inversa de Drazin, y en particular de la inversa de grupo, aparece a la hora de resolver sistemas lineales singulares de control, en los que interviene una matriz que carece de inversa ordinaria.

4 Líneas actuales de investigación

A continuación se indican algunas líneas de investigación en las que actualmente se está trabajando en este campo:

Teoría general: pertenecen a esta rama las investigaciones concernientes al análisis de propiedades y relaciones entre los diferentes tipos de inversas generalizadas. Por ejemplo, es conocido que para matrices invertibles del mismo tamaño A y B se cumple la ley del orden inverso $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$. Para inversas de Moore-Penrose se conoce que si A y B son matrices complejas que pueden multiplicarse entonces las siguientes condiciones son equivalentes:

- (a) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$,
- (b) $\mathcal{R}(A^*AB) \subseteq \mathcal{R}(B)$ y $\mathcal{R}(BB^*A^*) \subseteq \mathcal{R}(A^*)$,
- (c) A^*ABB^* es una matriz EP ,

donde $\mathcal{R}(M)$ es el subespacio imagen de la matriz M . Se buscan condiciones suficientes o, si es posible, caracterizaciones bajo las cuales se cumpla la ley del orden inverso

$$(AB)^\# = B^\#A^\#, \quad (AB)^D = B^D A^D$$

o para los demás tipos de inversas generalizadas. técnicas que funcionan para el desarrollo de algún tipo de inversa generalizada se tratan de adaptar a los demás tipos.

Cadenas de Markov: si bien la teoría clásica de cadenas de Markov finitas no utiliza las inversas generalizadas, dicha teoría puede unificarse usando la inversa de grupo en su solución. Concretamente, si una cadena de Markov homogénea ergódica tiene m estados y $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la matriz de transición de un paso, la inversa de grupo $A^\#$ de la matriz $A = I - T$

responde a cada pregunta importante dentro de esta teoría ya que si existe el límite $\lim_{k \rightarrow +\infty} T^k$ entonces

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} T^k = I - AA^\#,$$

es decir la matriz límite puede ser caracterizada como la diferencia de dos elementos identidad: I es la identidad en el grupo multiplicativo de matrices invertibles y $AA^\#$ es el elemento identidad en el grupo multiplicativo que contenga a A .

Actualmente esta rama se preocupa del desarrollo de algoritmos eficientes para la resolución de cadenas con un gran número de estados. Se están haciendo intentos de aplicación de este tipo de algoritmos para mejorar la rapidez de convergencia del algoritmo de búsqueda usado en la matriz Google, la cual se define como

$$G = \alpha S + (1 - \alpha)\mathbf{1}v^T$$

donde $0 < \alpha < 1$, v^T es un vector fila de probabilidades estrictamente positivo, y ambos se pueden elegir arbitrariamente y S es una matriz estocástica y $\mathbf{1}$ es un vector columna de unos (véase [39]).

Lógica algebraica: a partir de la introducción de ciertos órdenes parciales sobre conjuntos especiales de matrices (como las Hermíticas, definidas no negativas, las que poseen inversa de grupo, etc.) esta rama se encarga del estudio de sus propiedades. En la actualidad se están buscando resultados en los que se involucren particiones de las matrices. Por ejemplo, otras caracterizaciones del orden parcial definido sobre inversas de grupo y caracterizado por

$$A \stackrel{\#}{\leq} B \quad \Leftrightarrow \quad A \text{ y } B \text{ poseen inversa de grupo y } AB = BA = A^2$$

puede darse mediante las siguientes condiciones equivalentes (véase [29]):

- (a) $AB = BA = A^2$.
- (b) A y B se pueden escribir como

$$A = S \begin{bmatrix} A_1 & O \\ O & O \end{bmatrix} S^{-1}, \quad B = S \begin{bmatrix} A_1 & O \\ O & B_1 \end{bmatrix} S^{-1}$$

con S y A_1 invertibles y B_1 arbitraria.

- (c) A y B se pueden escribir como

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma K & \Sigma L \\ O & O \end{bmatrix} U^*, \quad B = U \begin{bmatrix} \Sigma K & \Sigma L - K^{-1}LM \\ O & M \end{bmatrix} U^*$$

con U unitaria, K invertible, $KK^* + LL^* = I_r$, Σ matriz diagonal definida positiva de rango r y M arbitraria,

siendo $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ con A de rango r menor que n e igual que el de A^2 y representada mediante

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma K & \Sigma L \\ O & O \end{bmatrix} U^*$$

con U una matriz unitaria, Σ una matriz diagonal definida positiva de rango r y K y L dos matrices que satisfacen $KK^* + LL^* = I_r$.

Sistemas de control: como la solución de un sistema singular de control se expresa en términos de la inversa de Drazin, esta línea utiliza ese tipo de inversas en su investigación. Por ejemplo, resultados sobre la no negatividad de un sistema singular de control requieren del hecho que ciertos productos de matrices que involucran la inversa de Drazin sean no negativos. Concretamente, si un sistema singular discreto es de la forma

$$\begin{cases} Ex(k+1) & = Ax(k) + Bu(k) \\ y(k) & = Cx(k) \end{cases}$$

y tal que $EE^D \geq O$, $AE = EA$ y $\mathcal{N}(E) \cap \mathcal{N}(A) = \{0\}$ entonces este sistema es no negativo si y sólo si para cada $i = 0, 1, \dots, \text{ind}(E) - 1$ se cumplen las siguientes condiciones:

- (a) $E^D A \geq O$,
- (b) $E^D B \geq O$,
- (c) $CE^D E \geq O$,
- (d) $-(I - EE^D)(EA^D)^i A^D B \geq O$,
- (e) $-C(I - EE^D)(EA^D)^i A^D B \geq O$,

donde $\mathcal{N}(M)$ representa el espacio nulo de la matriz M (véase [30]). Actualmente se está trabajando en la obtención de resultados en los que al operar con matrices por bloques se consigue que la información a verificar sea sobre matrices de tamaños más reducidos.

Cálculo numérico: el análisis de las inversas generalizadas en este campo es muy amplio. Además del desarrollo de métodos para el cálculo de las diferentes inversas generalizadas propiamente dichas, se trabaja en la utilización de estas inversas para su resolución de problemas de otras áreas. Por ejemplo, se estudian métodos numéricos para la resolución de sistemas lineales $Ax = b$ en los que A no es invertible con técnicas como la de subespacios de Krylov y la de Lanczos. La implementación de estos algoritmos se estudia tanto en secuencial como en modelos con procesadores en paralelo. Por ejemplo, en la cita [2023] de [13] se estudian condiciones necesarias y suficientes que garantizan que el método de subespacios de Krylov converge a una solución del sistema lineal singular $Ax = b$ dada por

$$A^D b + (I - A^D A)x_0$$

y si k es el índice de A se prueba que la indicada es la solución de mínimos cuadrados generalizada del problema $Ax = b$ con $b \in \mathcal{R}(A^k) + \mathcal{N}(A)$ siendo $x_0 \in \mathcal{R}(A^{k-1}) + \mathcal{N}(A)$.

Teoría de perturbación: esta rama ha tenido un auge muy importante en los últimos años. En ella se estudian, entre otros aspectos, cotas del error que se comete al estimar una inversa generalizada con una inversa generalizada aproximada (algunas involucran el número de condición de las inversas generalizadas), modificaciones que preserven el rango de la matriz, expresiones para la perturbación, etc. Por ejemplo, en [21, 22, 23] se estudia la perturbación de la inversa de Drazin. En [24], los autores demuestran que si $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ y $\|B^\pi - A^\pi\| + \|A^D(B - A)\| < 1$ entonces

$$\|B^D\| \leq \frac{\|A^D\|(1 + \|B^\pi - A^\pi\|)}{1 - \|B^\pi - A^\pi\| - \|A^D(B - A)\|}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\|B^D - A^D\|}{\|A^D\|} &\leq \frac{\|A^D(B - A)\| + 2\|B^\pi - A^\pi\|}{1 - \|B^\pi - A^\pi\| - \|A^D(B - A)\|} \\ &\leq \frac{\kappa_D(A)\Theta + 2\|B^\pi - A^\pi\|}{\|B^\pi - A^\pi\| - \kappa_D(A)\Theta} \end{aligned}$$

donde $A^\pi = I - AA^D$, $B^\pi = I - BB^D$, $\kappa_D(A) = \|A\|\|A^D\|$ y $\Theta = \|B - A\|/\|A\|$.

Matrices difusas: son matrices con coeficientes en el intervalo $[0, 1]$ y donde la suma y el producto se definen mediante el máximo y el mínimo, respectivamente, y la relación de orden es la habitual en ese intervalo. Esta línea de investigación se preocupa del análisis de condiciones bajo las cuales existan los diferentes tipos de inversas generalizadas y de qué propiedades de las conocidas para \mathbb{R} y \mathbb{C} se preservan o bien se realiza el análisis de las condiciones bajo las cuales estas se cumplen. Por ejemplo, en [36] la autora A.R. Meenakshi indica algunos resultados sobre la existencia de la inversa de grupo de matrices difusas triangulares por bloques de la forma

$$M = \begin{bmatrix} A & O \\ C & D \end{bmatrix}, \quad \text{con } \mathcal{F}(C) \subseteq \mathcal{F}(A) \quad \text{y} \quad \mathcal{C}(C) \subseteq \mathcal{C}(D), \quad (1)$$

siendo $\mathcal{F}(Q)$ el espacio fila de Q y $\mathcal{C}(Q)$ el espacio columna de Q . En este artículo se prueban los siguientes resultados:

- (I) Sea M como en (1), A y D matrices cuadradas. Entonces la inversa de grupo $M^\#$ existe si y sólo si existen $A^\#$ y $D^\#$ y además $DC = CA$.
- (II) Para la matriz triangular inferior por bloques

$$M = \begin{bmatrix} A & O \\ C & D \end{bmatrix},$$

las siguientes condiciones son equivalentes:

- (a) M es idempotente.
 (b) Los bloques A y D son matrices idempotentes y $CA = DC = C$.
 (c) Los bloques A y D son matrices idempotentes con $\mathcal{F}(C) \subseteq \mathcal{F}(A)$ y $\mathcal{C}(C) \subseteq \mathcal{C}(D)$.
- (III) Sea M como en (1). Entonces M tiene una $\{1\}$ -inversa triangular inferior por bloques si y sólo si tanto $M_1 = \begin{bmatrix} A & O \\ C & O \end{bmatrix}$, como $M_2 = \begin{bmatrix} O & O \\ C & D \end{bmatrix}$, tienen al menos una $\{1\}$ -inversa. En este caso, $M = M_1 + M_2$ y además $M_1^- + M_2^-$ es una $\{1\}$ -inversa de M para una elección adecuada de las $\{1\}$ -inversas M_1^- y M_2^- .

Más resultados relacionados con este tema pueden encontrarse en las citas [354, 394] de [13].

Por supuesto que estas no son todas las líneas de investigación sino que se han mencionado algunas bastante representativas.

Agradecimientos: El autor agradece a los revisores porque con sus sugerencias se ha conseguido mejorar la presentación del artículo.

Referencias

- [1] M. Altman. An optimum cubically convergent iterative method of inverting a linear bounded operator in Hilbert space. *Pacific J. Math.*, 10, 1107–1113, 1960.
- [2] O.M. Baksalary. Idempotency of linear combinations of three idempotent matrices, two of which are disjoint. *Linear Algebra and its Applications*, 388, 67–78, 2004.
- [3] J.K. Baksalary, O.M. Baksalary. Idempotency of linear combinations of two idempotent matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 321, 3–7, 2000.
- [4] J.K. Baksalary, O.M. Baksalary, H. Özdemir. A note on linear combinations of commuting tripotent matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 388, 45–51, 2004.
- [5] J.K. Baksalary, O.M. Baksalary, G.P.H. Styan. Idempotency of linear combinations of an idempotent matrix and a tripotent matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 354, 21–34, 2002.
- [6] J. K. Baksalary, A. Markiewicz. Further Results on Invariance of the Eigenvalues of Matrix Products Involving Generalized Inverses. *Linear Algebra and its Applications*, 237/238, 115–121, 1996.
- [7] J. K. Baksalary, T. Pukkila. A Note on Invariance of the Eigenvalues, Singular Values, and Norms of Matrix Products Involving Generalized Inverses. *Linear Algebra and its Applications*, 165, 125–130, 1992.

- [8] J. K. Baksalary, S. Puntanen. Spectrum and Trace Invariance Criterion and its Statistical Applications. *Linear Algebra and its Applications*, 142, 121–128, 1990.
- [9] J.K. Baksalary, G.P.H. Styan. Generalized inverses of partitioned matrices in Banachsiewicz-Schur form. *Linear Algebra and its Applications*, 354, 1-3, 41–47, 2002.
- [10] R.B. Bapat, Zheng, Bing. Generalized inverses of bordered matrices. *Electronic J. Linear Algebra*, 10, 16–30, 2003.
- [11] R. Barbolla, P. Sanz. *Álgebra Lineal y Teoría de Matrices*. Universidad Autónoma de Madrid, Prentice-Hall, Madrid, 1998.
- [12] A. Ben-Israel. An iterative method for computing the generalized inverse of an arbitrary matrix. *Math. Comp.*, 19, 452–455, 1965.
- [13] A. Ben-Israel, T. Greville. *Generalized inverses: theory and applications*. John Wiley & Sons, New York, 1974.
<http://rutcor.rutgers.edu/pub/bisrael/GI.pdf>
- [14] J. Benítez, N. Thome. Idempotency of linear combinations of an idempotent matrix and a t -potent matrix that commute. *Linear Algebra and its Applications*, 403, 414–418, 2005.
- [15] J. Benítez, N. Thome. $\{k\}$ -Group Periodic Matrices. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 28, 1, 9–25, 2006.
- [16] J. Benítez, N. Thome. Idempotency of linear combinations of projectors and a t -potent matrices that do not commute. Por aparecer en *Linear and Multilinear Algebra*.
- [17] A. Berman, R. J. Plemmons. *Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences*. Classics in Applied Mathematics. SIAM Press, Philadelphia, 1994.
- [18] A. Bjerhammar. A generalized matrix algebra. *Kungl. Tekn. Högsk. Handl.*, 24, 1968.
- [19] Cao, Chongguang; Zhang, Xian; Tang, Xiaomin. Reverse order law of group inverses of products of two matrices. *Applied Mathematics and Computation*, 158, 2, 489–495, 2004.
- [20] N. Castro. The Drazin inverse of a block matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 404, 2005.
- [21] N. Castro, J.J. Koliha. Perturbation of the Drazin inverse for closed linear operators. *Integral Equations Operator Theory*, 36, 92–106, 2000.
- [22] N. Castro, J.J. Koliha, I. Straškraba. Perturbation of the Drazin inverse. *Soochow J. Math.*, 27, 201–211, 2001.

- [23] N. Castro, J.J. Koliha, Y. Wei. Perturbation of the Drazin inverse for matrices with equal eigenprojections at zero. *Linear Algebra and its Applications*, 312, 181–189, 2000.
- [24] N. Castro, J. Vélez. Characterizations of matrices whose eigenprojections at zero are equal to a fixed perturbation. *Applied Mathematics and Computations*, 159, 613–623, 2004.
- [25] Cheng, Shizhen, Tian, Yongge. Two sets of new characterizations for normal and EP matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 375, 181–195, 2003.
- [26] D. S. Cvetkovic-Ilic. On a problem of N. Thome and Y. Wei. *Applied Mathematics and Computation*, 166, 233–236, 2005.
- [27] C. A. Eschenbach, F. J. Hall, Z. Li. Some Sign Patterns That Allow a Real Inverse Pair B and B^{-1} . *Linear Algebra and its Applications*, 252, 299–321, 1997.
- [28] M. Gouveia. Some results on generalized inverses of Toeplitz matrices. Actas del *Encuentro de Análisis Matricial y Aplicaciones*, 260–265, Sevilla, España, 1997.
- [29] J. Groß. Remarks on the sharp partial order and the ordering of squares of matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 417, 87–93, 2006.
- [30] A. Herrero, A. Ramírez, N. Thome. An algorithm to check the nonnegativity of singular systems. *Applied Mathematics and Computation*, 189, 355–365, 2007, doi:10.1016/j.amc.2006.11.091.
- [31] Diao, Huaian. Structured perturbations of Drazin inverse. *Applied Mathematics and Computation*, 158, 2, 419–432, 2004.
- [32] C. R. Johnson, F. T. Leighton, H. A. Robinson. Sign Patterns of Inverse-Positive Matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 24, 75–83, 1979.
- [33] T. Kaczorek. *Linear Control Systems, Analysis of Multivariable Systems*. John Wiley & Sons Inc., Vol. I, New York, 1992.
- [34] T. Kaczorek. *Linear Control Systems, Synthesis of Multivariable Systems and Multidimensional Systems*. John Wiley & Sons Inc., Vol. II, New York, 1992.
- [35] G. Marsaglia, G. P. H. Styan. When does $\text{rank}(A+B) = \text{rank}(A) + \text{rank}(B)$? *Canad. Math. Bull.*, 15, 451–452, 1972.
- [36] A.R. Meenakshi. On regularity of block triangular fuzzy matrices, *J. Appl. Math. and Computing*, 15, 1, 207–220, 2004.
- [37] A.R. Meennakshi. Some remarks on generalized inverses of conjugate EP matrix. *Bull. Malays. Math. Sci. Soc.*, 2, 28, 1, 61–65, 2005.

- [38] B. Noble, J. W. Daniel. *Álgebra Lineal Aplicada*. Prentice-Hall, México, Tercera Edición, 1989.
- [39] F. Pedroche. Métodos de cálculo del vector PageRank. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.*, 39, 7–30, 2007.
- [40] R. Puystjens, M.C. Gouveia. Drazin invertibility for matrices over an arbitrary ring. *Linear Algebra and its Applications*, 385, 105–116, 2004.
- [41] K.P.S. Bhaskara Rao. The Theory of Generalized Inverses Over Commutative Rings. *Algebra, Logic and Applications*, Londres, 2002.
- [42] U. G. Rothblum. Computation of the eigenprojection of a matrix at its spectral radius. *Math. Programming Stud.*, 6, 188–201, 1976.
- [43] G. Schultz. Iterative Berechnung der reziproken Matrix. *Z. Angew. Math. Mech.*, 13, 57–59, 1933.
- [44] N. Thome, Y. Wei. Generalized Inverses and a Block-Rank Equation. *Applied Mathematics and Computation*, 141, 471–476, 2003.
- [45] Lei, Tiang; Wei, Yimin; Woo, Ching-Wah. Condition numbers and structured perturbation of the W-weighted Drazin inverse. *Applied Mathematics and Computation*, 165, 1, 185–194, 2005.
- [46] Tiang, Yongee. On mixed-type reverse-order laws for the Moore-Penrose inverse of a matrix product. *Int. J. Math. Sci.*, 57–60, 3103–3116, 2004.
- [47] G. Wang, Y. Yimin, S. Qiao. *Generalized inverses: Theory and Computation*, Science Press, 2003.
- [48] Wei, Yimin; Woo, Ching-Wah; Lei, Tiangang. A note on the perturbation of the W-weighted Drazin inverse. *Applied Mathematics and Computations*, 149, 2, 423-430, 2004.
- [49] Wei, Yimin; Diao Huaian. Condition number for the Drazin inverse and the Drazin-inverse solution of singular linear system with their condition numbers. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 182, 270–289, 2005.
- [50] Y. Wei, G. Wang. A Survey on Generalized Inverse $A_{T,S}^{(2)}$. *Actas del Encuentro de Análisis Matricial y Aplicaciones*, 421–428, Sevilla, España, 1997.
- [51] Y. Wei, H. Wu. Convergence properties of Krylov subspace methods for singular linear systems with arbitrary index. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 114, 2, 305–318, 2000.
- [52] Sun, Wenyu y Wei, Yimin. Triple reverse-order law for weighted generalized inverses. *Applied Mathematics and Computation*, 125, 2–3, 221–229, 2002.

- [53] Cui, Xiaoke; Diao, Huaian. Condition number for the W-weighted Drazin inverse and its applications in the solution of rectangular linear systems. *J. Appl. Math. Comput.* , 20, 1-2, 35-59, 2006.
- [54] Xue, Yifeng; Chen, Guoliang. The expression of the generalized Bott-Duffin inverse and its perturbation theory. *Applied Mathematics and Computation*, 132, 2-3, 437-444, 2002.
- [55] C. X. Zhou. The necessary and sufficient conditions of iterative methods for computing generalized inverses. *Technical report*, North Carolina State Univ., 1991.

DEL ÁBACO AL SUPERCOMPUTADOR: BREVE HISTORIA DE LA COMPUTACIÓN

FRANCISCO ORTEGÓN GALLEGO

Departamento de Matemáticas, Universidad de Cádiz

francisco.ortegon@uca.es

1 Introducción

En la actualidad, el ordenador se ha convertido en un elemento casi imprescindible de nuestras vidas. Su omnipresencia es evidente: lo vemos en el trabajo, en el hogar, en los aviones, aeropuertos, bancos, en el automóvil, etc., y pronto también en los electrodomésticos habituales (lavadora, lavaplatos, frigorífico, cocina). El desarrollo de estas máquinas, desde el más simple ábaco hasta el más sofisticado supercomputador multiprocesador actual, ha necesitado recorrer un camino nada fácil y es el resultado de la aportación de algunas de las mentes más selectas de la historia de la ciencia. Asimismo, supone un triunfo de la imaginación y el esfuerzo humanos sobre algunos retos que nos plantea la naturaleza.

Sirva estas notas para rendir homenaje a los protagonistas de esta historia, a esas mentes prodigiosas que son las responsables de que hoy dispongamos de ordenadores, también llamados computadoras o cerebros electrónicos. Es muy posible que aquí no estén todos, sobre todo los correspondientes a la historia más reciente donde gobiernos, corporaciones, empresas privadas, universidades y otros organismos son los que están directamente implicados. Para una descripción más extensa pueden consultarse [3, 5, 6, 11, 37, 42, 43, 45]. Por otro lado, las referencias [32, 33, 34] describen la historia de las calculadoras mecánicas y están profusamente ilustradas.

2 Ábacos y reglas de cálculo

Las primeras herramientas de calcular ya surgieron en las antiguas civilizaciones. Su aparición se debió a la necesidad de realizar un gran número de operaciones, habitualmente sumas y multiplicaciones, por ejemplo, en transacciones comerciales, en agrimensura o en la construcción. Casi todas las máquinas diseñadas para calcular tienen sus orígenes en las diversas formas que adoptó el ábaco en la antigüedad. El concepto de ábaco hay que entenderlo en su

Fecha de recepción: 6/07/2007. Aceptado (en forma revisada): 23/07/2007.

aceptación más amplia, refiriéndose por tal a cualquier artilugio, tabla, o elementos cuya finalidad es la de realizar cálculos rápidos, fundamentalmente simplificando la realización de las multiplicaciones de números grandes; algunos ábacos permitían también el cálculo rápido de las divisiones, y la extracción de raíces ([29]). El ábaco más antiguo que se conoce tiene una edad de unos veinte mil años, o quizás muchos más, y se conoce con el nombre de huesos de Ishango ([30, 31]), descubiertos en 1950 por el belga J. de Heinzelin en un poblado en las fuentes del Nilo en África Central. Los huesos miden entre diez y catorce centímetros y poseen una serie de marcas o muescas transversales agrupadas. En uno de los huesos figuran tres grupos de muescas, que si las contamos aparecen los números, en el primer grupo, 11, 21, 19 y 9; en el segundo, 11, 13, 17 y 19; y en el tercero, 3, 6, 4, 8, 10, 5, 5 y 7. Matemáticos y científicos no están del todo de acuerdo en el significado de estos valores, pero es obvio que estos números muestran una cierta regularidad. Así el primer grupo también puede interpretarse como $10 + 1$, $20 + 1$, $21 - 1$ y $10 - 1$, mientras que el tercer grupo muestra una secuencia inicial entre valores y su doble o mitad. Pero lo más sorprendente es la secuencia del segundo grupo en la que todos los números que aparecen son primos. Por otro lado, otras muescas parecen mostrar el uso de un sistema en base doce. Recientemente, otras marcas han sido observadas con el microscopio, las cuales se corresponden con las fases lunares. Los huesos de Ishango se exponen actualmente en el Museo de Historia Natural de Bruselas.

La procedencia del vocablo ábaco no se conoce con seguridad. La versión más extendida es que proviene del fenicio *abak*, que quiere decir polvo, arena, ya que los primeros ábacos eran una tablas que se recubrían de arena en los que, a modo de pizarra, se trazaban los números y figuras con ayuda de un estilo o punzón. Así era el ábaco de las antiguas civilizaciones (fenicia, egipcia, griega y romana). Euclides y Pitágoras demostraron sus teoremas en estos ábacos, y Arquímedes murió ante uno, exigiendo al soldado romano que lo mató que se apartara, pues le estaba borrando sus figuras geométricas.

Este ábaco desapareció posteriormente siendo sustituido por las tablas de cera, el pergamino, el papel, la pizarra, etc. La pervivencia de esta herramienta a lo largo de los siglos hasta la aparición de los logaritmos y las primeras calculadoras mecánicas a mediados del siglo XVII se debe al hecho de la falta de conocimientos, en general en sectores amplios de la sociedad, en lectura, escritura y aritmética. En España hasta finales del siglo XIX y bien entrado el XX, en algunos pueblos y zonas rurales todavía podían verse algunos artilugios para el conteo. En cualquier caso, el ábaco era la única herramienta para realizar las operaciones aritméticas que disponían tanto los hombres de ciencia, fundamentalmente astrónomos, como los hombres que llevaban la contabilidad del Estado o los maestros de escuela que enseñaban la aritmética elemental.

El mecanismo de Anticítera, un ábaco astronómico del siglo I a.C. descubierto en 1901, permitía a los griegos calcular los meses lunares, entre veintinueve y treinta días terrestres, al ser ajustado a la latitud y día de la semana correctos. Este mecanismo estaba compuesto por treinta y dos ruedas dentadas, muy parecido a los relojes del siglo XVIII. Actualmente, se exhibe en el fabuloso museo Nacional de Atenas. Lo que queda de él está muy deteriorado

y tan sólo recientemente se ha podido reconstruir este sofisticado mecanismo. La noticia de esta reconstrucción fue tan relevante que el periódico *El País* publicó un artículo sobre el tema el treinta de noviembre de 2006 ([23, 26]).

Los griegos y los romanos usaron dos tipos de ábacos. El primero de ellos estaba formado por unas varillas horizontales por las que pasaban unas bolitas (de madera, metal, marfil o hueso). Este ábaco se ha mantenido hasta nuestro días (lo podemos ver, por ejemplo, en salas de billar para llevar la cuenta de las carambolas). El ábaco con diez varillas horizontales y diez bolas por varilla servía para explicar la numeración decimal, los quebrados y los decimales. El segundo tipo de ábaco que usaron los romanos, procedente de la cultura griega, estaba integrado por un conjunto de piedrecitas que, dependiendo de su disposición, representaban distintos valores y con las que se podían realizar las operaciones. En latín, *calx* significa piedra; los romanos llamaban *calculus*, diminutivo de *calx*, a estas piedrecitas, y de ahí deriva el término cálculo, tanto en su acepción de conteo, como en la de piedra (por ejemplo, de riñón). También los egipcios usaron un ábaco con piedrecitas de colores. Los indios y los chinos también tenían ábacos de varillas con bolitas ensartadas o de piedrecitas. El ábaco chino de varillas, también llamado *suan-pan*, estaba más perfeccionado; las varillas solían fabricarse de bambú. El *suan-pan* estaba dividido en dos partes con objeto de representar por un lado unidades de diversos órdenes y por otro las partes fraccionarias.

La introducción del sistema de numeración arábigo-hindú en Europa a través de la obra *Liber abacci* ([39]) de Leonardo de Pisa (1202), también conocido por Fibonacci, tuvo un enorme impacto en el desarrollo de las matemáticas, en particular, y de las ciencias, en general. A partir de entonces, se pudieron construir ábacos basados en esta numeración, lo que permitió manejar números de muchas cifras. El primer ábaco numérico conocido es simplemente la tabla de multiplicar o tabla pitagórica, y constituye el fundamento de casi todos los ábacos numéricos que se diseñaron posteriormente. El museo Arqueológico Nacional (Madrid) guarda entre sus tesoros uno de estos ábacos ([29, 40]); data del siglo XVII y es una pieza única en su clase. Se trata de un estuche muy lujoso que contiene dos tipos de ábacos ideados por el matemático escocés Napier: el primero y mayor en tamaño es un prontuario, constituido por fichas, que permite realizar multiplicaciones de números grandes superponiendo adecuadamente unas tiras numéricas en sentido vertical con otras en sentido horizontal; el segundo ábaco es un ábaco rabdológico, es decir basado en las denominadas «varillas de Napier» (conocido en el mundo anglosajón como *Napier's bones*, debido al material usado habitualmente para construirlas, el marfil).

La rabdología es un término que fue introducido por Napier en su obra de 1617 *Rabdologiae*, un año antes de su muerte; está formado por los términos



Figura 1: Mecanismo de Anticitera. Museo Nacional (Atenas).



Figura 2: Ábaco neperiano. Museo Arqueológico Nacional (Madrid).

griegos *ραβδος*, varita, varilla o barrita, y *λογος*, tratado. En *Rabdologiae*, Napier explicaba el uso de las varillas para realizar rápidamente operaciones aritméticas, incluyendo multiplicaciones, divisiones y raíces cuadradas ([46]). Curiosamente, el descubrimiento de los logaritmos y la paulatina introducción de las máquinas mecánicas de calcular condenaron al olvido la rabdología.

Los astrónomos, cosmógrafos y navegantes hicieron también uso de cierto número de instrumentos que pueden considerarse como ábacos geométricos, siendo uno de ellos el astrolabio; uno de estos dispositivos fue el nonius, antecesor de la regla de cálculo, un aparato que permitía medir fracciones de la unidad. El nonius debe su nombre a su descubridor, Pedro Núñez, y de él deriva el actual calibre, también conocido por calibrador, pie de rey, nonius o vernier (esta última denominación se debe a Pierre Vernier (1584-1638) que lo perfeccionó).

Los libros de aritmética empezaron a editarse durante la edad media; estas obras explicaban cómo realizar cálculos por escrito en lugar de usar dispositivos como el ábaco. Más adelante, Gunter inspirado en el libro de logaritmos de Napier desarrolló la primera regla de cálculo en 1624. Otros personajes que participaron en la invención y desarrollo de la regla de cálculo fueron los ingleses William Oughtred (1574-1660) que en 1630 inventó una regla de cálculo circular, Robert Bissaker, que en 1654 ideó la primera regla de cálculo en el que la regla se colocaba entre dos partes de un bloque fijo, y Richard Delamain (1600-1644), que de manera independiente, también había inventado en 1630 una regla de cálculo de forma circular antes de que lo hiciera Oughtred, lo que generó una disputa entre los dos sobre la prioridad del invento. La versión actual de la regla de cálculo fue diseñada en 1850 por Amédée Mannheim (1831-1906), un oficial del ejército francés. La regla de cálculo todavía seguía usándose en la década de los años 1960, fundamentalmente por ingenieros, y sólo fue sustituida con la llegada de las primeras calculadoras de bolsillo.

3 Calculadoras mecánicas

Schickard un profesor de lenguas bíblicas, es considerado hoy día como el padre de la calculadora mecánica. Su máquina, que él bautizó como el «reloj-calculador,» era capaz de realizar sumas y restas de hasta seis cifras; si el resultado tenía más de seis cifras, un timbre avisaba de ello. Lamentablemente, un incendio destruyó su máquina. No fue hasta el siglo XX que sus apuntes serían descubiertos por el historiador Franz Hammer (1935 y 1956). En 1960, el matemático Bruno von Freytag de la Universidad de Tubinga se sirvió de ellos para reconstruir el reloj-calculador de Schickard.

En Inglaterra, el diplomático e inventor Samuel Morland, construyó tres clases distintas de máquinas de calcular: la primera, era un aparato para cálculos trigonométricos, la segunda, una versión mecanizada de las fichas de Napier, y la tercera, una calculadora mecánica para sumar. Si bien los dos últimos dispositivos fueron inventados en la década de los años 1660, no fue hasta 1673 en que Morland hizo una descripción de estos aparatos, y de su funcionamiento, en el libro *Description and Use of Two Arithmetic Instruments*. La máquina sumadora estaba adaptada al sistema en base doce, porque su finalidad era la de sumar valores que expresaban ciertas cantidades de dinero (en el sistema antiguo inglés, cuatro perras equivalían a un penique, doce peniques hacían un chelín, cinco chelines una corona, y veinte chelines una libra; este sistema perduró hasta 1971). La pega que tenía esta máquina es que no efectuaba las llevadas de forma automática; a pesar de todo, funcionaba bastante bien y por sus pequeñas dimensiones, podía ser llevada en un bolsillo. Las máquinas de calcular empezaron a ser conocidas (entre un público muy restringido) a partir del modelo que realizó Pascal (sin haber tenido conocimiento previo de la máquina de Schickard). Ya con veinte años, Pascal diseñó una máquina, conocida con el nombre de la *Pascalina*, de ocho cifras, capaz de sumar y restar, la cual resultó ser muy útil a su padre, que ejercía el puesto de recaudador de impuestos en Normandía. Llegó a construir hasta siete unidades de su máquina. Pascal tuvo que enfrentarse a ciertos problemas, de la misma índole que los que tuvo Morland, durante el diseño de la pascalina, debido al tipo de monedas que circulaban en su época. En efecto, una libra equivalía a veinte perras, y cada perra a doce denarios (este sistema monetario perduró hasta 1799, poco después de la revolución francesa); así que Pascal tuvo que tratar muchos más problemas por la división entre 240 que si hubiera tenido que dividir entre cien.

El siguiente paso fue dado por Leibniz. En 1685 Leibniz escribía el siguiente comentario:

No merece la pena que hombres valiosos pierdan horas como esclavos en la tarea de calcular, lo cual debería ser relegado a otros si las máquinas se usaran.

Leibniz se sentía muy molesto cada vez que, a lo largo de la resolución de un problema, le surgía la necesidad de realizar una gran cantidad de cálculos aritméticos. Eso lo llevó a interesarse por desarrollar una máquina de calcular. La inspiración le vino en París al observar un cuenta-pasos o podómetro utilizado para medir distancias. Leibniz, aunque desconocía los trabajos de Schickard, sí conoció la pascalina con todo detalle, la cual trató de mejorar para que incorporara la posibilidad de multiplicar y dividir. En 1673 diseñó una máquina que realizaba las cuatro operaciones elementales, pero no fue hasta el año 1694 en que Leibniz la construyó; un segundo modelo fue montado en 1704. Leibniz también consideró el hecho de usar el sistema binario, pero este aparato no lo llegó a construir. A diferencia de la pascalina, la máquina de Leibniz no fue comercializada.



Figura 3: Gottfried W. von Leibniz.

Otras generaciones de inventores surgieron en diversos países europeos ([16]). Entre ellos podemos citar al italiano Giovanni Poleni (1709), el austríaco Antonius Braun (1727), el alemán Jacob Leupold (1727), el inglés Charles Stanhope (1753-1816), tercer conde de Stanhope, que montó dos modelos de calculadoras en el periodo 1775-1777, el alemán Johann Hellfried Müller (1782-1784), etc.



Figura 4: P. M. Hahn

En 1770 el pastor alemán Philipp Matthäus Hahn (1739-1790) montó una calculadora analógica capaz de multiplicar. La máquina de Hahn presumía de tener una precisión de doce dígitos. Hahn, conocido por su fama de relojero, publicó en las Actas de la Academia de Erfurt diversos trabajos sobre la mejora del diseño de relojes. Hahn logró vender varias unidades de su calculadora.

En Francia, Charles Xavier Thomas (1785-1870) también conocido como Thomas de Colmar, construyó en 1820 el *Aritmómetro*, la primera máquina que resolvió el problema de las llevadas de manera automática (se fabricaron unas 1.500 unidades de su máquina entre 1823 y 1878); también fue la primera calculadora que se fabricó industrialmente. Thomas, que era director de una compañía de seguros en París, diseñó el aritmómetro de forma parecida a como lo había hecho Leibniz. La calculadora de Thomas tuvo tanto éxito en su época que muchos inventores e industriales se fijaron en él para construir sus propios modelos con ligeras modificaciones ([16]).

Durante el siglo XIX, no podemos olvidar las aportaciones de Babbage ([4, 48]), que diseñó una máquina de calcular capaz de ser controlada mediante un paquete de instrucciones sucesivas. Babbage comenzó en 1833 a desarrollar su *Ingenio Analítico*, una máquina que ya integraba todos los elementos esenciales de un ordenador actual, a saber: una unidad central de memoria, una unidad aritmética, una unidad de control de tarjetas perforadas que dirigían el proceso

de cálculo, y unidades de entrada y salida. Esta máquina fue concebida para llevar a cabo cualquier cálculo, por complicado que fuera; pero, debido a las limitaciones de tiempo, la máquina fue sólo parcialmente realizada.

En 1840, Babbage se desplaza a Turín para impartir un curso; una de sus alumnas fue Ada Augusta. A partir de entonces, Ada se convierte en estrecha colaboradora de Babbage ([41]. Ada está considerada como la primera programadora de la historia, ya que escribió un programa de ordenador que permitió calcular los primeros números de Bernoulli (el lenguaje de alto nivel Ada, desarrollado por el ministerio de la Defensa de los EE.UU. en 1979 es en su honor).

En 1878, Ramón Vereá, un emigrante gallego, por aquel entonces residente en Nueva York, construyó la primera máquina de calcular capaz de realizar multiplicaciones y divisiones instantáneamente, es decir, sin efectuar el cálculo por sumas sucesivas, y obteniendo un resultado de hasta quince cifras. Es digno de resaltar que Vereá no poseía formación científica, y que a lo largo de su vida ejerció las profesiones de maestro, periodista y escritor. Aunque Vereá llegó a patentar su invento, nunca tuvo interés en comercializar el producto, lo que sin duda le hubiera aportado mucho dinero ([1, 17, 20, 24, 21]).

En 1889, el francés León Bollée, usando un mecanismo parecido al desarrollado por Vereá, patentó un dispositivo que tres años más tarde le permitiría montar una máquina capaz de extraer raíces cuadradas de números de hasta dieciocho cifras en unos treinta segundos. Al igual que Vereá, Bollée no comercializó su máquina, pues se interesó fundamentalmente en la construcción de automóviles. También en 1892, el suizo Otto Seiger (1858-1923) patentó otra máquina de multiplicar que usaba los principios de Vereá y Bollée. La máquina fue bautizada como la *Millonaria*, y se vendieron del orden de 4.700 unidades.

A partir de 1892, una empresa alemana explotó y comercializó el *Aritmómetro de Odhner*, la primera máquina de calcular a manivela, patentada por el sueco W. T. Odhner. Fue un éxito de ventas en la época, facturando más de 200.000 unidades. Su uso se prolongó hasta la década de los años 1960. La primera calculadora Facit pertenecía al mismo tipo que las de Odhner y fue fabricada en 1918 por la firma Axel Wibel en Estocolmo. La dirección [52] contiene numerosas fotografías de los distintos modelos que diseñó Odhner, así como algunos otros que perduraron hasta finales de los años 1960 y principios de los 1970. En [51] se puede leer la siguiente declaración de Odhner:



Figura 5: Willgodt T. Odhner

Que sea sabido que yo, WILLGODT ODHNER, de San Petersburgo, Rusia, he inventado un nuevo y mejorado aritmómetro; y declaro que lo que sigue es una descripción completa, nítida y exacta del mismo.

Mi invento es un instrumento para ayudar a calcular, estando adaptado para sumar, restar, multiplicar y dividir números sin otra ocupación por parte del operario que la que se requiere para colocar y

rotar ciertas ruedas numeradas, así como ajustar un cursor que lleva una serie de ruedas registradoras.

El aritmómetro de Odhner era muy similar a una calculadora desarrollada por el estadounidense Frank S. Baldwin en 1873 ([44]). Baldwin también llamó a su máquina aritmómetro, que patentó en 1874, y de la que construyó diez unidades; fue la primera máquina para sumar que se vendió en los EE.UU. Según Baldwin, su máquina llegó a Europa a las manos de Odhner hacia 1875, quien, con leves modificaciones, la patentó en los países europeos (esta parte de la historia parece ser que no ha sido del todo confirmada [18]). La mecánica de estas dos máquinas son tan parecidas que los términos calculadora del tipo de Baldwin o calculadora del tipo de Odhner se consideran actualmente equivalentes. En 1900, Baldwin patentó la *Baldwin Computing Engine*, una máquina capaz de realizar multiplicaciones y divisiones de un sólo golpe. Más tarde, en 1908, patentó el *Baldwin Recording Calculator*, una calculadora que incorporaba un teclado.

En nuestro país, L. Torres Quevedo diseñó una máquina de calcular que era capaz incluso de resolver ecuaciones algebraicas complejas. Torres Quevedo construyó toda una serie de calculadoras analógicas, todas ellas mecánicas. En estas máquinas existen ciertos elementos, denominados *aritmóforos*, que están constituidos por un elemento giratorio y un índice que permite leer el valor representado para cada posición del mismo. El elemento giratorio es un disco o un tambor graduado que gira en torno a su eje, siendo los movimientos angulares proporcionales a los logaritmos de las magnitudes a representar. Basándose en esta técnica, Torres Quevedo puso a punto una máquina capaz de resolver ecuaciones algebraicas con ocho términos, obteniendo una aproximación de sus raíces, incluso las complejas, con una precisión de milésimas. Un componente de dicha máquina era el denominado *husillo sin fin*, de extremada complejidad mecánica, que permitía expresar la relación $y = \ln(10x + 1)$. Torres Quevedo también construyó otra calculadora para resolver una ecuación de segundo grado con coeficientes complejos, y un integrador.



Figura 6: Hermann Hollerith

En 1884, el estadounidense Burroughs desarrolló la primera máquina de sumar provista de teclas y que permitía imprimir resultados. Burroughs diseñó su calculadora cuando trabajaba como empleado en un banco. En 1886 fundó la empresa la *American Arithmometer Company* con el único objetivo de comercializar su calculadora, la cual, después de diversas fusiones con otras empresas, ha derivado en la actual *Unisys Corporation*. El desarrollo de las máquinas de calcular controladas externamente se vio impulsado por la aportación de Hollerith, que desarrolló una técnica para

almacenar la información sobre tarjetas perforadas. Las máquinas de Hollerith consistían en una perforadora pantográfica y un mecanismo lector de fichas, que comprendía una serie de casillas que constituían una clasificadora, así como unos contadores que formaban los elementos de una tabuladora. Esta técnica fue usada para la elaboración del undécimo censo de los EE.UU. en 1890; los

datos del censo fueron luego procesados en la máquina de Hollerith. El uso de este método se extendió rápidamente en el mundo industrializado.

4 Calculadoras electromecánicas

El desarrollo moderno de los ordenadores empezó en el bienio 1934-35 en Berlín, a partir de los trabajos de K. Zuse. Su primera computadora, la Z1, usaba el sistema binario, y las cuatro operaciones elementales eran realizadas mediante las operaciones lógicas *y*, *o* y *negación*. El control externo de la máquina era llevado a cabo mediante cintas perforadas (en este punto, Zuse desconocía las ideas de Babbage). Zuse planeó construir una versión mejorada de la Z1, la Z2, basada en relés electromecánicos; sin embargo, el estallido de la guerra en 1939 se interpuso. En 1941, Zuse completó los trabajos de la Z3, una máquina completamente funcional basada en relés; la Z3 ejecutaba instrucciones mediante tiras de papel de ocho canales, órdenes de una dirección, poseía una memoria con 2000 relés que guardaban 64 números de 22 bits, y una unidad aritmética con 600 relés. La Z3 hacía de quince a veinte sumas y restas por segundo, y una multiplicación en unos cuatro o cinco segundos. La máquina fue dañada durante un bombardeo en Berlín. Hacia 1945, Zuse ya había terminado la Z4, trasladada primero a Gotinga y luego a la región de Allgäu, esta máquina sobrevivió hasta el final de la guerra. Más tarde fue ampliada y puesta en servicio en el ETH¹ de Zürich. Durante el periodo 1951-1956 fue la única computadora en funcionamiento en toda Europa.



Figura 7: Konrad Zuse

El concepto de «bit» para designar un dígito binario fue introducido por vez primera en 1948 por el ingeniero y matemático Shannon. En su tesis de maestría *A Symbolic Analysis of Relay and Switching Circuits* describe cómo puede usarse el álgebra de Boole para el análisis y la optimización de interruptores en un circuito eléctrico. Más adelante (1948) en *A Mathematical Theory of Communication* propuso un modelo original para la transmisión de la información, lo que constituyó los fundamentos para el uso del sistema binario en lugar del decimal en las máquinas de calcular electrónicas.

Aparte de los desarrollos llevados en Alemania, unos tres años después, se empieza a construir en los EE.UU. una computadora moderna. En el periodo 1937-1942 Atanasoff y Berry, de la Universidad estatal de Iowa (EE.UU.), aplican los conceptos de la aritmética binaria, los circuitos lógicos y la memoria secundaria para construir la computadora Atanasoff-Berry (ABC), considerada como la primera computadora digital electrónica. Atanasoff puso al corriente de sus ideas a Mauchly, quien se serviría para diseñar el ENIAC ([22, 28]). Desgraciadamente, la ABC fue desmontada posteriormente ([47]).

En los EE.UU., el desarrollo de la tecnología, y muy particularmente la aplicada a los ordenadores, ha estado unida a la investigación financiada

¹Instituto Politécnico Federal de Suiza

por su gobierno con fines militares; las líneas de investigación prioritarias eran la criptografía (en relación con la transmisión de mensajes codificados y la interceptación de mensajes cifrados para su descodificación), las armas nucleares, y otras aplicaciones militares. No es de extrañar por tanto que durante la segunda Guerra Mundial, seguido del periodo de la guerra fría, estas tecnologías experimentaran un enorme desarrollo. En 1944, Aiken concluye el montaje de su primer modelo, la MARK I, que se denominó entonces la ASCC (calculadora controlada por secuencia automática). Esta máquina usaba tarjetas perforadas, relés y conexiones eléctricas; constaba de 70.000 partes, incluyendo 3.000 cojinetes y ochenta kilómetros de cables; pesaba cinco toneladas, y medía unos dieciséis metros de largo por dos y medio de alto. La MARK I realizaba cálculos con una precisión de veintitrés decimales; una suma tardaba unos 0'6 segundos, mientras que una división unos doce. Era controlada por una sucesión de instrucciones grabadas en una cinta de papel perforado. Las tarjetas perforadas eran usadas para la introducción de los datos y la salida de los mismos.

5 Computadoras electrónicas

Los modelos siguientes que Aiken diseñó, las MARK II-IV, eran máquinas totalmente electrónicas. Estas primeras computadoras estaban caracterizadas por la incorporación de válvulas de vacío, dando lugar al periodo conocido como *primera generación* de las computadoras electrónicas (1954-1959).



Figura 8: John P. Eckert

La siguiente máquina completamente electrónica fue montada en 1946, en la Universidad de Pensilvania, por Eckert y Mauchly y fue el Computador e Integrador Numérico Eléctrico, ENIAC ([22, 28]). Eckert era el responsable del diseño de los circuitos electrónicos. El ENIAC medía veinticuatro metros de largo por dos y medio de alto, poseía 1.500 relés y requería 150 kilowatios para funcionar. Era mil veces más rápido que sus predecesores electromecánicos, pudiendo ejecutar hasta cinco mil sumas por segundo. Uno de los problemas con los que Eckert se enfrentó fue el de resolver cómo una máquina con 18.000 válvulas podría funcionar cuando dichas válvulas no eran nada fiables. Este problema perduró hasta la aparición de los ordenadores basados en la tecnología de los transistores. En [10] se puede consultar un interesante documento con la historia del desarrollo del ENIAC. He aquí un extracto de la descripción técnica que figura en ese documento

El ENIAC estaba integrado por treinta unidades autónomas, veinte de las cuales eran acumuladores. Cada acumulador era esencialmente una calculadora de alta velocidad para sumar números de hasta diez cifras pudiendo incluso almacenar el resultado de sus cálculos. EL ENIAC era una máquina decimal, es decir cada uno de los diez dígitos de los acumuladores contaban de cero a nueve mediante una configuración

particular de circuitos electrónicos. Con objeto de acelerar ciertas operaciones aritméticas, el ENIAC poseía otros dispositivos especiales para multiplicar, dividir y extraer raíces cuadradas. . .

Otro país que desarrolló máquinas de calcular durante la segunda guerra mundial fue Inglaterra. Un modelo estuvo ya en uso en 1943, y fue bautizado con el nombre de COLOSSUS. Este computador poseía 1.500 válvulas, y realizaba los cálculos en base dos. El desarrollo de este modelo se basó parcialmente en las ideas del teórico de lógica matemática Turing ([8]).

Uno de los padres de los ordenadores modernos es John von Neumann ([2, 9]). Su concepción de autómata computacional está considerado como el anteproyecto básico de los ordenadores modernos. La idea fundamental de su trabajo era la de un ordenador controlado internamente. El programa de control ahora permanecía almacenado en la memoria del ordenador, y estaba sujeto a ser modificado convenientemente. Este carácter flexible conduciría directamente al desarrollo de los lenguajes de alto nivel actuales. En el periodo 1936-1938, von Neumann invitó a Turing al Instituto de Estudios Avanzados de Princeton, dirigiendo la defensa de su tesis doctoral. En 1946, von Neumann comenzó a trabajar en su concepto de ordenador, tarea que no culminó hasta 1951. El ordenador estaba destinado a la simulación numérica para el diseño de armas nucleares. Los primeros modelos de este ordenador se construyeron e instalaron en 1952 en Los Álamos, el MANIAC I, y un año después, en Oak Ridge (Tennessee), el ORACLE.

El primer ordenador de gran capacidad disponible para la venta al público fue el UNIVAC I (Computador Automático Universal), manufacturado en 1951 por la *Remington Rand UNIVAC* ([13]) y vendido a la Oficina del Censo de los EE.UU. Hasta cuarenta y seis unidades fueron vendidas posteriormente. Los responsables principales del diseño y construcción del UNIVAC I fueron Eckert y Mauchly. EL cuerpo principal del UNIVAC I medía 4'20 metros de largo, 2'40 metros de ancho y 2'55 metros de alto y estaba constituido por la unidad de memoria y toda la circuitería de la unidad central de procesamiento. El exterior estaba formado por puertas metálicas afianzadas con bisagras que podían abrirse para acceder al interior donde se situaban los estantes con toda la circuitería. El calor producido por las 5.200 válvulas de vacío era tan intenso que hacía necesario la instalación de un sistema de aire acondicionado. El sistema en total pesaba unas trece toneladas y consumía alrededor de 125 kilovatios. El UNIVAC I estaba destinado para gestionar grandes volúmenes de datos (censo, nóminas de las empresas, etc.); desde el principio, sus creadores Eckert y Mauchly desecharon el uso de tarjetas perforadas para la transmisión de la información por su lentitud en el proceso de datos; por esa razón, la *Remington Rand* decidió montar un sistema a base de cintas magnéticas. Este sistema estaba constituido por un total de ocho unidades de cinta, denominadas UNISERVO, cada una de ellas de 1'80 metros de altura por 0'9 metros de



Figura 9: John W. Mauchly

ancho. Algunos de los UNIVAC I que se vendieron en la década de los 1950 estuvieron funcionando hasta la década de los 1970. (En [13] se puede encontrar una descripción más detallada sobre el UNIVAC I.)

Hasta 1953 no se comenzó a producir industrialmente la fabricación de ordenadores. Ese año el primer ordenador de la *Engineering Research Associates*, el ERA 1103, fue dispuesto para la investigación en criptografía; el siete de abril de ese mismo año, IBM montó la máquina IBM 701, el primer ordenador electrónico que esta firma manufacturó y comercializó disponible para la comunidad científica; después vinieron los modelos más avanzados de la misma serie: 702, 704, 705 y 709 ([49]).

En marzo de 1960 se construyó el ordenador más grande de su época, tanto en dimensiones como en prestaciones, el *Remington Rand Univac LARC*, (Livermore Advanced Research Computer), montado en el laboratorio de Radiación de la Universidad de California ([7]). Una nave fue construida expresamente para alojar a este monstruo: estaba estructurado en cuatro partes, cada una de ellas de unos 6 metros de largo, 1'20 de ancho y 2'10 de alto. Además había una formación de doce tambores de cabeza flotante, cada uno de unos 1'20 metros de ancho, 0'90 de profundidad, y 1'50 de alto; el sistema iba acompañado de ocho unidades de cinta magnética, una unidad lectora de tarjetas perforadas y una impresora. Los tambores constituían la memoria secundaria con una capacidad de almacenamiento por tambor de 250.000 palabras de doce dígitos decimales. El Univac LARC funcionaba con la aritmética decimal (al igual que su predecesor el UNIVAC I) representando números enteros de hasta doce cifras. Una suma de dos números enteros se realizaba en cuatro microsegundos, mientras que para una multiplicación se invertía doce. Por otro lado, también admitía la posibilidad de trabajar en como flotante, con una representación de veintidós dígitos decimales. Desde un punto de vista histórico, el Univac LARC está considerado como el primer «supercomputador» y demostró ser de gran utilidad para la comunidad científica.

El enorme desarrollo que ha experimentado en las últimas décadas la tecnología, ha repercutido particularmente en el desarrollo de los ordenadores; en realidad, tecnología y capacidad de computación son conceptos que se alimentan uno del otro: un avance del primero viene acompañado de mejoras en las prestaciones de los modelos de ordenadores, y recíprocamente, una mejoría en las capacidades de computación repercute casi instantáneamente en el desarrollo general de la tecnología. Estos avances en la computación se han producido gracias a la introducción de nuevos materiales y nuevas técnicas en la construcción y disposición de los elementos en que se componen los ordenadores actuales. Por ejemplo, el descubrimiento del transistor en 1948 supuso un gran avance cualitativo en el diseño de los futuros ordenadores, al sustituir las válvulas de vacío por estos nuevos dispositivos, lo que permitió construir máquinas más fiables, menos voluminosas, que consumían menos energía, que desprendían menos calor, y que, en suma, eran menos susceptibles al fallo de alguno de sus componentes. Las válvulas de vacío dejaron de formar parte de los componentes de las computadoras a partir de 1959; la introducción

de las máquinas totalmente transistorizadas inician el periodo de la *segunda generación* de las computadoras (1959-1964).

Pero sin duda, una de las causas de este espectacular avance se debe al desarrollo de la microelectrónica y la nanotecnología. En efecto, la posibilidad de fabricar circuitos más pequeños ha hecho posible la minituarización de muchos elementos esenciales del ordenador: tarjetas, procesadores, chips, discos duros, etc. La incorporación de los circuitos integrados en la arquitectura del ordenador marca el inicio de la *tercera generación* de las computadoras (1964-1975). Todo esto ha redundado a su vez en un aumento sustancial de las capacidades de las memorias del ordenador (principal o RAM, y secundaria, discos duros, unidades magnetoópticas, disquetes, pastillas de memoria, etc.). Con la instalación de microprocesadores en el ordenador arrancó la *cuarta generación* de las computadoras (1975-1990). Actualmente, la *quinta generación* continúa en desarrollo. Esta etapa está caracterizada por la incorporación de técnicas de inteligencia artificial en el funcionamiento del ordenador; aquí se incluyen, entre otras, que el ordenador esté capacitado de tomar decisiones, razonar o responder al lenguaje humano. ¿Ciencia ficción? el tiempo lo dirá...

6 Los supercomputadores de Cray

La historia de la supercomputación posee un nombre propio, y es Seymour Cray. En 1972 Cray fundó la empresa *Cray Research* con el objetivo de diseñar y montar los ordenadores más potentes del mundo. En 1976 ya disponía del Cray-1, la primera versión de lo que sería su propia generación de superordenadores. El Cray-1 poseía unas características que lo hacían único en muchos aspectos: incorporada el primer procesador vectorial, y al mismo tiempo el procesador escalar más rápido de su época, con una capacidad de un millón de palabras de sesenta y cuatro bits y un ciclo de reloj de 12'5 nanosegundos (133 millones de operaciones en coma flotante por segundo o 133 megaflops). El primer Cray-1 fue instalado en 1976 en el laboratorio nacional de Los Alamos con un coste de casi nueve millones de dólares. La compañía llegó a montar dieciséis Cray-1. Otro de los aspectos innovadores de esta maravilla era su arquitectura. Su forma exterior era la de una C (al mismo tiempo hacía honor a su nombre) lo que permitía concentrar la circuitería en un espacio reducido (ningún cable superaba los ciento veinte centímetros) implicando a su vez un aumento de la velocidad de todo el sistema. Asimismo, esta concentración de elementos electrónicos iba acompañada de un extraordinario aumento de calor, lo que exigió desarrollar un sofisticado sistema de refrigeración a base de freón líquido. En 1985, apareció el siguiente gigante de la familia, el Cray-2; con un ciclo de reloj de 4'1 nanosegundos, se mostró entre seis y doce veces más rápido que el Cray-1 (hasta 1'95 gigaflops), poseía una memoria principal de cuatro Gb, memoria secundaria de 256 Gb, y 240.000 chips. El sistema de refrigeración volvía a ser sofisticado y combinaba agua fría, freón líquido, flúor inerte y nitrógeno líquido. El coste del Cray-2

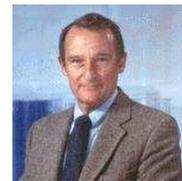


Figura 10: Seymour R. Cray

superaba los diez millones de dólares. En 1982, *Cray Research* lanzó al mercado de la supercomputación su primer modelo multiprocesador, el Cray X-MP. A partir de 1985, Seymour Cray comenzó a desarrollar el Cray-3. La característica principal del Cray-3 se encontraba en el hecho de que el procesador se construiría con chips que usan arsenuro de galio, un semiconductor más rápido que el silicio.

Los modelos Cray-1 y Cray-2 tuvieron una acogida muy favorable en el mercado, sin embargo, con el Cray-3 no fue así. Durante las pruebas realizadas con los semiconductores basados en arsenuro de galio, surgieron muchas dificultades, lo que provocó un retraso importante en la salida y en su puesta en funcionamiento. Al final, un sólo Cray-3 se montó, y se instaló el 24 de mayo de 1993 en el Centro de Cálculo Científico del NCAR (National Center for Atmospheric Research) en Boulder (Colorado, EE.UU.). En 1988, apareció el modelo multiprocesador Cray Y-MP, el primer supercomputador con una velocidad de cálculo superior a un gigaflops en la mayoría de las simulaciones. Con una arquitectura basada en varios procesadores a 333 megaflops, el Cray Y-MP llegó a alcanzar una velocidad de 2'3 gigaflops. Durante los años siguientes, la compañía fue sacando al mercado otros modelos de Cray ([54]). Por ejemplo, en 1993 apareció el Cray T3E, un modelo que incluía la técnica del procesamiento masivo en paralelo; dos años más tarde, el siguiente modelo, el Cray T3E-1200E se convirtió en el primer superordenador con una velocidad de ejecución de un teraflops (más de un billón de operaciones en coma flotante por segundo). Los últimos modelos que se han construido son, en 2005, el Cray XT3, un superordenador con una arquitectura de 1.100 procesadores en paralelo y una velocidad de cálculo entorno a los 5'9 teraflops, y en 2006 el siguiente de la familia, el Cray XT4, la última generación de sistemas masivos multiprocesador; las cifras lo dicen todo del supercomputador Cray XT4: hasta 30.508 procesadores y una potencia máxima de cálculo de 318 teraflops.

Desde la aparición del primer superordenador, otras grandes compañías se interesaron por desarrollar sus propios modelos. En este sentido, es bueno recordar que en 1986 ya existían en todo el mundo alrededor de ciento treinta sistemas de este tipo, de ellos más de noventa habían salido de la factoría *Cray Research*. Para profundizar más acerca de la supercomputación, especialmente sobre Cray, pueden consultarse [12, 25, 55].

7 Los protagonistas



Figura 11: P. Núñez

PEDRO NÚÑEZ (1502-1578) nació en Alcácer do Sal (Portugal). Estudió en Lisboa obteniendo un grado en medicina, y luego en Salamanca. Fue profesor de matemáticas en la Universidad de Coimbra. Más tarde ejercería como cosmógrafo. Núñez, que durante mucho tiempo residió en España, descubrió la curva loxodrómica al resolver el problema del rumbo fijo, es decir, manteniendo un ángulo constante con la meridiana; se creía entonces que dicha curva era necesariamente un círculo máximo, pero Núñez probó rigurosamente que dicha curva se acercaba asintóticamente en forma

espiral a uno de los polos. En cosmografía resolvió el problema del crepúsculo mínimo. Su nombre latinizado ha pasado a la posteridad por el instrumento de medida que él mismo ideó: el nonius (más tarde mejorado por Vernier). En matemáticas escribió dos obras, una en latín, *De erratis Orontii Finei*, y la otra en español titulada *Tratado de Álgebra*.

EDMUND GUNTER (1581-1626) nació en Hertfordshire (Inglaterra). Miembro de la Iglesia de Cristo y ordenado sacerdote anglicano en 1615. Desde 1619 ejerce también como profesor de astronomía en la Universidad de Gresham (Londres), puesto que ocupa hasta su muerte. Colega y amigo de H. Briggs (1561-1631), Gunter publicó en 1620 su *Canon Triangulorum*, o *Tabla de senos y tangentes artificiales* que contiene tablas de logaritmos de senos y tangentes con siete cifras decimales. (las palabras coseno y cotangente se deben a él). Fabricó un aparato mecánico (la escala de Gunter) para multiplicar números basados en logaritmos mediante una escala simple y una pareja de divisores. Los marinos lo denominaban el *gunter*, e influyó de manera decisiva en el posterior desarrollo de la regla de cálculo. Gunter describe esta herramienta en su obra *Description and Use of the Sector, the Crosse-staffe and other Instruments*. También realizó diversas aportaciones a la navegación al publicar en 1623 *New Projection of the Sphere*, estudió la declinación magnética y fue el primero en observar la variación secular.

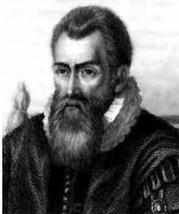


Figura 12: John Napier

JOHN NAPIER (1550-1617), barón de Merchiston. Napier también escrito Neper, matemático escocés y escritor teólogo que introdujo el concepto de logaritmo como herramienta matemática para calcular. Napier empezó a trabajar con logaritmos probablemente en 1594, elaborando gradualmente su sistema de cálculo donde raíces, productos y cocientes podían ser rápidamente determinados a partir de unas tablas que mostraban las potencias de un número prefijado que era usado como base.

Las contribuciones de este poderoso invento matemático están contenidos en sus dos tratados *Mirifici logarithmorum canonis descriptio* (1614) y *Mirifici logarithmorum canonis constructio* publicada dos años después de su muerte.

WILHELM SCHICKARD (1592-1635) nació en Herrenberg (hoy en Alemania) y estudió teología y lenguas orientales en Tubinga. En 1613 es ordenado sacerdote de la iglesia luterana. A partir de 1619 es profesor de hebreo y arameo en la Universidad de Tubinga. En 1631 es nombrado profesor de astronomía. Sus trabajos de investigación incluyen temas de astronomía, matemática y topografía. Schickard inventó muchas máquinas, algunas de ellas calculaban fechas astronómicas; también diseñó métodos para construir mapas físicos que resultaron ser mucho más precisos que los que se usaban en su época. En 1623 inventó una máquina de calcular, la cual fue usada por Kepler para el cálculo de efemérides.



Figura 13: Wilhelm Schickard

SIR SAMUEL MORLAND (1625-1695) nació en Berkshire (Inglaterra). Estudió matemáticas en la Universidad de Cambridge. Actuó como diplomático en Suecia (1653) y en Italia (1654), y más tarde se dedicó a inventar máquinas mecánicas e hidráulicas. Entre sus inventos cabe destacar una calculadora para sumar dinero (en el sistema antiguo inglés), una máquina para multiplicar y dividir basada en las fichas de Napier, una máquina para cálculos trigonométricos, una especie de megáfono, bombas hidráulicas (una fue patentada en 1661), dos tipos diferentes de barómetros, etc. Morland ostentó diversos puestos oficiales, siendo uno de ellos el de Maestro de Mecánica del Rey (1681), por haber logrado extraer agua del Támesis hasta el palacio de Windsor mediante una bomba de vapor.



Figura 14: Samuel Morland



Figura 15: Blaise Pascal

BLAISE PASCAL (1623-1662) nació en Clermont (hoy conocida por Clermont-Ferrand, Francia). Pascal mostró desde temprana edad un gran interés por la matemáticas; sin haber recibido ninguna educación matemática, con doce años demostró por su cuenta que la suma de los ángulos de un triángulo equivale a dos rectos. A partir de ahí comienza propiamente su educación matemática. A los dieciséis años ya había demostrado varios teoremas de geometría proyectiva. En 1640 publica su *Ensayo sobre las secciones cónicas*.

Es el inventor de la primera calculadora digital, que fabricó para ayudar a su padre en las tareas de recaudación de impuestos; el invento le mantuvo ocupado durante tres años entre 1642-45; este aparato, denominado la *Pascalina*, se parecía a una calculadora mecánica de los años 1940. Hacia 1646 comienza a interesarse en el estudio de la presión atmosférica, lo que le lleva en 1647 a demostrar la existencia del vacío. En 1648, Pascal observa que la presión atmosférica decrece con la altura, y dedujo que el vacío existía por encima de la atmósfera. A partir de 1653 se dedica a las matemáticas y la física, publicando su *Tratado sobre el equilibrio de los líquidos*, en el que figura la ley de presión de Pascal. Estudia también las secciones cónicas en *La generación de las secciones cónicas*. Pascal no fue el primero en estudiar del triángulo de Pascal (también conocido como triángulo de Tartaglia), no obstante, el análisis que realiza en *Tratado sobre el triángulo aritmético* fue el más importante sobre dicho tema, y junto con los trabajos de Wallis, las aportaciones de Pascal en relación con los coeficientes del binomio influyeron en el descubrimiento por Newton del teorema general del binomio válido para potencias fraccionarias o negativas. También mantuvo correspondencia con P. de Fermat lo que le llevó a establecer los fundamentos de la teoría de la probabilidad. Sus últimos trabajos tratan sobre la cicloide.

GOTTFRIED WILHELM VON LEIBNIZ (1646-1716), filósofo y matemático alemán. En 1661, cuando sólo contaba catorce años ingresó en la Universidad

de Leipzig. En 1672, se marchó a París, donde recibió clases de matemáticas y físicas del matemático holandés C. Huygens, que lo inició en las matemáticas de los pensadores modernos. En 1673 fue invitado por la *Royal Society* de Londres para mejorar su máquina calculadora. sin embargo, él se dedicó a estudiar la geometría de los infinitesimales. De vuelta a París en 1675, empezó a trabajar en los aspectos básicos del cálculo diferencial. Leibniz fue el primero en utilizar la notación moderna del cálculo integral y diferencial; el 21 de noviembre de 1675, escribió un trabajo en el que aparecía la notación $\int f(x) dx$ por primera vez, y daba la fórmula de la derivada del producto. En 1676 descubrió la relación $d(x^n) = nx^{n-1}dx$ y probó que era cierta tanto para números enteros como racionales. En 1684, Leibniz publicó *Nova methodus pro maximis et minimis, itemque tantetibus, qua nec irrationales quantitates moratur* en la revista *Acta Eruditorum*; en dicho trabajo aparecen, sin demostración, las fórmulas de las derivadas de las potencias, el producto y el cociente. En 1686 publicó en la misma revista el trabajo *De geometria recondita indivisibilium atque infinitarum* sobre el cálculo integral, donde aparecía por primera vez el símbolo \int para designar la integral; en dicho trabajo muestra la relación entre la derivación y la integración en el sentido de una es la inversa de la otra. Leibniz también fue el primero en utilizar el término ‘función’.

CHARLES BABBAGE (1791-1871) matemático y economista político inglés nacido en Teignmouth durante la revolución industrial. Babbage desempeñó una papel crucial en el desarrollo científico y técnico de su época. Profesor de matemáticas en la Universidad de Cambridge, junto con otros colegas introdujo la notación de Leibniz en el cálculo, lo que produjo una enorme transformación en las matemáticas, tanto en Cambridge como en toda Gran Bretaña. Sus logros más importantes fueron sus detallados diseños de sus dos máquinas de calcular: la máquina para la realización de tablas de diferencias finitas, y su ambicioso *Ingenio Analítico*. Estas máquinas eran calculadoras flexibles y potentes, controladas por tarjetas perforadas.



Figura 16: Charles Babbage



Figura 17: Ada Augusta

ADA AUGUSTA, condesa de Lovelace (1815-1852), científica y matemática británica, hija del ilustre poeta lord Byron. Al poco de nacer, sus padres se separaron, quedando a la custodia de su madre, la cual no deseaba que su hija fuera poeta como su padre, sino matemática. Con treinta años, en una carta dirigida a su madre, le pregunta que si ella no le puede dar poesía, ¿podría a cambio darle ciencia poética? Cuando contaba diecisiete años, conoce a Mary Fairfax Somerville (1780-1872), una mujer extraordinaria que había traducido al inglés los trabajos de Laplace, y cuyos textos eran usados en la Universidad de Cambridge. Somerville animó a Ada en sus estudios de matemáticas, pero además tratando de situar las matemáticas y la tecnología en

un contexto humano apropiado. En 1834, empieza a interesarse por las ideas de Babbage y su máquina de calcular. En 1843, contrae matrimonio con el conde de Lovelace, y trabaja con unos apuntes de Babbage a los que ella añade sus propias ideas, para luego mostrárselos a él mismo. A partir de entonces, no dejan de escribirse entre ellos. Ada sugirió a Babbage la escritura de un programa para el cálculo de los números de Bernoulli (hoy día considerado como el primer programa de ordenador de la historia).



Figura 18: Ramón Vereá García

RAMÓN SILVESTRE VEREA GARCÍA (1833-1899) nació en Curantes (Galicia). Inició sus estudios universitarios en 1847 en la facultad de Filosofía y Letras de Santiago de Compostela, que no llegó a finalizar. Posteriormente emigró a América, siendo su primer destino Cuba, donde trabajó como maestro de escuela y periodista; también escribió en esa época dos novelas *La cruz de piedra* y *Una mujer con dos maridos*. En 1865 se trasladó a Nueva York, ciudad que en esos momentos se encontraba en pleno auge y efervescencia. La visión que produce la ciudad a Ramón Vereá ejercerá una influencia notable en él: en su opinión, España iba en la dirección equivocada, pues para desarrollarse correctamente necesitaba menos escritores, abogados y periodistas, y más ingenieros, inventores, técnicos y científicos. Algunos amigos americanos le recriminan que los españoles no son capaces de adaptarse a los nuevos tiempos que corren, al progreso. A partir de entonces, Ramón Vereá decide involucrarse en la tarea de construir una máquina de calcular innovadora, capaz de realizar multiplicaciones y divisiones de forma inmediata (a diferencia de los modelos existentes en esa época, que multiplicaban por sumas reiteradas). Con su nueva calculadora, Ramón Vereá quiso demostrar que «un español puede inventar igual que un americano», y sin duda que lo consiguió: en 1878 fue galardonado con la Medalla de Oro de la Exposición Mundial de Inventos de Cuba. La noticia de la máquina de calcular se publicó en diversos medios de comunicación relevantes: la revista *Scientific American* y el diario *The New York Herald* entre otros. Patentó su máquina el 10 de septiembre de 1878 (patente n.º 207918), pero no mostró interés alguno en comercializarla ni en darla a conocer. En declaraciones que aparecieron en el *Herald* opinaba lo siguiente:

Sólo me movía el afán de contribuir con algo al avance de la ciencia y un poco de amor propio. Yo soy un periodista y no un científico y, además, lo que yo pretendía demostrar... ya está demostrado.

WILLGODT THEOPHIL ODHNER (1845-1905) nació en Wärmaland (Suecia). Estudió en el Instituto Tecnológico de Estocolmo graduándose en ingeniería. En 1869 emigró a Rusia donde fue empleado por Ludvig Nobel. Más tarde fue contratado como ingeniero por el banco Imperial de San Petersburgo. En 1874 inventó la máquina de calcular conocida con el nombre de *aritmómetro de*

Odhner. Éste y otros inventos posteriores le reportaron fama y dinero, lo que le permitió montar una fábrica de máquinas de calcular. Al estallar la revolución rusa en 1917, se volvió de nuevo a Suecia, trasladando al mismo tiempo su fábrica. Un descendiente de la firma original se unió a la compañía Facit que comercializó la serie de calculadoras Facit.

FRANK STEPHEN BALDWIN (1838-1925) fue un inventor estadounidense. Hacia 1870 inventó diversos dispositivos como el anemómetro o un mecanismo para contar el número de pasajeros en un transporte público. En una compañía de seguros de vida conoció la máquina de calcular de Thomas de Colmar y eso lo animó a desarrollar la suya propia. En 1874 patentó su primera máquina de sumar, que denominó *Aritmómetro*. Esta y otra máquina también suya fueron exhibidas en Instituto Franklin de Filadelfia, y por ello Baldwin recibió la distinción *John Scott Medal* en calidad de invento del año. En 1900 patentó la *Baldwin Computing Engine*, una máquina capaz de multiplicar y dividir en un golpe, y en 1908 patentó el *Baldwin Recording Calculator*, una máquina calculadora-registradora provista de teclado. A partir de 1911 se asoció con el abogado Jay R. Monroe dando lugar a la *Monroe Calculating Machine Company*, la actual *Monroe Systems for Business*, la cual se encargaría de construir y comercializar las calculadoras de Baldwin.

LEONARDO TORRES QUEVEDO (1852-1936) ingeniero e inventor español, nacido en Santa Cruz de Iguña (Molledo, Santander). Su padre era ingeniero. En 1868 termina los estudios de bachillerato en Bilbao, y se desplaza a París para continuar sus estudios durante otros dos años. En 1871, Leonardo ingresa en la Escuela Oficial del Cuerpo de Ingenieros de Caminos, finalizando sus estudios en 1876. Ejerce brevemente la profesión, en los ferrocarriles, y viaja por Europa, impregnándose del progreso científico y de los nuevos adelantos de la técnica en una época en que comenzaban las aplicaciones de la electricidad. A su regreso, se instala en su provincia natal, donde se casa en 1885 y que será la residencia del matrimonio durante sus primeros años. Ocho hijos serán el fruto de este matrimonio; uno de ellos también sería ingeniero, y colaboraría con su padre en diversos trabajos. Torres Quevedo dedica estos años al estudio y a la experimentación por cuenta propia. En 1893, presenta su primer trabajo científico, iniciándose un período de frenética actividad de unos treinta años de duración. Es de destacar que hasta que empezó a ser conocido por sus inventos él mismo sufragó sus investigaciones. En 1899 se traslada a Madrid. Desde hacía unos años disfrutaba de considerable fama y prestigio. En 1901 es nombrado Director del recién creado «Laboratorio de Mecánica Aplicada» (después, de Automática), cargo en el que desarrollaría gran parte de su producción científica posterior. Este laboratorio sería pionero en nuestro país en la fabricación de material de calidad para la experimentación científica. A lo largo de su fructífera etapa investigadora, diseñó un gran número de dispositivos e inventos que le valieron un reconocido prestigio a nivel mun-



Figura 19: Leonardo Torres Quevedo

dial, entre los que acaba destacar los dirigibles, los transbordadores teleféricos, el Telekino (precursor del control remoto), las máquinas analógicas de cálculo, los autómatas ajedrecistas, etc. La muerte de Torres Quevedo sucede durante la Guerra Civil; el acontecimiento pasó inadvertido en España, sin embargo, la noticia alcanzó cierta resonancia en el extranjero.



Figura 20: William S. Burroughs

WILLIAM SEWARD BURROUGHS (1855-1898) nació en las afueras de Nueva York. Durante la década de los 1870 se interesó por el diseño y montaje de una máquina de sumar; esto ocurrió mientras trabajaba como empleado en el *Cayuga County National Bank*. Al principio de los años 1880 se trasladó a St. Louis (Missouri) donde trabajó en la *Boyer Machine Company*; fue en esa época cuando comenzó a montar su calculadora, que posteriormente patentó (1888). Junto con otros tres socios, en 1886 fundó su propia empresa la *American Arithmometer Company* con el único objetivo de fabricar y vender su máquina: el precio de venta al público era de 475 dólares. En 1887 ya se habían colocado cincuenta unidades. Más adelante, Burroughs mejora la máquina y en 1895 las ventas llegaron hasta las 284 unidades. Ese mismo año, la empresa abre una sucursal en Inglaterra, y en el periodo 1895-1900 se vendieron 972 unidades. En 1953, la compañía pasó a denominarse *Burroughs Corporation*; en 1986 se fusiona con la *Sperry Rand Corporation* creándose la conocida *Unisys Corporation*.

HERMANN HOLLERITH (1860-1929) estadígrafo estadounidense; inventor de las máquinas estadísticas de tarjetas perforadas (los primeros modelos datan de 1880 a 1889). En 1896, Hollerith funda su propia empresa, la *Tabulating Machine Company*, que daría lugar más tarde, después de una fusión con otra empresa, a la todopoderosa *International Business Machines Corporation*, más conocida por IBM.

HOWARD HATHAWAY AIKEN (1900-1973) nació en Nueva Jersey (EE.UU.). Estudió en la Universidad de Wisconsin y se doctoró en Harvard en 1939. Siendo estudiante-colaborador en el departamento de Física en Harvard, vislumbró la construcción de una computadora grande. El objetivo era la resolución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales, del que no se conocía la solución exacta. La idea de Aiken era adaptar las máquinas de tarjetas perforadas de Hollerith. De este modo, desarrolló su primer modelo, la MARK I, en 1944, en colaboración con la IBM. Tres años después ya contaba con la MARK II, una computadora totalmente electrónica, y trabajó en las MARK III y MARK IV hasta 1952.



Figura 21: Howard H. Aiken

KONRAD ZUSE (1910-1995) inventor alemán de la computadora binaria Z1, destruida tras un bombardeo durante la segunda guerra mundial. Zuse

estudió ingeniería mecánica en la Universidad Técnica de Berlín. Después de graduarse, montó una computadora programable, la Z1, en el apartamento de sus padres, a pesar de las limitaciones de espacio. Desarrolló dos máquinas más, las Z2 y Z3, antes del final de la guerra, pero no pudo convencer al gobierno nazi para que financiara sus proyectos. Con los restos de la Z3 se marchó a Zürich, donde construyó la Z4, que fue usada con éxito en el Instituto Politécnico Federal de Suiza (Eidgenössischen Technischen Hochschule, ETH). También desarrolló un lenguaje de programación, que él denominó *Plankalkül*, que él preparó para escribir un programa para jugar al ajedrez. La Z4 fue explotada en el Instituto de Matemática Aplicada del ETH hasta el año 1955.

JOHN VINCENT ATANASOFF (1903-1995) nació en Nueva York. Una regla de cálculo que su padre había adquirido le hizo despertar el interés por los principios matemáticos que la regían, los logaritmos, y las funciones trigonométricas. Su madre era profesora de matemáticas y, a través de ella, Atanasoff, a la edad de nueve años, conoció el cálculo diferencial, series, logaritmos, representación de números en otras bases, etc. En 1925 obtuvo el grado de ingeniería eléctrica por la Universidad de Florida; ese mismo año es contratado por la Universidad estatal de Iowa, donde cuatro años más tarde obtuvo el grado de maestría en matemáticas, y en 1930 se doctoró en física teórica. A partir de entonces se interesó por desarrollar máquinas electrónicas que permitieran resolver los problemas de cálculo que le surgieron durante la realización de su tesis doctoral. En 1936 construyó el «laplaciómetro» una pequeña calculadora analógica que permitía estudiar la geometría de superficies. Atanasoff consideraba que esta calculadora poseía los mismos defectos que los demás aparatos analógicos, donde la precisión dependía de la actuación de otras partes de la máquina. Durante el periodo 1939-1941, y con la ayuda de Berry, entonces un brillante estudiante de ingeniería eléctrica, se dedicó a desarrollar la que posteriormente sería la computadora ABC (*Atanasoff-Berry Computer*). Al estallar la primera guerra mundial, el proyecto se detuvo. Más tarde fue contratado por las fuerzas armadas de los EE.UU., ocupando diversos puestos de relevancia. A lo largo de su vida académica y profesional recibió muchos premios.



Figura 22: John V. Atanasoff

CLIFFORD EDWARD BERRY (1903-1995) nació en el estado de Iowa (EE.UU.). Desde una edad muy temprana se interesó por la ingeniería eléctrica, título que alcanzó en 1939. Un profesor suyo, conociendo las capacidades de Berry, le presentó a Atanasoff con el objeto de que trabajase en el proyecto de desarrollar una computadora electrónica digital, la que posteriormente sería la ABC. Los detalles de la máquina se plasmaron en el trabajo de 1940, junto con Atanasoff, *Computing Machines for the Solution of Large Systems of Linear Algebraic Equations*.



Figura 23: Clifford E. Berry

Se doctoró en 1948 con un trabajo en física. En 1949 ocupó el cargo de jefe de física en la *Consolidated Engineering Corporation* de Pasadena, y en 1952 pasó a ser director asistente de investigación. A partir de entonces desempeñó puestos académicos e de investigación relevantes.

JOHN WILLIAMS MAUCHLY (1907-1980) nació en Ohio (EE.UU.) y estudió en la Universidad John Hopkins de Baltimore. Aunque comenzó estudiando ingeniería, pronto se interesó por las ciencias puras y la física, doctorándose en 1932. En 1940 despierta su atención por el desarrollo de las computadoras electrónicas, las cuales combinan su interés por la física y la ingeniería. Su tema central era el desarrollo de circuitos eléctricos para las computadoras. En 1941, sigue un curso de electrónica, especialmente diseñado para la defensa, en la Escuela Moore de Ingeniería Eléctrica de la Universidad de Pensilvania; el curso fue impartido por Eckert, y a partir de entonces, se forja entre los dos hombres una larga y fructífera amistad, que influiría en el posterior desarrollo de los ordenadores electrónicos en los EE.UU. Después de la absorción de la *Eckert-Mauchly Computer Corporation*, Mauchly crea la *Mauchly Associates* que presidiría de 1959 a 1965.

JOHN PRESPPER ECKERT (1919-1995) nació en Filadelfia (EE.UU.). Estudió en la Escuela Moore de Ingeniería Eléctrica de la Universidad de Pensilvania, donde se graduó en 1941. Junto con Mauchly, construyó en 1943-46, el Computador e Integrador Numérico Eléctrico, llamado *ENIAC*. Eckert diseñó esta máquina para que trabajara en base diez (y no en binario, como los ordenadores actuales), lo que la hacía mucho más compleja. En 1946 abandona, junto con Mauchly, la Universidad de Pensilvania, y fundan la *Electronic Control Company* que se encargaría de construir el nuevo modelo con funcionamiento binario, el BINAC (computador automático binario); empezó a funcionar a partir de 1950, y los datos eran grabados en cintas magnéticas en vez de tarjetas perforadas. La *Electronic Control Company* pasaría a llamarse la *Eckert-Mauchly Computer Corporation*, que recibiría el pedido de construir la *Universal Automatic Computer* (UNIVAC), considerada como la primera computadora comercializada en los EE.UU. (se llegaron a montar cuarenta y seis unidades). La UNIVAC introducía la novedad de manejar datos alfanuméricos. En 1950, la *Remington Rand Corporation* absorbe la empresa de Eckert y Mauchly, pasando Eckert a ser ejecutivo de la empresa resultante; en 1955, ésta se fusiona con la *Sperry Corporation* para formar la *Sperry Rand Corporation*, que a su vez, en 1986, se fusiona con la *Burroughs Corporation*, convirtiéndose en *Unisys Corporation*. Eckert se jubila de la directiva de Unisys en 1989, pero seguiría ejerciendo como asesor de la misma.

CLAUDE ELWOOD SHANNON (1916-2001) nació en Gaylor (Michigan, EE.UU.) Se licenció en matemáticas e ingeniería eléctrica en 1936 por la Universidad de Michigan. Más tarde se trasladó al Instituto Tecnológico de Massachusetts. En su obra *A Symbolic Analysis of Relay and Switching Circuits* explica el uso del álgebra de Boole para diseñar y optimizar circuitos eléctricos provistos de relés. Trabajó en una versión inicial de un computador que permitiera resolver numéricamente ecuaciones diferenciales; lo llamó el analizador diferencial. En 1941 empieza a trabajar en la compañía AT&T Bell Telephones en Nueva Jersey en calidad de investigador matemático. Allí permaneció hasta 1972. En 1948 publicó *A Mathematical Theory of Communication* (The Bell System Technical Journal) un trabajo fundamental en el que se describe un nuevo modelo de información y comunicación: la transmisión de imágenes, texto y sonido mediante una codificación compuesta exclusivamente por ceros y unos. Es en esta obra donde Shannon introduce por primera vez el término «bit» para designar un dígito binario (el valor cero o el uno). También se interesó por temas de inteligencia artificial. Por ejemplo, en su trabajo *Programming a computer for playing chess* (1950) figura un programa para jugar al ajedrez. Shannon recibió diversos premios en reconocimiento a sus trabajos y aportaciones.



Figura 24: Claude E. Shannon



Figura 25: Alan M. Turing

ALAN MATHISON TURING (1912-1952) nacido en Londres, es uno de los pioneros en el campo de la computación. Empezó la carrera en el King's College de la Universidad de Cambridge en 1931. Como matemático, aplicó el concepto de algoritmo a los ordenadores digitales; sus investigaciones sobre las relaciones entre las máquinas y la naturaleza dieron lugar al campo de la inteligencia artificial. Gracias a una beca, se traslada a la Universidad de Princeton, donde empieza a investigar lo que después se llamaría la *máquina de Turing*; esta máquina virtual es esencialmente lo mismo que un ordenador multiuso actual. En la época de Turing, los ordenadores se diseñaban para un objetivo concreto; la idea central que él vislumbraba es que los ordenadores deberían estar preparados para realizar cualquier tarea. Durante la segunda guerra mundial, Turing aplica sus ideas en el ministerio de las Comunicaciones de Gran Bretaña; ahí usa sus conocimientos matemáticos para descifrar los códigos que los alemanes utilizaban en sus mensajes. La tarea no era nada trivial, puesto que los alemanes habían desarrollado una computadora, denominada *Enigma*, capaz de generar códigos que constantemente iban cambiando. Turing y sus colegas científicos trabajaron a su vez en un computador, el COLOSSUS, que con éxito lograría descifrar los códigos creados por Enigma a tiempo. Después de la guerra, continuó trabajando en otros proyectos de construcción de ordenadores digitales.



Figura 26: John von Neumann

JOHN VON NEUMANN (1903-1954) matemático nacido en Budapest (originalmente, János von Neumann) nacionalizado estadounidense. Se matriculó en matemáticas en la Universidad de Budapest en 1921, pero no asistió a las clases; en su lugar, estudió química en la Universidad de Berlín durante el periodo 1921-1923; a pesar de todo, las notas de los exámenes de matemáticas en Budapest fueron sobresalientes; en esta universidad se doctoró en 1926. Dio clases en Berlín entre 1926 y 1929 y en Hamburgo de 1929 a 1930. Gracias a una beca, realizó estudios postdoctorales en la

Universidad de Gotinga bajo la dirección de Hilbert. A partir de 1930, es profesor visitante en la Universidad de Princeton, y en 1931 es nombrado profesor, puesto que comparte con científicos como Einstein, Morse o Weyl. Trabajó en mecánica cuántica, álgebras de operadores lineales y acotados en espacios de Hilbert, teoría de juegos (donde demuestra el teorema míni-máx), funciones casi-periódicas, turbulencia, ecuaciones en derivadas parciales, y fue uno de los pioneros de la ciencia de la computación. También sugirió el método de la implosión como detonante de la bomba atómica y participó en el desarrollo de la bomba de hidrógeno. En 1955, el presidente Eisenhower le nombró miembro de la Comisión de la Energía Atómica, y recibió numerosos premios y condecoraciones.

SEYMOUR R. CRAY (1925-1996) nació en Chippewa Falls, (Wisconsin, EE.UU.). En 1950 se graduó en ingeniería eléctrica y en 1951 realizó un máster en matemáticas aplicadas por la Universidad de Minnesota. Durante la década de los 1950 trabajó en la compañía *Engineering Research Associates*, y en las que la sucedieron, la *Remington Rand Corporation* y la *Sperry Rand Corporation*, siendo uno de los principales responsables del diseño del ordenador UNIVAC 1103. En esa época, Cray ya construía máquinas basadas en la tecnología RISC (*Reduced Instruction Set Computing*), mucho antes de que la IBM introdujera el acrónimo en las años 1970. En 1957 se asoció con el también ingeniero William Norris para fundar la *Control Data Corporation*, CDC; fue allí donde diseñó el CDC 1604, uno de los primeros ordenadores comerciales completamente transistorizado. En 1963 montó el CDC 6600, considerado por muchos el primer supercomputador de la historia, desarrollando una velocidad de cálculo de hasta nueve megaflops, muy por encima del ordenador más potente de IBM. Luego diseñaría el CDC 7600 ofreciendo cuarenta megaflops. En 1972, Cray abandonó la CDC y se estableció por su cuenta, fundando la compañía *Cray Research*, donde produjo la serie más famosa de supercomputadores: Cray-1 en 1976, Cray-2 en 1985 y Cray-3 en 1993. El montaje de estos superordenadores reunía aspectos totalmente innovadores; sus componentes electrónicos se disponían en un espacio físico reducido, lo que a su vez provocaba un sensible aumento de calor tal que podría llegar a fundir la circuitería. Para resolver este problema, Cray tuvo que diseñar al mismo tiempo sofisticados sistemas de refrigeración. La compañía *Cray Research* desarrolló también modelos multiprocesador, aunque él no se ocupó de esos

proyectos. A finales de la década de los 1980 Cray se desvinculó de la compañía y fundó la SRC Computer donde seguiría construyendo superordenadores. En 1995 *Cray Research* fue absorbida por *Silicon Graphics*. Meses antes de su muerte por accidente de tráfico, Cray estaba dedicado a la construcción del superordenador SRC-6.

Sin duda alguna, Cray ha marcado un hito en la historia de la supercomputación. En palabras del consejero técnico de *Hewlett-Packard* Joel Birnbaum,

Seymour combinaba cualidades como la modestia, la dedicación y la brillantez, con una visión y un espíritu emprendedor de tal manera que le sitúan muy alto en el panteón de los grandes inventores. Está junto a Edison y Bell en la creación de una industria.

8 Colofón

Actualmente se observa una ampliación enorme del campo de aplicación de las matemáticas, ampliación que se explica fundamentalmente por la aparición y el desarrollo del material informático de cálculo. Con la creación de las computadoras, la velocidad de las operaciones aritméticas pasó, en menos de treinta años, de 0'1 operaciones por segundo (cálculo a mano) a más de dos millones (ordenadores de la década de los setenta); esta cifra incluso se ha quedado pequeña en la actualidad desde la aparición de los superordenadores, que incluyen las posibilidades de vectorización y paralelismo, y pueden llegar a multiplicar por diez o incluso por cien el número de operaciones por segundo que llevaban a cabo los ordenadores de la generación anterior. Mientras tanto, otras herramientas han surgido y experimentado un desarrollo extraordinario, el ejemplo más evidente es la red de redes: internet. En relación con la resolución de problemas complejos, con gran número de incógnitas y enormes cantidades de información a transferir, internet permite conectar entre sí un conjunto de ordenadores, situados en lugares distantes, de manera que aprovechando la potencia de cálculo de cada uno de ellos, actúen como un único superordenador. En realidad, aquí se aplica la conocida máxima de que la unión hace la fuerza.

Nos encontramos en una permanente revolución tecnológica, la era digital ha comenzado y se extiende a todos los ámbitos de nuestro entorno cotidiano; nuevas palabras han surgido, como ofimática o domótica, implicando con ello que tanto en la oficina como en nuestra propia casa, la informática ya participa de nuestras vidas.

9 Agradecimientos

El autor de estas notas agradece a todos aquellos que han mostrado algún interés en el desarrollo histórico de la computación y que libremente han trasladado y dispuesto sus conocimientos en internet. En particular, agradezco a todos los responsables de las direcciones de internet que aparecen en la bibliografía, pues la información que se exhibe ha resultado ser muy valiosa y determinante

durante la preparación de estas notas. Especialmente, agradezco a la Escuela de Matemáticas y Estadística de la Universidad de St. Andrews (Escocia), por mantener una extraordinaria base de datos biográficos de matemáticos de todos los tiempos ([56]); su consulta ha resultado de enorme interés.

Asimismo, doy las gracias a mi estimado compañero Juan Manuel Nieto Vales por haberme puesto al corriente de la existencia del ábaco neperiano del museo Arqueológico Nacional y haberme pasado los artículos de Felipe Picatoste ([29]) y de Erwin Tomash ([40]), que describen magistralmente este fabuloso tesoro.

10 Bibliografía y direcciones de interés

En esta sección se citan las principales obras que han permitido elaborar estas notas. Se incluye además una bibliografía de consulta para aquellos interesados que deseen profundizar en algunos de los temas que aquí se abordan. Existen muchos documentos de interés que sólo están disponibles en la red; aquí se citan algunos de ellos. En el momento de preparar este documento, todas estas direcciones estaban disponibles; espero que los responsables de las mismas sigan manteniéndolas en el futuro. Algunas de estas direcciones están aquí impresas con puntos suspensivos, indicando que falta información escrita; esto lo he presentado así porque la dirección era tan larga que se montaba sobre el margen. No obstante, la versión de este documento en pdf está completamente vinculada, es decir, que pinchando sobre esa dirección, el explorador de internet abrirá directamente la página correspondiente.

La idea inicial de estas notas es [14], un estupendo libro de análisis numérico que contiene numerosas reseñas históricas como complemento a los conceptos que se introducen a lo largo de toda la obra. En particular, se han usado las reseñas del primer capítulo.

La biografía de Ramón Silvestre Vereá García está basada en el artículo periodístico [24]. Para conocer más acerca de este personaje, pueden consultarse [1, 17, 20, 21]. La parte dedicada a Leonardo Torres Quevedo y su biografía están tomadas de [27], donde se ofrecen más detalles sobre la vida y obra de este ilustre personaje. Para ahondar más, se recomienda la referencia [38]. La biografía de Odhner está basada en [18]; en esta referencia se describe ampliamente la vida y obra de este gran ingeniero sueco. La reseña sobre Burroughs es una versión resumida de la que aparece en [50]. La biografía de Cray está basada en [15, 53].

Casi todas las demás biografías que aparecen en la sección 7 están tomadas de la base de datos biográficos [56] de la Universidad de St. Andrews (Escocia).

Finalmente, agradezco al director de la sección de Historia de las Matemáticas de este boletín, profesor José Manuel Vegas, el haberme dado a conocer las referencias [30], sobre los huesos de Ishango, y [39], la reciente traducción al inglés del libro de Fibonacci *Liber Abaci*.

Referencias

- [1] OLIMPIO ARCA CALDAS *Emigrantes sobranceiros* (1998).
- [2] WILLIAM ASPRAY *John von Neumann and the Origins of Modern Computing*. The MIT Press (1990).
- [3] W. ASPRAY, A. G. BROMLEY, M. CAMPBELL-KELLY, P. E. CERUZZI Y M. R. WILLIAMS *Computing Before Computers*. Iowa State University Press, Ames, Iowa (1990).
<http://ed-thelen.org/comp-hist/CBC.html>
- [4] CHARLES BABBAGE *Passages from the Life of a Philosopher*. (New Brunswick, NJ: Rutgers University Press, Piscataway, NJ, (1994).
- [5] MARTIN CAMPBELL-KELLY Y WILLIAM ASPRAY *Computer: A History of the Information Machine*. HarperCollins Publishers (1997).
- [6] PAUL E. CERUZZI *A History of Modern Computing*. The MIT Press (2001).
- [7] CHARLES COLE *The Remington Rand Univac LARC*.
<http://www.computer-history.info/.../LARC.dir/LARC.Cole.html>
- [8] B. JACK COPELAND *The Essential Turing: The ideas that gave birth to the computer age*. Oxford University Press, Oxford (2004).
- [9] JESÚS ILDEFONSO DÍAZ DÍAZ *John von Neumann: de la matemática pura a la matemática aplicada*. Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada, N 32, pp. 149-169 (2005).
- [10] ASAF GOLDSCHMIDT Y ATSUSHI AKERA *John W. Mauchly and the Development of the ENIAC Computer*. An Exhibition in the Department of Special Collections Van Pelt Library, University of Pennsylvania.
<http://www.library.upenn.edu/.../mauchly/jwintro.html>
- [11] HERMAN H. GOLDSTINE *The Computer from Pascal to von Neumann*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1993).
- [12] SUSAN L. GRAHAM, MARC SNIR Y CYNTHIA A. PATTERSON *Getting Up to Speed: The Future of Supercomputing*. The National Academies Press, Washington, D.C. (2005). http://books.nap.edu/html/up_to_speed/
- [13] GEORGE GRAY *UNIVAC I: The First Mass-Produced Computer*. Unisys History Newsletter, Vol. 5, No. 1 (2001).
<http://www.cc.gatech.edu/gvu/.../folklore/v5n1.html>
- [14] G. HÄMMERLIN Y K. H. HOFFMANN *Numerical Mathematics*. Reading in Mathematics, Springer-Verlag, New York [etc.] (1991).
- [15] TOBY HOWARD *Seymour Cray: An Appreciation*. Personal Computer World magazine, Feb. (1997).
<http://www.cs.man.ac.uk/aig/staff/toby/writing/PCW/cray.htm>

- [16] GEORGES IFRAH *The Universal History of Computing: From the Abacus to the Quantum Computer*. John Wiley and Sons, Inc., New York (2002).
- [17] P. A. KIDWELL *Ideology and Invention: The Calculating Machine of Ramón Vereá*. Rittenhouse: Journal of the American Scientific Instrument Enterprise, Vol. 9, No. 2, (1995).
- [18] TIMO LEIPÄLÄ *The life and works of W. T. Odhner*. Greifswalder Symposium zur Entwicklung der Rechentechnik, (2003).
<http://www.rechnerlexikon.de/en/...W.T.Odhner>
- [19] LYNDA LESTER *The making of a CRAY-3*.
<http://www.scd.ucar.edu/docs/.../04e.cray3.html>
- [20] JOHN H. LIENHARD *Vereá's Calculating Machine*.
<http://www.uh.edu/engines/epi1297.htm>
- [21] MARÍA LUISA LOSADA SANMARTÍN *A máquina de calcular de R. Vereá*. (1997).
- [22] SCOTT MCCARTNEY *ENIAC: The Triumphs and Tragedies of the World's First Computer*. Walker & Company (2001).
- [23] JO MARCHANT *In search of lost time*. News Feature, news@nature.com, 29 November 2006.
<http://www.nature.com/news/2006/061127/full/444534a.html>
- [24] XAIME MARIÑO *La apasionante vida de Ramón Vereá: Un gallego inventó la calculadora*. La Voz de Galicia (30-12-2004).
<http://www.lavozdeg Galicia.es/reportajes/...10000061134>
- [25] CHARLES J. MURRAY *The Supermen : The Story of Seymour Cray and the Technical Wizards Behind the Supercomputer*. John Wiley and Sons, Inc., New York (1997).
- [26] ELPAIS.COM/BBCMUNDO - MADRID - 30/11/2006 *Una calculadora de 2.000 años*.
<http://www.elpais.com/articulo/.../Tes>
- [27] MANUEL PERERA DOMÍNGUEZ *Ingenieros ilustres: Leonardo Torres Quevedo*.
<http://www.esi2.us.es/ANT/ingenio/ingenio3/leonardo.html>
- [28] MANUEL PERERA DOMÍNGUEZ *ENIAC, matemáticas y computación científica*. La Gaceta de la Real Sociedad Matemática Española, vol. 2, no. 3, pp. 494-518 (1999).
<http://www.divulgamat.net/.../Historia/Gaceta/Historia23.pdf>
- [29] FELIPE PICATOSTE *Ábaco neperiano o rabdológico del siglo XVII, que se conserva en el museo Arqueológico Nacional*. Museo Español de Antigüedades, Madrid, pp. 51-80 (1878).

- [30] DIRK HUYLEBROUCK *The bone that began the space odyssey*. The Mathematical Intelligencer, vol. 18, no. 4, pp. 56-60 (1996).
- [31] VLADIMIR PLETZER Y DIRK HUYLEBROUCK *The Ishango Artefact: the Missing Base 12 Link*. Forma, vol. 14, pp. 339-346, (1999).
<http://www.scipress.org/journals/forma/pdf/1404/14040339.pdf>
- [32] JAMES REDIN *A Brief History of Mechanical Calculators. Part I: The Age of the Polymaths*.
<http://www.xnumber.com/xnumber/mechanical1.htm>
- [33] JAMES REDIN *A Brief History of Mechanical Calculators. Part II: Crossing the 19th Century*.
<http://www.xnumber.com/xnumber/mechanical2.htm>
- [34] JAMES REDIN *A Brief History of Mechanical Calculators. Part III: Getting Ready for the 20th Century*.
<http://www.xnumber.com/xnumber/mechanical3.htm>
- [35] JULIO REY PASTOR *Los matemáticos españoles del siglo XVI*. Biblioteca Scientia (1913).
<http://www.ateneodemadrid.com/.../Libro-00004.pdf>
- [36] EDUARDO RENÉ RODRÍGUEZ ÁVILA *Principia Historia*.
<http://homepage.mac.com/eravila/history.html>
- [37] RAÚL ROJAS Y ULF HASHAGEN *The First Computers—History and Architectures*. Cambridge, Mass. The MIT Press (2002).
- [38] J. G. SANTESMASES *Obra e inventos de Torres Quevedo*. Instituto de España, Madrid (1980).
- [39] LAURENCE E. SIGLER *Fibonacci's Liber Abaci: A Translation into Modern English of Leonardo Pisano's Book of Calculation*. Springer-Verlag, New York (2002).
- [40] ERWIN TOMASH *The Madrid Promptuary*. Annals of the History of Computing, Vol. 10, No. 1, pp. 52-67 (1988).
- [41] R. VELMA Y HARRY D. HUSKEY *Lady Lovelace and Charles Babbage*. Annals of the History of Computing, 2, pp. 299-329 (1980).
- [42] HÉCTOR VENTI *La historia que llevó a construir la primera computadora*.
<http://www.monografias.com/.../histcomput/histcomput2.shtml>
- [43] MICHAEL R. WILLIAMS *A History of Computing Technology*. John Wiley and Sons, (1997).
- [44] *A Personal Story of Interest to Business Men and Accountants: An Interview with Mr. Baldwin*. Monroe Systems for Business.
http://www.monroe-systems.com/..._history_personal_story.asp

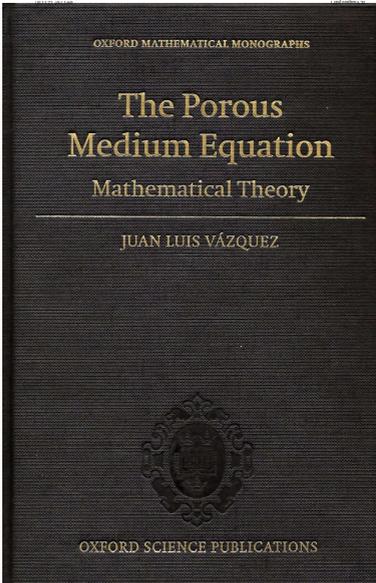
- [45] *Historia de la Computación*. Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática, Universidad de Granada.
<http://www-etsi2.ugr.es/alumnos/mlii/>
- [46] Wikipedia *Ábaco neperiano*. Wikipedia, la enciclopedia libre.
http://es.wikipedia.org/wiki/\%C3\%81baco_neperiano
- [47] *Reconstruction of the Atanasoff-Berry Computer (ABC)*. Ames Laboratory, Iowa.
<http://www.scl.ameslab.gov/ABC/>
- [48] *Who was Charles Babbage?*. Charles Babbage Institute.
<http://www.cbi.umn.edu/about/babbage.html>
- [49] IBM 701: *A notable first: The IBM 701*.
http://www-03.ibm.com/ibm/history/exhibits/701/701_intro.html
- [50] *Inventor of the week Archive: William Burroughs. Adding Machine*. (2002)
<http://web.mit.edu/invent/iow/burroughs.html>
- [51] *Museum of Soviet Calculators on the Web: Odhner*
<http://www.taswegian.com/MOSCOW/odhner.html>
- [52] *Odhner Calculator Memorial Site*.
<http://mywebpages.comcast.net/wtodhner/calcs.html>
- [53] *Historia de la Computación: Seymour Cray (1925-1996)*.
<http://www-etsi2.ugr.es/alumnos/mlii/Cray.htm>
- [54] CRAY, The supercomputer company: *Cray History*.
http://www.cray.com/about_cray/history.html
- [55] *Cray-CYBER.ORG*.
<http://www.cray-cyber.org/general/start.php>
- [56] The MacTutor History of Mathematics archive: *Indexes of Biographies*.
<http://turnbull.mcs.st-and.ac.uk/~history/BiogIndex.html>
- [57] HORST ZUSE *History of Computing and Konrad Zuses Work: Konrad Zuse and His Computers*.
http://irb.cs.tu-berlin.de/~zuse/Konrad_Zuse/
- [58] HORST ZUSE *Links to WWW-Sites of the History of Computing* .
<http://irb.cs.tu-berlin.de/~zuse/history/index.html>

The porous medium equation. Mathematical theory.

Juan Luis Vázquez

Oxford Mathematical Monographs. The Clarendon Press, Oxford
University Press, Oxford.

ISBN: 0198569033 (648 páginas) – 2006



Por Guillermo Reyes Souto

La ecuación de los medios porosos (EMP en lo que sigue) es, en algún sentido, la variante no lineal más simple de la ecuación del calor. Se ha propuesto como modelo para describir fenómenos de difusión de muy diversa naturaleza. Citemos tres de ellos, quizá los más conocidos: la filtración de líquidos o gases a través de medios porosos homogéneos, la propagación del calor en plasma por radiación y la dinámica de poblaciones.

Desde el punto de vista de las aplicaciones, se trata de modelos simplificados. Así por ejemplo, en el caso de la filtración, el aspecto termodinámico se reduce a la hipótesis de politropía, y la ecuación de movimiento, en principio la de Navier-Stokes, queda reducida a la ley empírica de Darcy. No obstante, contienen la información suficiente para reproducir algunos fenómenos que se observan en la realidad, incluso cuando no se

satisfacen exactamente las hipótesis simplificadoras del modelo. Un notable ejemplo es la presencia de frentes de propagación (de calor o sustancia).

Por otro lado, las ecuaciones no lineales de filtración, y las no lineales en general, han representado un difícil reto para las matemáticas modernas. Tanto es así que ecuaciones como la EMP se han resistido a un tratamiento matemático riguroso hasta los años 50-60 del siglo XX, de manos de la escuela rusa. Hay que señalar que, también desde el punto de vista matemático, el estudio de la EMP ha contribuido a una mejor comprensión de ecuaciones y sistemas no lineales de evolución más generales, cuya teoría matemática se encuentra aún en fase de gestación.

El libro que nos ocupa está dedicado a un estudio exhaustivo de la EMP, así como de diversas extensiones (ecuación de difusión rápida, ecuación general de filtración, variantes no-homogéneas, etc.), recogiendo en forma sistemática los principales resultados que se han acumulado durante los últimos cuarenta años en la teoría matemática de la EMP.

Comienza con una introducción al tema, seguida de un bloque de once capítulos que integran su primera parte, dedicada fundamentalmente a la teoría básica (en varios marcos débiles, incluyendo el punto de vista de la teoría de semigrupos) de los principales problemas para la ecuación: el de valor inicial, el de Dirichlet y el de Neumann. Contiene además un capítulo sobre la continuidad local de las soluciones, y otro dedicado a problemas en variedades.

La segunda parte, que consta de nueve capítulos, tiene como objeto el estudio de las propiedades cualitativas de las soluciones (propagación, positividad, regularidad óptima, etc.), así como su comportamiento a largo plazo, con énfasis en el papel que juegan las soluciones especiales, a las que se dedica todo un capítulo. Incluye también diversas extensiones de los marcos previos de existencia y unicidad, así como un capítulo sobre técnicas de simetrización, de gran importancia en la obtención de estimaciones finas de las soluciones.

El libro concluye con una sección de complementos, que presenta una gran variedad de aplicaciones adicionales, así como una serie de apéndices que incluyen resultados de análisis, teoría de la medida, teoría del potencial, etc., necesarios para la lectura del libro.

Dada su vasta y reconocida experiencia en el tema, avalada por tres décadas de investigación, el autor nos presenta el material no como un mero compendio de resultados, sino como un cuerpo teórico vivo y en crecimiento. Cada capítulo contiene notas y ejercicios (algunos de elevada dificultad) que apuntan a las direcciones actuales de investigación. Se presentan además varios problemas abiertos. Hay que tener en cuenta que muchos de los resultados expuestos son debidos al autor y sus numerosos colaboradores.

Gracias al material preliminar incluido en cada capítulo y a los apéndices, el libro resulta prácticamente autocontenido. También hay que mencionar, en este sentido, las notas aclaratorias sobre la historia de los resultados incluidas al final de cada capítulo. El estilo es muy ameno, con más énfasis en las ideas que en los cálculos, aunque estos últimos se presentan siempre con todo detalle.

Se podría decir que el libro pertenece a esa clase de textos que, como el de Kellogg de Teoría del Potencial, el de Widder de la Ecuación del calor o el de Ladyzhenskaya-Solonnikov-Ural'tseva sobre ecuaciones parabólicas cuasilineales, compendian y sistematizan un tema, anteriormente diseminado en artículos de investigación, y sirven de referentes obligados a futuros investigadores.

De La Hoz Méndez, Francisco

Estudiante. *Líneas de investigación:* Métodos pseudo-espectrales, movimiento de fluidos de vorticidad. – UNIV. DEL PAÍS VASCO – Facultad de Ciencia y Tecnología – Dpto. de Matemática Aplicada y Estadística e Investigación Operativa – Apto. 644. 48080 Bilbao.

Tlf.: 946012736. *Fax:* 946012516.

e-mail: patxi2000@gmail.com.

Iagar, Razvan Gabriel

Estudiante (Becario). *Líneas de investigación:* Ecuaciones no lineales en derivadas parciales, problemas con frontera libre, difusión no lineal – UNIV. AUTÓNOMA DE MADRID – Fac. de Ciencias – Dpto. de Matemáticas – Crtra. Colmenar Viejo, km 15. 28049 Madrid.

Tlf.: 914974155.

e-mail: razvan.iagar@uam.es.

Moreno Iraberte, María Jesús

Estudiante (Becario). *Líneas de investigación:* Ecuaciones diferenciales y análisis numérico. – UNIV. DE SEVILLA – Facultad de Matemáticas – Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico – C/ Tarfia, s/n. 41012 Sevilla.

Tlf.: 954556807. *Fax:* 954552848.

e-mail: mjmoreno@us.es.

Pérez Pérez, María Teresa

Prof. Ayudante de Universidad. *Líneas de investigación:* Ecuaciones en derivadas parciales – UNIV. CARLOS III – Escuela Politécnica Superior – Dpto. de Matemáticas – Avda. de la Universidad, 30. 28911 Leganés (Madrid).

e-mail: mtperez@math.uc3m.es.

Direcciones útiles

Consejo Ejecutivo de SĒMA

Presidente:

Carlos Vázquez Cendón. (carlosv@udc.es).
Dpto. de Matemáticas. Facultad de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1335.

Vicepresidente:

Mikel Lezaun Iturralde. (mpleitm@lg.ehu.es).
Dpto. de Matemática Aplicada, Estadística e I.O. Facultad de Ciencias. Univ. del País Vasco. Apartado 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel:* 944 647700.

Secretario:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).
Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. *Tel:* 91 336 6664.

Vocales:

Rafael Bru García. (rbru@mat.upv.es)
Dpto. de Matemática Aplicada. E.T.S.I. Agrónomos. Univ. Politécnica de Valencia. Camí de Vera, s/n. 46022 Valencia. *Tel:* 963 879 669.

José Antonio Carrillo de la Plata. (carrillo@mat.uab.es)
Dpto. de Matemáticas. Univ. Autónoma de Barcelona. Edificio C. 08193 Bellaterra (Barcelona). *Tel:* 935 812 413.

Rosa María Donat Beneito. (Rosa.M.Donat@uv.es) Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemàtiques. Univ. de Valencia. Dr. Moliner, 50. 46100 Burjassot (Valencia) *Tel:* 963 544 727.

Inmaculada Higuera Sanz. (higuera@unavarra.es).
Dpto de Matemática e Informática Univ. Pública de Navarra. Campus de Arrosadía, s/n. *Tel:* 948 169 526. 31006 Pamplona.

Carlos Parés Madroñal. (carlos_pares@uma.es).
Dpto. de Análisis Matemático. Fac. de Ciencias. Univ. de Málaga. Campus de Teatinos, s/n. 29080 Málaga. *Tel:* 952 132 017.

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).
Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. de Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. *Tel:* 926 295 436

Enrique Zuazua Iriondo. (enrique.zuazua@uam.es).
Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 914 974 368.

Tesorero:

Íñigo Arregui Álvarez. (arregui@udc.es).
Dpto. de Matemáticas. Fac. de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1327.

Comité Científico del Boletín de SĕMA

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. *Tel:* 954 557 992.

Alfredo Bermúdez de Castro. (mabermud@usc.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemáticas. Univ. de Santiago de Compostela. Campus Univ.. 15706 Santiago (A Coruña) *Tel:* 981 563 100.

Eduardo Casas Rentería. (eduardo.casas@unican.es).

Dpto. de Matemática Aplicada y C.C.. E.T.S.I. Ind. y Telec. Univ. de Cantabria. Avda. de Los Castros s/n. 39005 Santander. *Tel:* 942 201 427.

José Luis Cruz Soto. (jlacruz@uco.es).

Dpto. de Informática y An. Numérico. Univ. de Córdoba. Campus de Rabanales. Edificio C-2. 14071 Córdoba. *Tel:* 957 218 629.

José Manuel Mazón Ruiz. (Jose.M.Mazon@uv.es).

Dpto. de Análisis Matemático. Fac. de Matemáticas. Univ. de Valencia. Dr. Moliner, 50. 46100 Burjassot (Valencia) *Tel:* 963 664 721.

Ireneo Peral Alonso. (ireneo.peral@uam.es).

Dpto. de Matemáticas, C-XV. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 204.

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela s/n. 13071 Ciudad Real. *Tel:* 926 295 436 .

Juan Luis Vázquez Suárez. (juanluis.vazquez@uam.es).

Dpto. de Matemáticas, C-XV. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 935.

Luis Vega González. (mtpvegol@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Apto. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel:* 944 647 700.

Enrique Zuazua Iriondo. (enrique.zuazua@uam.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 368.

Grupo Editor del Boletín de SĒMA

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3809

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. Tel: 954 557 992.

Ernesto Aranda Ortega. (Ernesto.Aranda@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3813

José Carlos Bellido Guerrero. (JoseCarlos.Bellido@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3859

Alberto Donoso Bellón. (Alberto.Donoso@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3859

Responsables de secciones del Boletín de SĒMA

Artículos:

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. Tel: 954 557 992.

Matemáticas e Industria:

Mikel Lezaun Iturralde. (mpleitm@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemática Aplicada, Estadística e I. O. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Apto. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). Tel: 944 647 700.

Educación Matemática:

Roberto Rodríguez del Río. (rr_delrio@mat.ucm.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Químicas. Univ. Compl. de Madrid. Ciudad Universitaria. 28040 Madrid. Tel: 913 944 102.

Resúmenes de libros:

Fco. Javier Sayas González. (jsayas@posta.unizar.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Centro Politécnico Superior. Universidad de Zaragoza. C/María de Luna, 3. 50015 Zaragoza. Tel: 976 762 148.

Noticias de SĒMA:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).

Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. Tel: 91 336 6664.

Anuncios:

Óscar López Pouso. (oscarlp@usc.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemáticas. Univ. de Santiago de Compostela. Campus sur, s/n. 15782 Santiago de Compostela Tel: 981 563 100, ext. 13228.

Responsables de otras secciones de SĒMA

Gestión de Socios:

Íñigo Arregui Álvarez. (arregui@udc.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1327.

Página web: www.sema.org.es/:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).

Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. *Tel:* 91 336 6664.

1. Los artículos publicados en este Boletín podrán ser escritos en español o inglés y deberán ser enviados por correo certificado a

Prof. E. FERNÁNDEZ CARA
Presidente del Comité Científico, Boletín SĕMA
Dpto. E.D.A.N., Facultad de Matemáticas
Aptdo. 1160, 41080 SEVILLA

También podrán ser enviados por correo electrónico a la dirección

`boletin.sema@uclm.es`

En ambos casos, el/los autor/es deberán enviar por correo certificado una carta a la dirección precedente mencionando explícitamente que el artículo es sometido a publicación e indicando el nombre y dirección del autor corresponsal. En esta carta, podrán sugerirse nombres de miembros del Comité Científico que, a juicio de los autores, sean especialmente adecuados para juzgar el trabajo.

La decisión final sobre aceptación del trabajo será precedida de un procedimiento de revisión anónima.

2. Las contribuciones serán preferiblemente de una longitud inferior a 24 páginas y se deberán ajustar al formato indicado en los ficheros a tal efecto disponibles en la página web de la Sociedad (<http://www.sema.org.es/>).
3. El contenido de los artículos publicados corresponderá a un área de trabajo preferiblemente conectada a los objetivos propios de la Matemática Aplicada. En los trabajos podrá incluirse información sobre resultados conocidos y/o previamente publicados. Se anima especialmente a los autores a presentar sus propios resultados (y en su caso los de otros investigadores) con estilo y objetivos divulgativos.

Ficha de Inscripción Individual

Sociedad Española de Matemática Aplicada SEMA

Remitir a: SEMA, Despacho 520, Facultad de Matemáticas,
Universidad Complutense. 28040 Madrid.
Fax: 913 944 607. CIF: G-80581911

Datos Personales

Apellidos:
Nombre:
Domicilio:
C.P.: Población:
Teléfono: DNI/CIF:
Fecha de inscripción:

Datos Profesionales

Departamento:
Facultad o Escuela:
Universidad o Institución:
Domicilio:
C.P.: Población:
Teléfono: Fax:
Correo electrónico:
Página web: <http://>
Categoría Profesional:
Líneas de Investigación:
.....

Dirección para la correspondencia: **Profesional** **Personal**

Cuota anual para el año 2005

- Socio ordinario: 30€ Socio de reciprocidad con la RSME: 12€
 Socio estudiante: 15€ Socio extranjero: 25€

Datos bancarios

...de de 200..

Muy Sres. Míos:

Ruego a Uds. que los recibos que emitan a mi cargo en concepto de cuotas de inscripción y posteriores cuotas anuales de SēMA (Sociedad Española de Matemática Aplicada) sean pasados al cobro en la cuenta cuyos datos figuran a continuación

Entidad (4 dígitos)	Oficina (4 dígitos)	D.C. (2 dígitos)	Número de cuenta (10 dígitos)

Entidad bancaria:

Domicilio:

C.P.: Población:

Con esta fecha, doy instrucciones a dicha entidad bancaria para que obren en consecuencia.

Atentamente,

Fdo.

Para remitir a la entidad bancaria

...de de 200..

Muy Sres. Míos:

Ruego a Uds. que los recibos que emitan a mi cargo en concepto de cuotas de inscripción y posteriores cuotas anuales de SēMA (Sociedad Española de Matemática Aplicada) sean cargados a mi cuenta corriente/libreta en esa Agencia Urbana y transferidas a

SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244
Bankinter
C/ Hernán Cortés, 63
39003 Santander

Atentamente,

Fdo.

Ficha de Inscripción Institucional

Sociedad Española de Matemática Aplicada SEMA

Remitir a: SEMA, Despacho 520, Facultad de Matemáticas,
Universidad Complutense. 28040 Madrid.
Fax: 913 944 607. CIF: G-80581911

Datos de la Institución

Departamento:
Facultad o Escuela:
Universidad o Institución:
Domicilio:
C.P.: Población:
Teléfono: DNI/CIF:
Correo electrónico:
Página web: <http://>
Fecha de inscripción:

Forma de pago

La cuota anual para el año 2005 como Socio Institucional es de 150 EUR.
El pago se realiza mediante transferencia bancaria a

SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244
Bankinter
C/ Hernán Cortés, 63
39003 Santander