SēMA BOLETÍN NÚMERO 49 Diciembre 2009

sumario

Editorial 5
Palabras del Presidente
Opinión
M.J. Carro y E. Fernández-Cara
Artículos 19
Harnack inequality and no-arbitrage bounds for self-financing portfolios, por A. Carciola, A. Pascucci y S. Polidoro 19
From the long jump random walk to the fractional Laplacian, por E. Valdinoci
Effects of charge-charge interactions and external fields in shape transformations of closed filaments, por Yu.B. Gaididei et al 45
Una exposición de los últimos récords para primos gemelos y seguros, por R. Durán Díaz, L. Hernández Encinas y J. Muñoz Masqué 65
Premio SēMA al Joven Investigador 2009
Modelling and numerical simulation of submarine sediment shallow flows: transport and avalanches, por E.D. Fernández-Nieto
Resúmenes de tesis doctorales
Noticias de SēMA 109
Anuncios

Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada SeMA

Grupo Editor

P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) E. Aranda Ortega (U. Cast.-La Mancha)

- E. Fernández Cara (U. de Sevilla)
- A. Donoso Bellón (U. Cast.-La Mancha)

J.C. Bellido Guerrero (U. Cast.-La Mancha)

Comité Científico

E. Fernández Cara (U. de Sevilla) C. Conca Resende (U. de Chile) Martin J. Gander (U. de Ginebra) Arieh Iserles (U. de Cambridge) P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) Benoît Perthame (U. de París VI) Alfio Quarteroni (EPF Lausanne) L. Vega González (U. del País Vasco) E. Zuazua (Basque Center App. Math.)

A. Bermúdez de Castro (U. de Santiago) A. Delshams Valdés (U. Pol. de Cataluña) Vivette Girault (U. de París VI) J.M. Mazón Ruiz (U. de Valencia) I. Peral Alonso (U. Aut. de Madrid) O. Pironneau (U. de París VI) J.L. Vázquez Suárez (U. Aut. de Madrid) C. Wang Shu (Brown U.)

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 SëMA:	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

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: esculturas geométricas realizadas por George Hart (www.georgehart.com).

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

Consejo Ejecutivo de la Sociedad Española de Matemática Aplicada SēMA

Presidente

Carlos Vázquez Cendón

Vicepresidente Rosa María Donat Beneito

Secretario Carlos Manuel Castro Barbero

Vocales

Sergio Amat Plata Rafael Bru García Jose Antonio Carrillo de la Plata Inmaculada Higueras Sanz Carlos Parés Madroñal Pablo Pedregal Tercero Luis Vega González

Estimados socios:

Os presentamos un nuevo número de nuestro Boletín, en el que, dentro del contenido científico, encontraréis cuatro interesantes trabajos de temáticas bien distintas, y el artículo de Enrique D. Fernández-Nieto, ganador del Premio SēMA al Joven Investigador 2009. Además de las secciones habituales, destacamos también las convocatorias anuales del "Premio SēMA al Joven Investigador" y el "Premio al Mejor Artículo del Boletín SēMA".

Además nos gustaría resaltar el documento de opinión sobre el IEMath. Seguro que muchos de entre nosotros, tras una época en la que se habló mucho sobre este proyecto y se construyeron muchas expectativas respecto al mismo, nos hemos preguntado qué pasó finalmente y en qué estado se encuentra ahora. En estos párrafos a cargo de M.J. Carro y E. Fernández Cara, se nos pone al día de cómo está la situación actualmente.

Esperamos y confiamos que este número sea de vuestro interés y agrado. Como de costumbre seguimos pendientes de vuestros comentarios y sugerencias.

Recibid un cordial saludo,

Grupo Editor boletin.sema@uclm.es

Queridos socios de S \vec{e} MA, como es habitual aprovecho el último número del Boletín en 2009 para comentaros algunas novedades relacionadas con nuestra Sociedad .

En primer lugar os informo de que, tras las elecciones celebradas el pasado mes de septiembre, han renovado sus cargos como miembros del Comité Ejecutivo: Rosa Donat (Universidad de Valencia) y Carlos Parés (Universidad de Málaga), asumiendo Rosa la Vicepresidencia de nuevo. Quiero agradecerles su compromiso para seguir trabajando en beneficio de la Sociedad.

En 2009 la S \vec{e} MA ha apoyado el máximo número de eventos anuales desde sus inicios y queremos agradecer a los organizadores de los mismos el excelente trabajo realizado, contribuyendo también a la difusión de la Sociedad en distintos ámbitos. Creemos que el esfuerzo en el modesto apoyo financiero se ve compensado con la proyección de la imagen de S \vec{e} MA que el mismo conlleva.

Por su relevancia para la Sociedad, merece una mención especial el hecho de que en 2009 se ha celebrado el XXI CEDYA-XI CMA, gracias a la excelente organización de un grupo del Departamento de Matemáticas de la Universidad de Castilla-La Mancha. El éxito de participación ha sido rotundo a todos los niveles y los organizadores han cuidado hasta el último detalle. Es por ello por lo que reiteramos desde S \bar{e} MA nuestro más sincero agradecimiento y felicitación a todas las personas involucradas en la organización, permitidme que personalice especialmente en Víctor, Henar, Ernesto, José Carlos y María Jesús. Tal y como se anunció en la cena del Congreso, la Universidad de las Islas Baleares acogerá en la isla de Mallorca el XXII CEDYA-XII CMA en 2011. Desde aquí quedamos a disposición de los organizadores para todo aquello en lo que podamos ser de ayuda y estamos seguros de que el éxito de las ediciones precedentes se volverá a repetir.

En 2010 S*e*MA continuará apoyando un buen número de actividades relacionadas con la Matemática Aplicada. Quiero destacar especialmente tres eventos de gran relevancia por su proyección internacional, al estar organizados en colaboración con otras sociedades análogas y de gran prestigio con sede en EEUU, Italia y Francia, respectivamente. Estamos seguros de que el esfuerzo de ponerlas en marcha se verá recompensado por el éxito de participación y el beneficio para los miembros de la Sociedad, en particular, y de la comunidad matemática, en general.

Siguiendo el orden cronológico de su celebración, el primer evento es el Congreso DSPDE'10, una actividad conjunta con RSME, SCM y los SIAM *Groups* de sistemas dinámicos y ecuaciones en derivadas parciales, que tendrá lugar en Barcelona del 31 de Mayo al 4 de Junio. Desde S \bar{e} MA os animamos a consultar más información en nuestra web y a participar en el evento. La segunda actividad es la primera conjunta con la Sociedad Italiana de Matemática Aplicada e Industrial (SIMAI). Se celebrará en la isla de Cerdeña desde el 21 al 25 de Junio, coincidiendo con el congreso bianual SIMAI2010 de la sociedad italiana, y que por primera vez se organiza con participación paritaria de ambas sociedades. La generosidad de nuestros colegas italianos y el interés del Congreso se merece una asistencia y participación numerosa de nuestros socios, sin mencionar el excelente lugar que hemos elegido para su celebración. Por ello, os animo a todos a asistir, y especialmente a aquellos que colaboran con investigadores italianos o que pretendan hacerlo en el futuro.

Para cerrar el circuito, os recuerdo que del 6 al 10 de Septiembre se celebrará en A Coruña la XIV Escuela Hispano Francesa de Simulación Numérica en Física e Ingeniería, organizada en colaboración con la SMAI francesa. En la web de $S\bar{e}MA$ podeis encontrar información actualizada. En este caso, también como miembro del comité organizador, os invito a participar, esperando que las expectativas puestas en vuestra decisión de asistir se vean cumplidas.

También quiero recordaros que el Congreso Mundial de Matemáticas, ICM 2010, se celebrará en Hyderabad (India) del 19 al 27 de agosto, recogiendo el testigo del celebrado en Madrid en 2006. Un representante de S \vec{e} MA acudirá a la Asamblea IMU que tendrá lugar en Bangalore.

Con respecto a los Premios de S \vec{e} MA, ya publicamos en este número las bases de la convocatoria del "XIII Premio al Joven Investigador". Por otro lado, se convoca también una nueva edición del "Premio al mejor artículo del Boletín S \vec{e} MA", que premia un artículo entre todos los publicados cada año. Las bases del nuevo premio también aparecen en este número del Boletín, en particular las que afectan a artículos aparecidos en 2009.

También desde estas páginas quiero pediros que deis la mayor difusión posible a los premios de $S\vec{e}MA$ y que fomenteis el envío de artículos de calidad para su posible publicación en el Boletín.

Finalmente, os traslado mis mejores deseos para el 2010, en el que espero veros a muchos de vosotros en Barcelona, Cerdeña o A Coruña.

Un abrazo,

Carlos Vázquez Cendón Presidente de SēMA carlosv@udc.es

EL IEMATH: POCAS LUCES, BASTANTES SOMBRAS Y MUCHAS MISERIAS

MARÍA J. CARRO, ENRIQUE FERNÁNDEZ-CARA

*Dept. Matemàtica Aplicada i Anàlisi, Univ. de Barcelona, Gran Via de les Corts Catalanes 585, 08007 Barcelona.
*Dpto. Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico, Univ. de Sevilla Aptdo. 1180, 41080 Sevilla.

carro@ub.edu cara@us.es

Resumen

Este artículo contiene un relato de los acontecimientos que han acompañado el intento de creación del Instituto Español de Matemáticas (IEMath), incluyendo comentarios sobre el pasado reciente y el presente de esta iniciativa.

1 Introducción

Los firmantes de este artículo fuimos, respectivamente, Coordinadora de Matemáticas de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP) de 2005 a 2008 y Gestor del Programa Nacional de Matemáticas del Plan Nacional de I+D+i, aproximadamente durante el mismo período.

Nuestro propósito es haceros partícipes de las luces, sombras y miserias que se han estado produciendo en el todavía incierto e inconcluso proceso de creación del Instituto Español de Matemáticas (el IEMath).

Durante un largo período de tiempo, recibimos el encargo de impulsar la creación de un Instituto de Matemáticas de ámbito nacional que, respondiendo a los deseos y necesidades de la comunidad matemática en materia de investigación, permitiera dar el salto cualitativo que todos esperamos y, al mismo tiempo, ayudar a resolver el problema generacional al que nos estamos enfrentando.

Con gran ilusión y esfuerzo, conscientes de la dificultad de la labor, pero llevados adelante por la impresión de percibir un deseo casi unánime de la comunidad, nos pusimos a ello.

Lamentablemente, a pesar de haber figurado explícitamente entre los objetivos del Plan Nacional y de haber sido causa y objeto de miles de horas de trabajo, nada está claro ni asegurado (ni mucho menos) a fecha de hoy.

Y esto ocurre después de haber participado en el proyecto cientos de personas, tras haber pasado por las manos de varios responsables políticos (tres

Ministras, dos Secretarios de Estado, dos Secretarios Generales, tres Directoras Generales, etc.), tras la elaboración de decenas de propuestas e incluso después de haber conseguido que el Instituto fuera presupuestado ¡dos años seguidos! por nuestro Parlamento.

Los objetivos de este artículo son protestar, llamar la atención sobre algo que nos parece indignante e injusto, contar la verdad, exponer el desarrollo de los acontecimientos, invitar al lector a la reflexión, desahogarnos, haceros partícipes de nuestra decepción y frustración, alertaros de la irresponsabilidad e inoperatividad de nuestros responsables políticos y dejar patente su falta absoluta de miras.

2 Calendario de Acontecimientos

Vayamos en primer lugar a los datos objetivos.

Agosto de 2006.

Durante la celebración del ICM, Francisco Marcellán, Secretario General de Política Científica y Tecnológica, contacta con nosotros para iniciar el proceso de creación de un Centro Nacional de Matemáticas, uno de los objetivos recogidos en el entonces vigente Plan Nacional 2004–2008.

De hecho, el Secretario General desea "relanzar" el tema, consciente de que el anterior Gestor del Programa y el anterior Coordinador de la ANEP habían generado una propuesta que, por varias razones, había quedado sin efecto.

Septiembre a diciembre de 2006: Elaboración del primer documento IEMath.

Con este fin se constituye una primera comisión (en adelante la comisión IEMath), cuya primera reunión se celebra el 26 de septiembre de 2006. Esta comisión elabora un primer documento que contiene un análisis exhaustivo de la realidad matemática española y una propuesta de creación de centro nacional, al que se da el nombre de Instituto Español de Matemáticas, quedando explicados con detalle los fines y objetivos, la estructura, la organización, el modo de funcionamiento, etc.

Diciembre de 2006: Consulta con los investigadores.

Con fecha 5 de diciembre de 2006, el documento elaborado por la comisión IEMath es enviado a los Investigadores Principales de los Proyectos de Matemáticas del Programa Nacional de Matemáticas y del Programa Ingenio-Consolider vigentes, a los Presidentes de las Sociedades Matemáticas españolas y al Presidente de la Conferencia de Decanos y Directores de Matemáticas, a fin de recibir sus comentarios y sugerencias.

Enero de 2007: Elaboración del segundo documento IEMath.

Durante el mes de enero de 2007, la comisión IEMath se reúne y elabora una segunda versión del documento en la que se intenta incorporar, en la medida de lo posible, las sugerencias recibidas.

Febrero de 2007 a mayo de 2007: Evaluación por parte de un panel internacional.

El Secretario General de Política Científica y Tecnológica toma la iniciativa de recurrir a una comisión externa, formada por expertos de alto prestigio (extranjeros o españoles residentes en el extranjero), a fin de recibir su opinión sobre el documento generado. Este panel es presidido por Jean-Pierre Bourguignon y elabora su trabajo de evaluación durante los meses de marzo y abril de 2007.

El Prof. Bourguignon viene a España a principios de mayo de 2007 a una reunión conjunta con los miembros de la comisión IEMath y el Secretario General, donde se dan los últimos retoques al documento, esencialmente adaptando algunos puntos a las sugerencias emitidas por el panel de expertos.

En el informe final realizado por la comisión externa, entre otras cosas, se dice:

We strongly welcome the initiative of creating a national institute of mathematics in Spain, showing the support of the Ministry for an ambitious development of mathematics in the country.

Mayo de 2007 a julio de 2007: Elaboración del documento definitivo y presentación en el Ministerio.

Con fecha 19 de mayo de 2007, el documento definitivo es enviado de nuevo al colectivo de Investigadores Principales y Presidentes anteriormente mencionado.

Posteriormente, el Secretario General presenta el documento al Secretario de Estado Miguel Ángel Quintanilla y a la Ministra Mercedes Cabrera y tienen lugar varios eventos donde el Gestor y la Coordinadora presentan el proyecto a la comunidad Matemática. En la propuesta se especifica que el IEMath se configurará como un organismo con personalidad jurídica propia, con una estructura de red de centros.

Septiembre de 2007: Comisión de Puesta en Marcha.

Comienza el proceso de puesta en marcha del IEMath con el nombramiento por parte del Secretario General de una nueva comisión, en adelante la comisión de Puesta en Marcha.

Esta comisión es presidida por Miguel Ángel Herrero y recibe los encargos de preparar y resolver dos convocatorias (convocatoria de Sedes del IEMath y convocatoria de primer Director del IEMath) y de proponer nombres para una primera Comisión Científica del IEMath.

Diciembre de 2007 a marzo de 2008: Convocatorias de Sedes y de Director y propuesta de miembros para la Comisión Científica.

La convocatoria de Sedes del IEMath es publicada en el BOE no. 307, Orden 22207, del 24 de diciembre de 2007.

De acuerdo con el texto de la misma, la evaluación se lleva a cabo en dos etapas. La primera es realizada por la ANEP, que se encarga de nombrar una comisión de expertos españoles y extranjeros que realiza un informe sobre cada Sede propuesta. La segunda evaluación tiene lugar en la comisión de Puesta en Marcha, a la vista de estos informes. Como resultado de ambas evaluaciones, el 12 de febrero de 2008, se decide unánimemente proponer las Sedes denominadas de Barcelona, Galicia, Granada y Madrid.

La convocatoria internacional de Director se hace pública el 14 de enero de 2008, quedando fijado un plazo hasta el 20 de febrero para la presentación de solicitudes. Se presentan 14 candidatos, de entre los cuales la comisión selecciona 6 candidatos el 28 de febrero de 2008. Estos 6 candidatos (4 españoles y dos extranjeros) son entrevistados personalmente los días 5 y 6 de marzo de 2008. Como resultado de estas entrevistas, con fecha 7 de marzo de 2008, la comisión propone una terna de posibles candidatos.

Por otra parte, tras varios debates, con fecha 12 de febrero de 2008, la comisión de Puesta en Marcha acuerda una propuesta de 12 investigadores españoles y 25 investigadores extranjeros, todos de gran nivel y prestigio, para la primera Comisión Científica del IEMath.

El día 7 de marzo de 2008 la comisión de Puesta en Marcha da por finalizado el trabajo encargado por el Ministerio.

En estos momentos, todo parece relativamente bien encaminado y da la impresión de que la base es lo suficientemente sólida para que los responsables políticos pongan el proyecto en funcionamiento:

- Las gestiones del Secretario General ante sus superiores han dado resultado, el proyecto es aceptado e inicialmente va a ser financiado con 2,5 millones de Euros, que están recogidos en los Presupuestos Generales del Estado para 2008.
- Los responsables políticos de investigación científica de las Comunidades Autónomas (CCAA) involucradas (Andalucía, Cataluña, Galicia y Madrid) han sido contactados e informados de la situación.
- Se acuerda celebrar una primera reunión de los representantes políticos del Ministerio y las CCAA con los representantes de las Sedes el 1 de abril de 2008. En esta reunión se hace un primer análisis de la situación y se inicia un proceso de firma del *protocolo de intenciones*, basado en un compromiso de cooperación para la creación de un Consorcio que dé soporte jurídico al IEMath.
- En fechas posteriores, versiones preliminares del protocolo de intenciones circulan entre los afectados y todo parece dispuesto y favorable.

A decir verdad, entre marzo y mayo de 2008, se producen algunas desviaciones respecto de lo proyectado en el documento elaborado por la comisión IEMath. Esto es consecuencia de las gestiones e incluso presiones generadas por algunas CCAA y, dada la diversidad de las instituciones presentes, es en cierto modo inevitable.

Marzo de 2008 a marzo de 2009: Cambios en los cargos políticos (¡dentro del mismo partido!) y consecuencias.

A raíz de las Elecciones Generales de marzo de 2008, cambiamos de Ministerio, de Ministra y de responsables políticos. El cargo de Secretario General de Política Científica y Tecnológica es ocupado ahora por José Manuel Fernández de Labastida.

Lo que, hasta ese momento, parecía ir sobre ruedas, empieza a complicarse \ldots

1. Al parecer (ésa es al menos la información que recibimos), el Ministerio de Hacienda pone objeciones a la creación de Consorcios con las CCAA. El Secretario General "decide" de forma unilateral que el IEMath tendrá la estructura de *Centro Nacional vinculado al CSIC* (sin que se sepa todavía con exactitud qué será esta nueva estructura). Tal y como se nos plantea, tanto a nosotros como a los reponsables de las Sedes, no hay alternativa.

El Secretario General justifica su postura argumentando que el Ministerio necesita un interlocutor válido en temas de investigación científica que, además, constituya la base física y eje coordinador de proyectos como el nuestro.

2. El nuevo Ministerio (de Ciencia e Innovación) nombra una nueva comisión en la que intervienen los promotores de las cuatro Sedes, el Gestor, el anterior Secretario General y Francisco Montero (Vicepresidente de Organización y Relaciones Institucionales del CSIC). Esta comisión está encargada de revisar y modificar el documento IEMath de modo que quede adaptado a la nueva estructura impuesta.

Esta vez, las gestiones del Secretario General dan como resultado un presupuesto de 800.000 Euros para 2009 (una cantidad de nuevo recogida en los Presupuestos Generales del Estado). No obstante, de los 2,5 millones previstos para 2008, aparentemente nadie (incluido el Secretario General) sabe nada.¹

3. En enero de 2009, la nueva versión del documento está lista y pasa a manos del Secretario General, encargado de presentarlo a los Consejeros de las CCAA implicadas en el proceso.

¹A este respecto, en fechas posteriores, nos ha llegado de forma indirecta una información: el Ministerio de Hacienda no autorizó en su momento, tal y como se pretendía por parte del Secretario General nombrado en mayo de 2008, transferir ese dinero al CSIC; evidentemente, cuando se aprobaron los Presupuestos Generales, el CSIC no jugaba ningún papel en este proyecto.

4. Las respuestas que se reciben por parte de las distintas CCAA son variadas.

Los Consejeros de las Comunidades de Andalucía y Galicia aceptan el documento.

La situación en Madrid es tremendamente complicada. Las diferencias políticas entre la Comunidad y el Ministerio no facilitan las cosas. Por si fuera poco, hay un cambio en el cargo de Director General de Universidades e Investigación de la Comunidad de Madrid que retrasa el proceso ... que sepamos, hasta la fecha. Visto desde fuera y dicho con todo el respecto hacia nuestros colegas madrileños, la actitud global de Madrid revela un autismo social incomprensible: Madrid no sabe, no contesta.

El Consejero de la Comunidad de Cataluña propone algunos cambios, fundamentalmente (y como era de esperar), de tipo económico, que han de ser discutidos con el Ministerio y el resto de Consejeros.

Estas propuestas son enviadas al Secretario General la última semana de febrero de 2009.

Silencio absoluto por parte de éste.

Mayo de 2009: Nuevos cambios en el Ministerio.

Aunque parezca increíble, la situación todavía puede empeorar y, de hecho, empeora.

José Manuel Fernández de Labastida cesa como Secretario General de Política Científica y Tecnológica (es más, desaparece este cargo en el organigrama del Ministerio) y pasa a ocupar la Dirección General de Investigación. Tras varias semanas de reestructuración, nos informan que el IEMath pasa a ser responsabilidad de Montserrat Torné Escasany (Directora General de Cooperación Internacional y Relaciones Institucionales).

El 17 de junio de 2009, es decir, más de un año después del momento en que todo estaba listo para empezar, tras habérselo pedido desde varios ámbitos, Montserrat Torné convoca a una nueva reunión a los coordinadores de las cuatro Sedes, al nuevo Gestor del Programa Nacional de Matemáticas, Jesús López Fidalgo, al nuevo Coordinador de la ANEP, Ricardo Cao Abad, y a Francisco Montero, aparentemente con el objetivo de seguir avanzando.

En el último momento, Montserrat Torné excusa su asistencia a la reunión y le sustituye José Luis Jarque de la Gandara, Subdirector General de Cooperación con las Comunidades Autónomas, que, según confesión propia, desconocía hasta la fecha la existencia de este proyecto.

No nos toca realmente a nosotros transmitir lo ocurrido en esta reunión. No obstante, según nuestras informaciones, el CSIC manifiesta necesitar tiempo para analizar las propuestas planteadas por Cataluña (¡ en febrero de 2009 !). Por otra parte, parece quedar claro en la reunión que, si no se produce rápidamente un movimiento por parte de los responsables políticos de las CCAA implicadas, el Ministerio de Hacienda se quedará con los 800.000 Euros presupuestados.

Lo que nos parece evidente es que esta última reunión (y de hecho varias de las que ha habido con posterioridad a marzo de 2008) son absolutamente estériles. No se avanza en nada, ni siquiera se completa la información previa; tampoco se acuerda un plan de trabajo, ni mucho menos un calendario de acontecimientos, ni se resuelven temas pendientes, ni se clarifican ideas. Nada en absoluto.

Últimas noticias.

Por nuestra parte, entre mayo y julio de 2009, intentamos llamar la atención a diversas autoridades sobre el peligroso camino que toma la iniciativa.

De común acuerdo con el nuevo Gestor y el nuevo Coordinador de la ANEP, promovemos una carta a la Ministra Cristina Garmendia, que acaba siendo firmada por ellos dos y por los Presidentes de la Sociedades Matemáticas, pidiendo que se tomen medidas. Por nuestra parte, enviamos también a la Ministra una carta-protesta que es contestada. Adjuntamos copia de la respuesta recibida al final del artículo. En ella, la Sra. Ministra, a través de la Jefa de su Gabinete, nos indica que, a pesar de todas la vicisitudes, existe un claro interés por su parte por el proyecto. También nos señala que los famosos 800.000 Euros tienen como destinatario el CSIC.

Y ya no hay más noticias.

Bueno, sí que hay; sabemos que Montserrat Torné ha decidido que la estructura del IEMath es demasiado complicada y quiere empezar de nuevo el proceso; sí, hemos dicho bien, empezar de nuevo el proceso, esta vez dando entrada inicialmente a los responsables políticos de las Sedes seleccionadas.

La historia se repite: periódicamente, la responsabilidad recae sobre una persona recién llegada al cargo; por supuesto, esta persona no puede terminar la labor ya empezada, ¡faltaría más! Tiene que revisar y remodelar el proyecto y aportar su personal punto de vista, ¿ qué más da si el proyecto ha tenido el consenso mayoritario de toda una comunidad científica?, ¿ qué más da si es el resultado de tres años de trabajo serio?, ¿ qué más da si eso retrasa o incluso paraliza el proceso? La consecuencia es un volver a empezar que retrotrae el tema a una situación previa, de tal manera que, cuando se consigue avanzar es tarde porque la persona en cuestión deja el cargo en manos de otro.

Si en vez del IEMath estuviéramos hablando de una iniciativa "tangible", mínimamente comprensible para el ciudadano (o sea, para el político), por ejemplo un Instituto de Ciencias Medioambientales, un Centro de Investigación en Física de Materiales o incluso un Instituto de Investigación Periodística, otro gallo cantaría. Lamentablemente, se trata de Matemáticas, una disciplina desconocida, ignorada y con frecuencia aborrecida, por mucho que sepamos que constituyen un elemento central del desarrollo científico y, además, intervienen constantemente en nuestra vida (pero esto sólo somos nosotros, y no todos, los que lo sabemos).

Deberíamos ser más conscientes de la manera que tienen de mirarnos, de lo que piensan de nosotros y de la imagen que inspiramos, a tenor de todo lo sucedido.

3 Preguntas y lamentos (a falta de conclusiones)

¿ Cómo es posible que hayamos estado tres años implicando a científicos españoles y extranjeros, creando paneles internacionales del más alto nivel, movilizando a todo un colectivo y no se haya conseguido nada?

¿ Cómo es posible que hayan "desaparecido" 2.500.000 Euros aprobados en los presupuestos de 2008 para el IEMath ? ¿ A quién hay que ir a reclamárselos ?

¿ Cómo se atreve nadie a vender la idea de que con esta nueva estructura se va a *agilizar* la creación de centros de alto prestigio en España habiéndole asignado para este año la ridícula cantidad de 800.000 Euros ? Aún así, ¿ cómo es posible que esta dotación lleve más de un año bloqueada, después de tan larguísimo proceso ? ¿ Es así como "se coloca la investigación y la tecnología en España en un lugar digno" ?

¿ No es una vergüenza internacional sin igual que, después de haber pasado año y medio, los candidatos a Director no hayan recibido ninguna respuesta por parte del Ministerio sobre su situación al respecto ?

¿ Qué debemos decir los miembros de la comisión de Puesta en Marcha a los candidatos a Director cuando nos encontremos con ellos o nos pregunten?

En su visita de mayo de 2007, el Prof. Bourguignon nos dijo que lo peor que le puede ocurrir a un proyecto científico de este tipo es caer en manos políticas. Intuimos que no se refería a este "caer en manos políticas"; parece difícil imaginar que una cosa así va a pasar antes de que suceda. No obstante, no se puede negar que llevaba mucha razón ...

Con todo lo ocurrido, sólo podemos concluir que la organización y el funcionamiento de nuestros responsables de política científica son, con raras excepciones, seriamente deficientes.

A estas alturas, tras tanto ir y venir y tanto detener y retomar, no queda en absoluto claro si estamos luchando por lo que se proyectó. En efecto, es evidente que, con tantos cambios impuestos, la estructura del IEMath cada vez se parece menos a lo que fue consensuado por la comunidad matemática española. En aquel entonces el CSIC no jugaba el papel que nos están imponiendo hoy día. Por otra parte, proyectamos en su día un IEMath que quería dar cobijo a toda la comunidad matemática y no sólo a cuatro Sedes. A los investigadores de las CCAA no implicadas y, sobre todo, a los que nos habéis transmitido vuestro malestar por haberse olvidado aparentemente el planteamiento inicial, os queremos decir que a nosotros no se nos olvida y que, si está en nuestras manos, seguiremos recordándolo.

4 Agradecimientos

No quisiéramos finalizar este artículo sin expresar nuestra más sincera gratitud a todas las personas que, de una u otra forma, han colaborado hasta la fecha en este proyecto.

En especial, muchas gracias a las personas que siguen:

De entrada, a Francisco Marcellán, por la labor que desarrolló mientras fue Secretario General de Poliítica Científica y Tecnológica y también después, mientras pudo. Lástima que su entusiasmo por estructuras como la que pretendemos sea una excepción.

También, a Santiago Rodríguez Uriel y a Ana Poveda, de la Secretaría de Estado de Universidades e Investigación del anterior Ministerio de Educación, por la gran ayuda que nos prestaron cuando fue preciso dar forma jurídica a nuestros documentos y convocatorias.

Finalmente, a los miembros de las diferentes comisiones que, junto con nosotros, trabajaron en el proyecto:

- Comisión IEMath: J. Bastero, A. Bermúdez de Castro, J. Bruna, E. Carrizosa, I. García Jurado, O. Gil, I. Luengo, J. Sanz Serna, S. Xambó.
- Panel de evaluación internacional: J.-P. Bourguignon (Presidente),
 D. Arnold, B. Keyfitz, R. de la Llave, J.J. Manfredi, S. Müller, D.Ñualart,
 D. Wallace.
- Comisión de Puesta en Marcha: M.A. Herrero (Presidente), J. Bonet, C. Casacuberta, A. Cuevas, A. Díaz Cano, M. de León, C. Martínez, S. Montiel, M.Ñoy, P. Quintela.
- Última comisión: C. Andradas, J. Bruna, F. Marcellán, F. Montero, J.J.Ñieto, A. Ros, J.M. Viaño.



MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION

SECRETARIA DE ESTADO DE INVESTIGACION

DIRECTORA DEL GABINETE

Enrique Fernández Cara Mª Jesús Carro Rossell

Madrid, 8 de julio de 2009

Estimados Señores:

Respondo a su comunicación del pasado 9 de junio, en la que manifiestan a la Ministra de Ciencia e Innovación su preocupación por la puesta en marcha del Instituto Español de Matemáticas.

El Departamento sigue impulsando su desarrollo, para lo cual figura en el presupuesto de gastos de este año una partida de 800.000 euros que tiene como destinatario al Consejo Superior de Investigaciones Científicas. El objetivo de esta transferencia es utilizar uno de los institutos del Consejo como base fisica y lugar de referencia para la puesta en marcha del proyecto científico de instituto en red que ustedes elaboraron. En nuestro actual organigrama, la unidad responsable de gestionar esta partida presupuestaria es la Subdirección General de Cooperación con Comunidades Autónomas.

Por otra parte, el Secretario General de Política Científica y Tecnológica, unidad hoy desaparecida, mantuvo una larga serie de contactos con diversas Comunidades Autónomas interesadas en participar en este proyecto y alcanzó un acuerdo sobre la firma del consiguiente convenio de colaboración. No obstante, los cambios de la mayor parte de los responsables de las áreas de investigación de las mencionadas Comunidades no permitieron culminar esta negociación con la tramitación y firma del documento por lo que, lamentablemente, tenemos que volver a iniciar los contactos pertinentes.

Pese a todas las vicisitudes mencionadas puedo asegurarles que el Ministerio continúa trabajando para que este proyecto, que tanto interés ha despertado en la comunidad matemática se materialice.

Atentamente,

ast 1000

Aurora Saeta del Castillo

C/ ALBACETE, 5 28071-MADRID Teléfono: 91/603 71 65 Fax: 91/603 70 04

Correo electrónico: gabinete.sei@micinn.es

HARNACK INEQUALITY AND NO-ARBITRAGE BOUNDS FOR SELF-FINANCING PORTFOLIOS

ALESSANDRO CARCIOLA*, ANDREA PASCUCCI[†], SERGIO POLIDORO[‡]

*Dipartimento di Matematica, Università Roma Tre, Largo S. Leonardo Murialdo, 1 00146 Roma, Italy

 † Dipartimento di Matematica, Università di Bologna, Piazza di Porta S. Donato 5,40126Bologna, Italy

[‡]Dipartimento di Matematica Pura ed Applicata, Università di Modena e Reggio Emilia, Via Campi, 213/b 41100 Modena, Italy

carciola@mat.uniroma3.it pascucci@dm.unibo.it sergio.polidoro@unimore.it

Abstract

We give a direct proof of the Harnack inequality for a class of Kolmogorov operators associated with a linear SDE and we find the explicit expression of the optimal Harnack constant. We discuss some possible implication of the Harnack inequality in finance: specifically we infer no-arbitrage bounds for the value of self-financing portfolios in terms of the initial wealth.

1 Introduction

Consider the linear SDE in \mathbb{R}^N

$$dX_t = (B(t)X_t + b(t))dt + \sigma(t)dW_t, \qquad (1)$$

where W is a d-dimensional Brownian motion with $d \leq N$ and $\sigma(t)$, B(t), b(t) are $L^{\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ -functions with values respectively in the matrix spaces of dimension $N \times d$, $N \times N$, $N \times 1$.

Equations of the form (1) naturally arise in several classical models in physics and in mathematical finance (see Section 2). It is well-known that (1), associated with the initial condition $X_{t_0} = x_0$, has the unique solution

$$X_t = E_{t_0}(t) \left(x_0 + \int_{t_0}^t E_{t_0}^{-1}(s)b(s)ds + \int_{t_0}^t E_{t_0}^{-1}(s)\sigma(s)dW_s \right),$$

where $E_{t_0} = E_{t_0}(t)$ is the fundamental matrix for the system $dX_t = B(t)dt$, i.e. the matrix-valued solution to $\dot{Y} = BY$ that satisfies $Y(t_0) = \mathrm{Id}_{\mathbb{R}^N}$. Moreover X_t has multinormal distribution with mean

$$m_{t_0,x_0}(t) = E_{t_0}(t) \left(x_0 + \int_{t_0}^t E_{t_0}^{-1}(s)b(s)ds \right),$$
(2)

and covariance matrix

$$\mathcal{C}_{t_0}(t) = E_{t_0}(t) \left(\int_{t_0}^t E_{t_0}^{-1}(s)\sigma(s) \left(E_{t_0}^{-1}(s)\sigma(s) \right)^* ds \right) E_{t_0}^*(t).$$
(3)

Note that the matrix $E_{t_0}^{-1}(s)\sigma(s)\left(E_{t_0}^{-1}(s)\sigma(s)\right)^*$ appearing in the previous integral has rank d. Nevertheless, it is remarkable that even when d < N the $N \times N$ matrix $C_{t_0}(t)$ can be strictly positive definite, as the following example shows.

Example 1 KOLMOGOROV [15]. Consider, the following SDE in \mathbb{R}^2

$$\begin{cases} dX_t^1 = \mu dt + \sigma_0 dW_t, \\ dX_t^2 = X_t^1 dt, \end{cases}$$

$$\tag{4}$$

with μ and σ_0 positive constants. It is a SDE of the form (1) with

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} \mu \\ 0 \end{pmatrix},$$

so that 1 = d < N = 2, and a direct computation gives

$$C_{t_0}(t_0+t) = \sigma_0^2 \begin{pmatrix} t & \frac{t^2}{2} \\ \frac{t^2}{2} & \frac{t^3}{3} \end{pmatrix} > 0 \quad for \ any \ t > 0.$$

In Section 2 we discuss some applications of (4) in finance. Here we recall that the (4) is a simplified version of the Langevin equation which describes the motion of a particle into a viscous fluid: in this case the coefficient σ_0 is the magnitude of the stochastic force and X_t^1 , X_t^2 respectively represent the velocity and the position of the particle. We refer to the paper by Bossy, Jabir and Talay [6] for some recent results about more general Lagrangian stochastic models.

In this paper we consider the SDE (1) under the assumption:

[H.1] the matrix $C_t(T)$ is positive definite for every t < T.

In that case, for any $t > t_0$, X_t has a density $x \mapsto \Gamma(t_0, x_0; t, x)$, where

$$\Gamma(t_0, x_0; t, x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathcal{C}_{t_0}(t)}} e^{-\frac{1}{2} \langle \mathcal{C}_{t_0}^{-1}(t) \left(x - m_{t_0, x_0}(t) \right), \left(x - m_{t_0, x_0}(t) \right) \rangle}.$$
 (5)

Moreover Γ is the fundamental solution to the Kolmogorov differential operator

$$L := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}(t) \partial_{x_i x_j} + \langle b(t) + B(t) x, \nabla \rangle + \partial_t, \qquad (t, x) \in \mathbb{R}^{N+1}, \quad (6)$$

where $A := (a_{ij}) = \sigma \sigma^*$ and $\nabla = (\partial_{x_1}, \cdots, \partial_{x_N})$. Specifically, this means that the function

$$u(t,x) = \int_{\mathbb{R}^N} \Gamma(t,x;T,y) \varphi(y) dy, \qquad t < T, \ x \in \mathbb{R}^N,$$

is a classical solution to the Cauchy problem

$$\begin{cases} Lu = 0 & \text{in }] - \infty, T[\times \mathbb{R}^N, \\ u(T, x) = \varphi(x), & x \in \mathbb{R}^N. \end{cases}$$

The Kolmogorov equation related to the system (4) is

$$\frac{\sigma_0^2}{2}\partial_{x_1x_1}u(t,x) + \mu\partial_{x_1}u(t,x) + x_1\partial_{x_2}u(t,x) + \partial_t u(t,x) = 0,$$
(7)

and its fundamental solution is

$$\Gamma(s, y; t, x) = \frac{\sqrt{3}}{\pi \sigma_0^2 (t - s)^2} \exp\left(-\frac{(x_1 - y_1 - \mu(t - s))^2}{2\sigma_0^2 (t - s)} - 3\frac{(2x_2 - 2y_2 - (t - s)(x_1 + y_1))^2}{2\sigma_0^2 (t - s)^3}\right).$$
(8)

It is interesting to remark that assumption [H.1] can be also expressed in geometric-differential terms. In fact, it is equivalent to the following condition due to Hörmander [12]:

[H.2]
$$\operatorname{rank} \mathcal{L}(Y_1, \cdots, Y_d, Y)(t, x) = N + 1, \qquad (t, x) \in \mathbb{R}^{N+1},$$

where $\mathcal{L}(Y_1, \cdots, Y_d, Y)$ denotes the Lie algebra generated by the vector fields in \mathbb{R}^{N+1}

$$Y_i = \sum_{j=1}^N \sigma_{ji} \partial_{x_j}, \qquad i = 1, \dots, d$$

and

$$Y = \langle b(t) + B(t)x, \nabla \rangle + \partial_t.$$
(9)

Recall that $\mathcal{L}(Y_1, \dots, Y_d, Y)(t, x)$ is the vector space generated by Y_1, \dots, Y_d , Y, by their first order commutators $[Y_k, Y], k = 1, \dots, d$, where $[Y_k, Y]u := Y_kYu - YY_ku$ and by their higher order commutators $[Y_j, \dots, [Y_k, Y]...]$, evaluated at the point (t, x).

A third condition, that is equivalent to the Hörmander condition and [H.1], arises in control theory. Given a positive T, a curve $\gamma : [0,T] \mapsto \mathbb{R}^N$ is *L*-admissible if it is absolutely continuous and satisfies

$$\gamma'(s) = B(s)\gamma(s) + b(s) + \sigma(s)w(s), \qquad \text{a.e. in } [0,T], \tag{10}$$

for a suitable function w with values in \mathbb{R}^d . The components w_1, \dots, w_d of w are called *controls* of the path γ . A fundamental result by Kalman, Ho and Narendra [13] states that [H.1] is equivalent to the following condition:

[H.3] for every $x, y \in \mathbb{R}^N$ and T > 0, there exists an L-admissible path such that $\gamma(0) = x$ and $\gamma(T) = y$.

When B and σ are constant matrices, the following algebraic condition is equivalent to [H.3]: consider the $N \times dN$ matrix

$$C(\sigma, B) := (\sigma \ B\sigma \ \dots \ B^{N-1}\sigma);$$

then [H.3] is satisfied if, and only if, rank $C(\sigma, B) = N$. In control theory the above statement is known as Kalman's rank condition, even if it appears first in a paper by LaSalle [18]. We finally recall that a sufficient controllability condition for time-varying matrices $\sigma(t)$ and B(t), which turns out to be also necessary for analytic coefficients, is rank $C(\sigma(t), B(t)) = N$, where $C(\sigma(t), B(t)) := (M_1(t) \dots M_N(t))$,

$$M_1(t) = \sigma(t), \quad M_k(t) = -B(t)M_{k-1}(t) + \frac{d}{dt}M_{k-1}(t) \quad k = 2, \cdots, N_k$$

We refer to Coron [9], Agrachev and Sachkov [1] for more details.

In this paper we are concerned with the Harnack inequality for the Kolmogorov operator (6) and its applications in finance, in particular noarbitrage bounds for the value of self-financing portfolios. Harnack inequalities are fundamental tools in the PDEs theory. They provide, for instance, regularity results of the weak solutions of Lu = 0 and uniqueness results for the related Cauchy problem. The Harnack inequalities for backward Kolmogorov operators available in literature read as follows: under the assumption [H.1], consider $(t, x), (T, y) \in \mathbb{R}^{N+1}$ with t < T. Then there exists a constant H = H(t, x, T, y), only dependent on L and (t, x), (T, y), such that

$$u(T,y) \le H u(t,x),\tag{11}$$

for every positive solution u to Lu = 0.

We next recall the Harnack inequality for Kolmogorov operators proved by Kupcov [16], Garofalo and Lanconelli [11] and Lanconelli and Polidoro [17] by using mean value formulas. It reads

$$u(T,y) \le H u(t,x), \qquad (t,x) \in Q_r(T,y) \quad t = T - cr^2.$$
 (12)

Here $Q_r(T, y)$ is a suitable cylinder of radius r centered at (T, y) (for the precise notation we refer to [17]) and the constants c and H only depend on L and on $Q_r(T, y)$.

In this paper we give a direct proof of the Harnack inequality (11) by using a variational argument due to Li and Yau [20], that allows to find explicitly the Harnack constant H. Our main result is the following:

Theorem 1 Assume that L in (6) verifies hypothesis [H.1] and let u be a positive solution to Lu = 0 in $[t_0, t_1] \times \mathbb{R}^N$. Then the Harnack inequality $u(T,y) \leq H u(t,x)$ holds with

$$H = H(t, x, T, y) = \sqrt{\frac{\det \mathcal{C}_t(t_1)}{\det \mathcal{C}_T(t_1)}} e^{\frac{1}{2} \langle \mathcal{C}_t^{-1}(T)(y - m_{t,x}(T)), (y - m_{t,x}(T)) \rangle}, \qquad (13)$$

for any $(t, x), (T, y) \in [t_0, t_1[\times \mathbb{R}^N \text{ with } t < T.$

We next give two examples that point out the optimality of the constant H(t, x, T, y) in (13).

Corollary 2 Let $u :] - \infty, \varepsilon[\times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ be a positive solution of the heat equation $\partial_t u + \frac{1}{2}\Delta u = 0$. Then $u(0, y) \leq Hu(t, x)$, for any $x, y \in \mathbb{R}^N, t < 0$, with

$$H = \sqrt{\frac{(\varepsilon - t)^N}{\varepsilon^N}} \exp\left(\frac{|x - y|^2}{-2t}\right).$$

Remark 1 The optimality of the constant H becomes apparent when applying the above inequality to the fundamental solution of the heat equation:

$$u(t,x) = (2\pi(\varepsilon - t))^{-N/2} \exp\left(-\frac{|x - y|^2}{2(\varepsilon - t)}\right), \qquad (t,x) \in] -\infty, \varepsilon[\times \mathbb{R}^N.$$

Note that, in this case, we have $u(0, y) = (2\pi\varepsilon)^{-N/2}$.

Corollary 3 Let $u:]-\infty, \varepsilon[\times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ be a positive solution of the Kolmogorov equation (7). Then $u(0, y) \leq Hu(t, x)$, for any $x, y, \in \mathbb{R}^2, t < 0$, with

$$H = \frac{(\varepsilon - t)^2}{\varepsilon^2} \exp\left(\frac{(x_1 - y_1 - \mu t)^2}{-2\sigma_0^2 t} + 3\frac{(2(y_2 - x_2) + t(x_1 + y_1))^2}{-2\sigma_0^2 t^3}\right).$$

Remark 2 Also in the case of the degenerate equation (7), the fundamental solution shows the optimality of the constant H. Let us consider the function

$$u(t,x) = \Gamma(t,x;\varepsilon,0), \qquad (t,x) \in]-\infty, \varepsilon[\times \mathbb{R}^2.$$

where Γ is defined in (8). Then $\frac{\sqrt{3}}{\pi\sigma_0^2\epsilon^2}\exp\left(-\frac{\mu^2\epsilon}{2\sigma_0^2}\right) = u(0,0) \leq Hu(t,x)$, with

$$u(t,x) = \frac{\sqrt{3}}{\pi\sigma_0^2(\varepsilon-t)^2} \exp\left(-\frac{(x_1+\mu(\varepsilon-t))^2}{2\sigma_0^2(\varepsilon-t)} - 3\frac{(2x_2+(\varepsilon-t)x_1)^2}{2\sigma_0^2(\varepsilon-t)^3}\right).$$

Theorem 1 provides a generalization of the result contained in the Corollary 1.2 of [24], that applies to a restricted class of Kolmogorov equations. The proof of Theorem 1 is based on the solution of an optimal control problem with quadratic cost. More specifically, we first prove (cf. Proposition 6) the following gradient estimate valid for positive solutions to L in $[t_0, t_1] \times \mathbb{R}^N$:

$$\frac{\langle A(t)\nabla u(t,x), \nabla u(t,x)\rangle}{2u(t,x)} \le -Yu(t,x) - \varphi'(t)u(t,x), \tag{14}$$

where $A = \sigma \sigma^*$, $\varphi(t) = \log \sqrt{\det C_t(t_1)}$ and Y is as in (9). Then the Harnack inequality follows by integrating inequality (14) along an *L*-admissible path of the form (10) and the optimal constant in (13) is obtained by minimizing the quadratic cost

$$\psi(w) := \int_t^T |w(s)|^2 ds.$$
(15)

We emphasize that our approach is quite general and applies to many different problems: parabolic equations on manifolds (Li and Yau [20]), porous media and p-diffusion equations (Auchmuty and Bao [2]), and sum of squares of vector fields (Cao and Yau [7]).

We recall that that a *local* Harnack inequality is proved in [26] and in [10] for the class of Kolmogorov operators in the form (6) with the coefficients a_{ij} that are Hölder continuous functions of (t, x). The local inequality has been used in [27] and in [10] to prove a lower bound analogous to the one stated in Theorem 1. The same method based on the optimal control theory, and on a local Harnack inequality (12), gives similar lower bounds for a more general class of PDEs (see [4] and [5]).

In the case of Kolmogorov operators with measurable coefficients, the Harnack inequality is still an open problem: aiming to adapt the theory by Moser [21, 22], some partial results were obtained in [25], [8]; however a crucial step is the proof of a Poincaré type inequality which has not yet been established.

The rest of the paper is organized as follows: in Section 2 we apply the Harnack inequality in the framework of the financial no-arbitrage theory and show how it yields an interesting a priori upper bound for the value of a self-financing portfolio in terms of the initial wealth (see Proposition 4). In Section 3 we prove the gradient estimate (14) for positive solutions of Lu = 0; Section 4 contains the proof of Theorem 1.

2 Harnack inequality and no-arbitrage bounds

In a standard multi-dimensional Black&Scholes model the risk neutral dynamics of N financial assets is given by

$$dS_t^i = rS_t^i dt + S_t^i \sum_{j=1}^N \sigma_{ij} dW_t^j = rS_t^i dt + S_t^i \sigma^i \cdot dW_t,$$

where $W = (W^1, \ldots, W^N)$ is a standard N-dimensional Brownian motion, σ is a non-singular $N \times N$ matrix with constant real entries and r is the constant risk free rate. We also denote as usual by B_t the bank account defined by

$$dB_t = rB_t dt.$$

We consider a Markovian portfolio that is a process $(\alpha, \beta) = (\alpha^1, \dots, \alpha^N, \beta)$ of the form

$$\alpha_t = \alpha(t, S_t), \qquad \beta_t = \beta(t, S_t),$$

where (α, β) are smooth functions. The value of (α, β) is defined as the process

$$V_t = \sum_{i=1}^N \alpha_t^i S_t^i + \beta_t B_t = \alpha_t \cdot S_t + \beta_t B_t.$$

We say that (α, β) has the self-financing property if

$$dV_t = \alpha_t \cdot dS_t + \beta_t dB_t. \tag{1}$$

It is well-known (see, for instance, [23] and [14]) that condition (1) is equivalent to the fact that

$$V_t = f(t, S_t), \quad \alpha_t = \nabla_S f(t, S_t), \quad \beta_t = e^{-rt} \left(f(t, S_t) - S_t \cdot \nabla_S f(t, S_t) \right),$$

where f = f(t, S) is a solution to the PDE

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} \left(\sigma\sigma^{*}\right)_{ij} S^{i} S^{j} \partial_{S^{i} S^{j}} f + rS \cdot \nabla_{S} f + \partial_{t} f - rf = 0.$$

$$\tag{2}$$

Putting $\log S = (\log S^1, \ldots, \log S^N)$, by the change of variables

$$f(t,S) = e^{rt}u(t,\log S),$$

equation (2) becomes

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} \left(\sigma\sigma^{*}\right)_{ij} \partial_{x_{i}x_{j}} u(t,x) + b \cdot \nabla u(t,x) + \partial_{t} u(t,x) = 0,$$
(3)

where b is the vector defined by

$$b_i = r - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \sigma_{ij}^2, \qquad i = 1, \dots, N.$$
 (4)

By applying the Harnack inequality in Theorem 1, we get the following

Proposition 4 Consider any self-financing and admissible (i.e. such that $V_t \ge 0$ for any t) portfolio defined on [0, T]. We have

$$V(t, S_t) \le e^{rt} H(S_0, S_t, t) V(0, S_0), \qquad 0 \le t < T,$$
(5)

where

$$H(S_0, S_t, t) = \left(\frac{T}{T-t}\right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{1}{2t} \left|\sigma^{-1} \left(\log \frac{S_t}{S_0} - tb\right)\right|^2} \\ = \left(\frac{T}{T-t}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left(\frac{1}{2t} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N (\sigma^{-1})_{ij} \left(\log \frac{S_t^i}{S_0^i} - tb_i\right)\right)^2\right),$$

with b as in (4).

Remark 3 Formula (5) provides an a priori upper estimate of the future value of a self-financing portfolio in terms of the initial wealth. The estimate is sharp since it is given in terms of the optimal Harnack constant in (13), and could be useful for portfolio optimization purposes.

Formula (5) gives also a proof of the absence of arbitrage opportunities in the market: indeed (5) implies that $V(t, S_t)$ cannot be positive starting from a null initial wealth and therefore the market is arbitrage free.

We emphasize that (5) gives a pointwise estimate of $V(t, S_t)$ and not simply an estimate of its expectation. Note also that the constant $H(S_0, S_t, t)$ blows up as $t \to T$: even though this is a well-known feature of Harnack inequalities in PDEs theory, it seems less intuitive from the financial point of view.

We next show an example of a pricing PDE related to (4) (so that d < N in (1)). Consider a geometric Asian option in the one-dimensional Black-Scholes model (cf. for instance [3]). In this case the risk neutral dynamics is given by

$$\begin{cases} dS_t = rS_t dt + \sigma_0 S_t dW_t, \\ dG_t = \log S_t dt. \end{cases}$$
(6)

Under the change of variables

$$X_t^1 = \log S_t, \qquad X_t^2 = G_t$$

we obtain the linear system (4) with $\mu = r - \frac{\sigma_0^2}{2}$. As a consequence of Corollary 3 we get a pointwise bound for the value of any admissible portfolio related to Asian options (6).

Proposition 5 Consider any self-financing and admissible portfolio for (6), defined on [0, T]. We have

$$V(t, S_t, G_t) \le e^{rt} H(S_0, S_t, G_t, t) V(0, S_0, 0), \qquad 0 < t < T,$$

where

$$H(S_0, S_t, G_t, t) = \left(\frac{T}{T - t}\right)^2 \exp\left(\frac{1}{2\sigma_0^2 t} \left(\log\frac{S_t}{S_0} - t\left(r - \frac{\sigma_0^2}{2}\right)\right)^2 + \frac{3}{2\sigma_0^2 t^3} \left(2G_t - t\log\left(S_t S_0\right)\right)^2\right).$$

3 Gradient estimate

The following gradient estimate for positive solutions to Lu = 0 holds.

Proposition 6 Assume hypothesis [H.1] and set

$$\varphi(t) = \log \sqrt{\det \mathcal{C}_t(t_1)}, \quad t < t_1.$$

Harnack inequality and no-arbitrage bounds for self-financing portfolios

Then for any positive solution u to Lu = 0 in the strip $[t_0, t_1] \times \mathbb{R}^N$ we have

$$\frac{\langle A(t)\nabla u(t,x), \nabla u(t,x)\rangle}{2u(t,x)} \le -Yu(t,x) - \varphi'(t)u(t,x), \tag{1}$$

with $A = \sigma \sigma^*$ and Y is as in (9)

Proof. Let $\Gamma(t, x; t_1, y)$ be the fundamental solution of (6), defined for $x, y \in \mathbb{R}^N$ and $t < t_1$. We first show that Γ verifies the equation

$$\frac{\langle A(t)\nabla_x\Gamma(t,x;t_1,y),\nabla_x\Gamma(t,x;t_1,y)\rangle}{2\Gamma(t,x;t_1,y)} = -Y\Gamma(t,x;t_1,y) - \varphi'(t)\Gamma(t,x;t_1,y), \quad (2)$$

and then prove the gradient estimate (1) by means of a representation formula for u. From (5) it follows that

$$\log \Gamma(t, x; t_1, y) = -\frac{N}{2} \log 2\pi - \varphi(t) -\frac{1}{2} \left\langle C_t^{-1}(t_1) \left(y - m_{t,x}(t_1) \right), \left(y - m_{t,x}(t_1) \right) \right\rangle.$$

Then we have

$$\nabla_x \log \Gamma(t, x; t_1, y) = -E_t^*(t_1) \mathcal{C}_t^{-1}(t_1) \left(m_{t, x}(t_1) - y \right)$$
(3)

and

$$-Y \log \Gamma(t, x; t_1, y) = \langle b(t) + B(t)x, E_t^*(t_1)C_t^{-1}(t_1) (m_{t,x}(t_1) - y) \rangle + \varphi'(t) + \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{d}{dt}C_t^{-1}(t_1) \right) (y - m_{t,x}(t_1)), (y - m_{t,x}(t_1)) \right\rangle + \left\langle C_t^{-1}(t_1) (m_{t,x}(t_1) - y), \frac{d}{dt} (m_{t,x}(t_1) - y) \right\rangle.$$
(4)

Since Γ is the fundamental solution of (6), we have

$$L\log\Gamma(t,x;t_1,y) + \frac{1}{2}\left\langle A(t)\nabla_x\log\Gamma(t,x;t_1,y),\nabla_x\log\Gamma(t,x;t_1,y)\right\rangle = 0 \quad (5)$$

Therefore if we set

$$(f_{ij}(t)) := E_t^*(t_1)\mathcal{C}_t^{-1}(t_1)E_t(t_1)$$

and we use (3), we find

$$-Y \log \Gamma(t, x; t_1, y) = \frac{1}{2} \langle A(t) \nabla_x \log \Gamma(t, x; t_1, y), \nabla_x \log \Gamma(t, x; t_1, y) \rangle$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N a_{ij}(t) f_{ij}(t).$$

Evaluating the above expression and (4) at $y = m_{t,x}(t_1)$, we finally obtain

$$\varphi'(t) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}(t) f_{ij}(t).$$

This proves that

$$Y\log\Gamma(t,x;t_1,y) + \frac{1}{2}\left\langle A(t)\nabla_x\log\Gamma(t,x;t_1,y),\nabla_x\log\Gamma(t,x;t_1,y)\right\rangle = -\varphi'(t)$$

which is equivalent to (2).

In order to conclude the proof, we fix $T < t_1$ and use the representation formula

$$u(t,x) = \int_{\mathbb{R}^N} \Gamma(t,x;T,y)u(T,y)dy, \qquad (t,x) \in [t_0,T] \times \mathbb{R}^N.$$

Then we have

$$-Yu - \varphi'(t)u = \int_{\mathbb{R}^N} \left(-Y\Gamma(\cdot, \cdot; T, y) - \varphi'(t)\Gamma(\cdot, \cdot; T, y)\right) u(T, y)dy = 0$$

(by (2))

$$= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\langle A(t) \nabla \Gamma(\cdot,\cdot;T,y), \nabla \Gamma(\cdot,\cdot;T,y) \rangle}{\Gamma(\cdot,\cdot;T,y)} \, u(T,y) dy \geq 0$$

(by Hölder inequality)

$$\begin{split} &\geq \frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \Gamma(\cdot,\cdot;T,y) \, u(T,y) dy \right)^{-1} \cdot \\ &\cdot \langle A \int_{\mathbb{R}^N} \nabla \Gamma(\cdot,\cdot;T,y) u(T,y) dy, \int_{\mathbb{R}^N} \nabla \Gamma(\cdot,\cdot;T,y) u(T,y) dy \rangle \\ &= \frac{\langle A \nabla u, \nabla u \rangle}{2u}. \end{split}$$

Г		
L		

4 Proof of Theorem 1

We first prove the following

Lemma 7 The L-admissible path $\bar{\gamma}$ correspondent to the control

$$\bar{w}(s) = \sigma^*(s) E_s(t) \mathcal{C}_t^{-1}(T) \left(y - m_{t,x}(T) \right),$$

minimizes the quadratic cost

$$\psi(w) = \int_t^T |w(s)|^2 ds.$$

Moreover the minimum cost is

$$\psi(\bar{w}) = \int_{t}^{T} |w(s)|^{2} ds = \left\langle \mathcal{C}_{t}^{-1}(T) \left(y - m_{t,x}(T) \right), \left(y - m_{t,x}(T) \right) \right\rangle.$$
(1)

Proof. Consider the Hamiltonian function

$$\mathcal{H}(x, p, w) = |w|^2 + p \left(Bx + \sigma w + b \right), \qquad p = (p_1, \cdots, p_N),$$

related to the control problem

$$\begin{cases} \gamma'(s) = B(s)\gamma(s) + b(s) + \sigma(s)w(s), \\ \gamma(t) = x, \ \gamma(T) = y. \end{cases}$$

From the classical control theory (see, for instance, Theorem 3, p.180 in [19]), the optimal control is of the form

$$w(s) = \sigma^*(s)p^*(s) \tag{2}$$

with p such that p' = -pB. The L-admissible path corresponding to (2) is

$$\gamma(s) = m_{t,x}(s) + \mathcal{C}_t(s)E_t^{*-1}(s)p^*(t)$$

where $p^*(t)$ is determined by imposing the condition $\gamma(T) = y$: specifically we have

$$p^{*}(t) = E_{t}^{*}(T)\mathcal{C}_{t}^{-1}(T)\left(y - m_{t,x}(T)\right),$$

and this concludes the proof.

Proof of Theorem 1. Let $\bar{\gamma}$ be the optimal *L*-admissible path in Lemma 7 and \bar{w} the corresponding optimal control. By adding the quantity

$$\frac{1}{2}u(s,\bar{\gamma}(s))|\bar{w}(s)|^2 - \langle \sigma^*(s)\nabla u(s,\bar{\gamma}(s)),\bar{w}(s)\rangle$$

to both sides of (1) evaluated at the point $(s, \bar{\gamma}(s))$, the new left hand side is the square of a norm and hence is non-negative. We then find

$$Yu(s,\bar{\gamma}(s)) + \langle \sigma^*(s)\nabla u(s,\bar{\gamma}(s)), \bar{w}(s) \rangle \le -\varphi'(s)u(s,\bar{\gamma}(s)) + \frac{1}{2}u(s,\bar{\gamma}(s))|\bar{w}(s)|^2.$$

By using the fact that $\bar{\gamma}$ is an *L*-admissible path, we then get

$$\frac{d}{ds}u(s,\bar{\gamma}(s)) \le -\varphi'(s)u(s,\bar{\gamma}(s)) + \frac{1}{2}u(s,\bar{\gamma}(s))|\bar{w}(s)|^2.$$

Dividing by u and integrating in the variable s over the interval [t, T], we finally see that

$$\log \frac{u(T,y)}{u(t,x)} \le \log \frac{\sqrt{\det \mathcal{C}_t(t_1)}}{\sqrt{\det \mathcal{C}_T(t_1)}} + \frac{1}{2} \int_s^t |\bar{w}(s)|^2 \, ds,$$

or, equivalently,

$$u(T,y) \le \sqrt{\frac{\det \mathcal{C}_t(t_1)}{\det \mathcal{C}_T(t_1)}} u(t,x) e^{\frac{1}{2}\psi(\bar{w})},$$

with $\psi(\bar{w})$ as in (1).

References

- A. A. Agrachev and Yu L. Sachkov. Control Theory from the Geometric Viewpoint. Springer, 2004.
- [2] G. Auchmuty and D. Bao. Harnack-type inequalities for evolution equations. Proc. Amer. Math. Soc., 122:117–129, 1994.
- [3] E. Barucci, S. Polidoro, and V. Vespri. Some results on partial differential equations and Asian options. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 11:475– 497, 2001.
- [4] Ugo Boscain and Sergio Polidoro. Gaussian estimates for hypoelliptic operators via optimal control. Atti Accad. Naz. Lincei Cl. Sci. Fis. Mat. Natur. Rend. Lincei (9) Mat. Appl., 18(4):333–342, 2007.
- [5] Ugo Boscain and Sergio Polidoro. Non local Harnack inequalities for a class of Partial Differential Equations. Proceedings of the 5th International ISAAC Congress, World Scientific, pages 701–710, 2009.
- [6] M. Bossy, J.F. Jabir, and D. Talay. On conditional McKean lagrangian stochastic models. *Rapport de recherche n.6761 - INRIA*, 2008.
- [7] H. D. Cao and S. T. Yau. Gradient estimates, Harnack inequalities and estimates for heat kernels of the sum of squares of vector fields. *Math. Z.*, 211:485–504, 1992.
- [8] Chiara Cinti, Andrea Pascucci, and Sergio Polidoro. Pointwise estimates for a class of non-homogeneous Kolmogorov equations. *Math. Ann.*, 340(2):237–264, 2008.
- [9] Jean-Michel Coron. Control and nonlinearity. Mathematical Surveys and Monographs 136. Providence, RI: American Mathematical Society (AMS). xiv, 426 p., 2007.
- [10] Marco Di Francesco and Sergio Polidoro. Schauder estimates, Harnack inequality and Gaussian lower bound for Kolmogorov-type operators in non-divergence form. Adv. Differential Equations, 11(11):1261–1320, 2006.
- [11] N. Garofalo and E. Lanconelli. Level sets of the fundamental solution and Harnack inequality for degenerate equations of Kolmogorov type. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 321:775–792, 1990.
- [12] L. Hörmander. Hypoelliptic second order differential equations. Acta Math., 119:147–171, 1967.
- [13] R. E. Kalman, Y. C. Ho, and K. S. Narendra. Controllability of linear dynamical systems. *Contributions to Differential Equations*, 1:189–213, 1963.

- [14] Ioannis Karatzas and Steven E. Shreve. Methods of mathematical finance. Applications of Mathematics. Berlin: Springer. xv, 407 p., 1998.
- [15] A. Kolmogorov. Zufällige Bewegungen. (Zur Theorie der Brownschen Bewegung.). Ann. of Math., II. Ser., 35:116–117, 1934.
- [16] L. P. Kupcov. The fundamental solutions of a certain class of ellipticparabolic second order equations. *Differential' nye Uravneija*, 8:1649–1660, 1716, 1972.
- [17] E. Lanconelli and S. Polidoro. On a class of hypoelliptic evolution operators. *Rend. Sem. Mat. Univ. Politec. Torino*, 52:29–63, 1994.
- [18] J. P. LaSalle. The time optimal control problem. In Contributions to the theory of nonlinear oscillations, Vol. V, pages 1–24. Princeton Univ. Press, Princeton, N.J., 1960.
- [19] E. B. Lee and L. Markus. Foundations of optimal control theory. John Wiley & Sons Inc., New York, 1967.
- [20] P. Li and S. T. Yau. On the parabolic kernel of Schrödinger operator. Acta Math., 156:153–201, 1986.
- [21] J. Moser. A Harnack inequality for parabolic differential equations. Comm. Pure Appl. Math., 17:101–134, 1964.
- [22] J. Moser. On a pointwise estimate for parabolic differential equations. Comm. Pure Appl. Math., 24:727–740, 1971.
- [23] A. Pascucci. *PDE and martingale methods in Finance*. Springer, forthcoming.
- [24] A. Pascucci and S. Polidoro. On the Harnack inequality for a class of hypoelliptic evolution equations. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 356:4383–4394, 2004.
- [25] Andrea Pascucci and Sergio Polidoro. The Moser's iterative method for a class of ultraparabolic equations. *Commun. Contemp. Math.*, 6(3):395–417, 2004.
- [26] S. Polidoro. On a class of ultraparabolic operators of Kolmogorov-Fokker-Planck type. *Matematiche (Catania)*, 49(1):53–105, 1994.
- [27] S. Polidoro. A global lower bound for the fundamental solution of Kolmogorov-Fokker-Planck equations. Arch. Rational Mech. Anal., 137(4):321–340, 1997.

Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. nº49(2009), 33-44

FROM THE LONG JUMP RANDOM WALK TO THE FRACTIONAL LAPLACIAN

ENRICO VALDINOCI

Dipartimento di Matematica, Università di Roma Tor Vergata Via della Ricerca Scientifica, 1. I-00133 Roma (Italy)

enrico@math.utexas.edu

Abstract

This note illustrates how a simple random walk with possibly long jumps is related to fractional powers of the Laplace operator. The exposition is elementary and self-contained.

''Le discese ardite e le risalite su nel cielo aperto e poi giù il deserto e poi ancora in alto con un grande salto...'' (Lucio Battisti, ''Io vorrei... non vorrei... ma se vuoi...'')

The purpose of this note, which is mainly pedagogical, is to show in a simple, concrete example how singular integrals naturally arise as a continuous limit of discrete, long jump random walks, and to recall a simple description of the integral kernels in terms of the Fourier multipliers.

Singular integrals and nonlocal (especially fractional) operators are a classical topic in harmonic analysis and operator theory [Lan72, Ste70] and they are now becoming impressively fashionable because of their connection with many real-world phenomena.

Indeed, nonlocal operators arise in the thin obstacle problem [Caf79], in optimization [DL76], in finance [CT04], in phase transitions [AB98, ABS98, CSM05, SiV09, in stratified materials [SaV09], in anomalous diffusion [MK00], in crystal dislocation [Tol97], in soft thin films [Kur06], in some models of

Fecha de recepción: 07/05/09. Aceptado (en forma revisada): 15/08/09.

It is a pleasure to acknowledge the interesting conversations on the subject of this note with Domenico Marinucci. The author has been supported by MIUR Project Variational Methods and Nonlinear Differential Equations, FIRB Project Analysis and Beyond and GNAMPA Project Equazioni nonlineari su varietà: proprietà qualitative e classificazione delle soluzioni.

semipermeable membranes and flame propagation [CRS08], in conservation laws [BKW01], in the ultra-relativistic limit of quantum mechanics [FdlL86], in quasi-geostrophic flows [MT96, Cor98], in multiple scattering [DG75, CK98, GK04], in minimal surfaces [CRS07], in materials science [Bat06] and in water waves [Sto57, Zak68, Whi74, CSS92, CG94, NS94, CW95, dlLP96, CSS97, CN00, GG03, HN05, NT08, dlLV]. See also [Sil05] for further motivation.

From a probabilistic point of view, such nonlocal operators are related to Lévy processes [Ito84, Ber96, BG99, JMW05]. A naive example in Section 1 will show a possible probabilistic interpretation. Then, in Section 2, we will recall an easy recipe for representing the singular integral kernel in terms of the Fourier symbols. The particular (and particularly interesting) case of the fractional Laplacian will be discussed in Section 3.

The exposition is self-contained and no prerequisite is needed: a basic undergraduate math knowledge will suffice. In fact, the main purpose of this note is to make space-fractional diffusion within range of non-mathematicians needing it or even to mathematicians at a step of understanding the essentials, by avoiding the technical subtleties of the hypersingular integrals. The readers which abhor multidimensional calculations may even consider the case n = 1 in the sequel.

On the other hand, we refer the expert reader to [GW70, Bre92, GM01, UG05] for more extensive results on random walk with transition probabilities of fractional type.

In the rest of this note, we will discard all the multiplicative normalizing constants. That is, following a convention typical of the lectures on Fourier analysis, we will write X = Y to mean that there is some normalizing constant C > 0 such¹ that X = CY.

1 Long jump random walks and singular integral kernels

Let $\mathcal{K} : \mathbb{R}^n \to [0, +\infty)$ be even, that is $\mathcal{K}(y) = \mathcal{K}(-y)$ for any $y \in \mathbb{R}^n$, and such that

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \mathcal{K}(k) = 1.$$
(1)

Given a small h > 0, we consider a random walk on the lattice $h\mathbb{Z}^n$.

We suppose that at any unit of time τ (which may depend on h), a particle jumps from any point of $h\mathbb{Z}^n$ to any other point.

The probability for which a particle jumps from the point $hk \in h\mathbb{Z}^n$ to the point $h\tilde{k}$ is taken to be $\mathcal{K}(k-\tilde{k}) = \mathcal{K}(\tilde{k}-k)$.

We also assume $\mathcal{K}(0) = 0$, so that jumps are forced to happen at any time step.

Note that, differently from the standard random walk, in this process the particle may experience arbitrarily long jumps, though with a small probability.

¹We hope that no reader is bothered by the fact that this convention implies, for instance, that $2\pi = 1$. It seems not to be a joke that on February 5, 1897, the House of Representatives of the State of Indiana unanimously passed a bill which would have supported such a new mathematical truth [Ind97].

We call u(x,t) the probability that our particle lies at $x \in h\mathbb{Z}^n$ at time $t \in \tau\mathbb{Z}$.

Of course, $u(x, t + \tau)$ equals the sum of all the probabilities of the possible positions x + hk at time t weighted by the probability of jumping from x + hk to x.

That is,

$$u(x,t+\tau) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \mathcal{K}(k)u(x+hk,t).$$

Therefore, recalling the normalization in (1),

$$u(x,t+\tau) - u(x,t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \mathcal{K}(k) \big(u(x+hk,t) - u(x,t) \big).$$
(2)

Particularly nice asymptotics are obtained in the case in which $\tau = h^{\alpha}$ and \mathcal{K} is a homogeneous kernel, say, up to normalization factors

$$\mathcal{K}(y) = |y|^{-(n+\alpha)}, \qquad \text{(for } y \neq 0 \text{ and, say, } \mathcal{K}(0) = 0\text{)}, \tag{3}$$

with

$$\alpha \in (0,2)$$

Here and in what follows, $|\cdot|$ denotes the standard Euclidean norm.

We observe that (1) holds (again, up to normalization) and

$$\frac{\mathcal{K}(k)}{\tau} = h^n \mathcal{K}(hk). \tag{4}$$

Thus, in this case it is convenient to define

$$\psi(y, x, t) = \mathcal{K}(y) \big(u(x+y, t) - u(x, t) \big)$$

and to use (4) to write (2) as

$$\frac{u(x,t+\tau)-u(x,t)}{\tau} = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \frac{\mathcal{K}(k)}{\tau} \big(u(x+hk,t) - u(x,t) \big) \\
= h^n \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \mathcal{K}(hk) \big(u(x+hk,t) - u(x,t) \big) \qquad (5) \\
= h^n \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \psi(hk,x,t).$$

Since the latter is just the approximating Riemann sum of

$$\int_{\mathbb{R}^n} \psi(y, x, t) \, dy,$$

by sending $\tau = h^{\alpha} \to 0^+$ in (5), that is, by taking the continuous limit of the discrete random walk, we obtain

$$\partial_t u(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(y,x,t) \, dy$$

that is

$$\partial_t u(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{u(x+y,t) - u(x,t)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy. \tag{6}$$

This shows that a simple random walk with possibly long jumps produces, in the limit, a singular integral with a homogeneous kernel.

We remark that the integral

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{u(x+y) - u(x)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy,\tag{7}$$

which appears in (6) has a singularity when y = 0.

However, when $\alpha \in (0,2)$ and u is smooth and bounded, such integral is well defined as principal value, that is as

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{\mathbb{R}^n \setminus B_{\epsilon}} \frac{u(x+y) - u(x)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy.$$

Indeed, $|y|^{-(n+\alpha)}$ is integrable at infinity and

$$\int_{B_1} \frac{\nabla u(x) \cdot y}{|y|^{n+\alpha}} = 0$$

as principal value, because the function $y/|y|^{n+\alpha}$ is odd.

Therefore, we may write the singular integral in (7) as principal value near 0 in the form

$$\int_{B_1} \frac{u(x+y) - u(x) - \nabla u(x) \cdot y}{|y|^{n+\alpha}} \, dy$$

and the latter is a convergent integral near 0 because

$$\frac{|u(x+y) - u(x) - \nabla u(x) \cdot y|}{|y|^{n+\alpha}} \leqslant \frac{\|D^2 u\|_{L^{\infty}} |y|^2}{|y|^{n+\alpha}} = \frac{\|D^2 u\|_{L^{\infty}}}{|y|^{n-2+\alpha}}$$

which is integrable near 0.

It is also interesting to write the singular integral in (7) as a weighted second order differential quotient.

For this, we observe that, substituting $\tilde{y} = -y$, we have that the integral in (7) equals to

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{u(x-\tilde{y}) - u(x)}{|\tilde{y}|^{n+\alpha}} d\tilde{y}.$$
(8)

Therefore, relabeling \tilde{y} as y in (8), we have that

$$2\int_{\mathbb{R}^{n}} \frac{u(x+y) - u(x)}{|y|^{n+\alpha}} dy$$

=
$$\int_{\mathbb{R}^{n}} \frac{u(x+y) - u(x)}{|y|^{n+\alpha}} dy + \int_{\mathbb{R}^{n}} \frac{u(x-y) - u(x)}{|y|^{n+\alpha}} dy \qquad (9)$$

=
$$\int_{\mathbb{R}^{n}} \frac{u(x+y) + u(x-y) - 2u(x)}{|y|^{n+\alpha}} dy.$$
The equality obtained in (9) shows that the singular integral in (7) may be written, up to a factor 2, as an average of the second incremental quotient u(x+y) + u(x-y) - 2u(x) against the weight $|y|^{n+\alpha}$.

Such a representation is also useful to remove the singularity of the integral at 0, since, for smooth u, a second order Taylor expansion gives that

$$\frac{u(x+y) + u(x-y) - 2u(x)}{|y|^{n+\alpha}} \leqslant \frac{\|D^2 u\|_{L^{\infty}}}{|y|^{n-2+\alpha}}$$

which is integrable near 0.

It is known [Sil05] that the singular integral in (7) is related to the fractional Laplacian $(-\Delta)^{\alpha/2}$. This relation will be outlined here below (see, in particular (14) and (18) below).

It is also interesting to write the displacement of the above random walk at time $n\tau$, for any $n \in \mathbb{N}$. Namely, if $h\epsilon_j \in h\mathbb{Z}^n$ is the jump performed at time $j\tau$ (that is, the "innovation"), the above discussed random walk is made in such a way that the probability that ϵ_j equals k is $\mathcal{K}(k)$.

The displacement at time $n\tau$ is then the sum of these innovations, that is

$$\sum_{j=1}^{n} h\epsilon_j.$$

The β -moment associated to this process is then

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}^n}|k|^{\beta}\mathcal{K}(k)=\sum_{k\in\mathbb{Z}^n\backslash\{0\}}|k|^{\beta-n-\alpha},$$

which is finite if and only if $\beta < \alpha$.

In the probability theory framework, this is interpreted as the innovation being in the domain of attraction of an " α -stable random variable" [ST94].

In particular, the associated variance is not finite, thus reflecting that the process is not Gaussian.

2 Kernels and Fourier symbols

Given a "nice" (say, smooth and with fast decay, for simplicity) function u, the long jump random walk of Section 1 has lead us to the study of integrals of the type

$$\int_{\mathbb{R}^n} \left(u(x+y) + u(x-y) - 2u(x) \right) \mathcal{K}(y) \, dy, \tag{10}$$

due to (9).

If we call $\mathcal{L}u$ the integral in (10), one may consider \mathcal{L} a linear operator and look for its "symbol" (or "multiplier") in Fourier space.

That is, if ${\mathcal F}$ denotes the Fourier transform, one may think to write

$$\mathcal{L}u(x) = \mathcal{F}^{-1}\big(\mathcal{S}\left(\mathcal{F}u\right)\big),\tag{11}$$

for some function $\mathcal{S}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

The interesting fact is that \mathcal{K} and \mathcal{S} are related as follows:

$$\mathcal{S}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^n} \big(\cos(\xi \cdot y) - 1 \big) \mathcal{K}(y) \, dy, \tag{12}$$

up to normalization factors.

To check that (12) holds, one simply Fourier transforms (11) in the variable x, calling ξ the corresponding frequency variable: making use of (10) one obtains

$$\begin{split} \mathcal{S}(\xi) \left(\mathcal{F}u\right)(\xi) &= \mathcal{F}(\mathcal{L}u) \\ &= \mathcal{F}\left(\int_{\mathbb{R}^n} \left(u(x+y) + u(x-y) - 2u(x)\right)\mathcal{K}(y) \, dy\right) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(\mathcal{F}\left(u(x+y) + u(x-y) - 2u(x)\right)\right)\mathcal{K}(y) \, dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(e^{i\xi \cdot y} + e^{-i\xi \cdot y} - 2\right) \, \left(\mathcal{F}u\right)(\xi) \, \mathcal{K}(y) \, dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(e^{i\xi \cdot y} + e^{-i\xi \cdot y} - 2\right) \, \mathcal{K}(y) \, dy \, \left(\mathcal{F}u\right)(\xi) \\ &= 2 \int_{\mathbb{R}^n} \left(\cos(\xi \cdot y) - 1\right) \, \mathcal{K}(y) \, dy \, \left(\mathcal{F}u\right)(\xi), \end{split}$$

proving (12).

3 The fractional Laplacian

The fractional Laplacian may be naturally introduced in the Fourier space.

Indeed, one has that

$$\partial_j u = \mathcal{F}^{-1} \big(i \xi_j (\mathcal{F} u) \big)$$

and therefore

$$-\Delta u = \mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2(\mathcal{F}u)).$$

Thus, it is natural to define, for $\alpha \in (0, 2)$,

$$(-\Delta)^{\alpha/2}u = \mathcal{F}^{-1}(|\xi|^{\alpha}(\mathcal{F}u)).$$
(13)

It is known [Lan72, Ste70] that such a fractional Laplacian may be also represented as the principal value of singular integral, namely

$$(-\Delta)^{\alpha/2} u = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{u(x) - u(y)}{|x - y|^{n + \alpha}} \, dy, \tag{14}$$

up to normalizing constants – again, the above integral is intended in the principal value sense.

Notice that, by (9), one can also write (14) as

$$(-\Delta)^{\alpha/2}u = -\int_{\mathbb{R}^n} \frac{u(x+y) + u(x-y) - 2u(x)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy$$

up to normalizing factors.

We give here a simple proof of the equivalence between the definitions in (13) and in (14).

For this, we observe that, in the notation of (10) and (11), we may write (13) and (14) as

$$\mathcal{S}(\xi) = |\xi|^{\alpha}$$
 and $\mathcal{K}(y) = -|y|^{-(n+\alpha)}$.

Therefore, by (12), such equivalence boils down to prove that

$$|\xi|^{\alpha} = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos(\xi \cdot y)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy. \tag{15}$$

To prove (15), first observe that, if $\zeta = (\zeta_1, \ldots, \zeta_n) \in \mathbb{R}^n$, we have

$$\frac{1-\cos\zeta_1}{|\zeta|^{n+\alpha}}\leqslant \frac{|\zeta_1|^2}{|\zeta|^{n+\alpha}}\leqslant \frac{1}{|\zeta|^{n-2+\alpha}}$$

near $\zeta = 0$, therefore

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos\zeta_1}{|\zeta|^{n+\alpha}} \, d\zeta \quad \text{is finite and positive.} \tag{16}$$

We now consider the function

$$\mathcal{J}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos(\xi \cdot y)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy.$$

We have that \mathcal{J} is rotationally invariant, that is

$$\mathcal{J}(\xi) = \mathcal{J}(|\xi|e_1). \tag{17}$$

Indeed, if n = 1, then one easily checks that $\mathcal{J}(-\xi) = \mathcal{J}(\xi)$, proving (17) in this case.

When $n \ge 2$, we consider a rotation R for which

$$R(|\xi|e_1) = \xi$$

and we denote by R^T its transpose. We obtain, via the substitution $\tilde{y} = R^T y$,

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\xi) &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos\left(\left(R(|\xi|e_1)\right) \cdot y\right)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos\left(\left(|\xi|e_1) \cdot (R^T y)\right)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos\left(\left(|\xi|e_1) \cdot \tilde{y}\right)}{|\tilde{y}|^{n+\alpha}} \, dy \\ &= \mathcal{J}(|\xi|e_1), \end{aligned}$$

which proves
$$(17)$$
.

As a consequence of (17) and (16), the substitution $\zeta = |\xi|y$ gives that

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\xi) &= \mathcal{J}(|\xi|e_1) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos(|\xi|y_1)}{|y|^{n+\alpha}} \, dy \\ &= \frac{1}{|\xi|^n} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1 - \cos\zeta_1}{|\zeta/|\xi||^{n+\alpha}} \, d\zeta = |\xi|^{\alpha}, \end{aligned}$$

up to normalization factors, hence (15) is proved, thus so is the equivalence between (13) and (14).

We remark that, from (14), the probability density of the limit long jump random walk in (6) may be written as

$$\partial_t u = -(-\Delta)^{\alpha/2} u. \tag{18}$$

References

- [AB98] Giovanni Alberti and Giovanni Bellettini. A nonlocal anisotropic model for phase transitions. I. The optimal profile problem. *Math.* Ann., 310(3):527–560, 1998.
- [ABS98] Giovanni Alberti, Guy Bouchitté, and Pierre Seppecher. Phase transition with the line-tension effect. Arch. Rational Mech. Anal., 144(1):1–46, 1998.
- [Bat06] Peter W. Bates. On some nonlocal evolution equations arising in materials science. In Nonlinear dynamics and evolution equations, volume 48 of Fields Inst. Commun., pages 13–52. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2006.
- [Ber96] Jean Bertoin. Lévy processes, volume 121 of Cambridge Tracts in Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [BG99] Tomasz Bojdecki and Luis G. Gorostiza. Fractional Brownian motion via fractional Laplacian. *Statist. Probab. Lett.*, 44(1):107–108, 1999.
- [BKW01] Piotr Biler, Grzegorz Karch, and Wojbor A. Woyczyński. Critical nonlinearity exponent and self-similar asymptotics for Lévy conservation laws. Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, 18(5):613-637, 2001.
- [Bre92] Leo Breiman. Probability, volume 7 of Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1992. Corrected reprint of the 1968 original.
- [Caf79] L. A. Caffarelli. Further regularity for the Signorini problem. Comm. Partial Differential Equations, 4(9):1067–1075, 1979.

- [CG94] Walter Craig and Mark D. Groves. Hamiltonian long-wave approximations to the water-wave problem. Wave Motion, 19(4):367– 389, 1994.
- [CK98] David Colton and Rainer Kress. Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory, volume 93 of Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1998.
- [CN00] Walter Craig and David P. Nicholls. Travelling two and three dimensional capillary gravity water waves. SIAM J. Math. Anal., 32(2):323–359 (electronic), 2000.
- [Cor98] Diego Cordoba. Nonexistence of simple hyperbolic blow-up for the quasi-geostrophic equation. Ann. of Math. (2), 148(3):1135–1152, 1998.
- [CRS07] Luis Caffarelli, Jean-Michel Roquejoffre, and Ovidiu Savin. Non-local minimal surfaces. In preparation, 2007.
- [CRS08] Luis Caffarelli, Jean-Michel Roquejoffre, and Yannick Sire. Free boundaries with fractional Laplacians. *In preparation*, 2008.
- [CSM05] Xavier Cabré and Joan Solà-Morales. Layer solutions in a half-space for boundary reactions. Comm. Pure Appl. Math., 58(12):1678–1732, 2005.
- [CSS92] W. Craig, C. Sulem, and P.-L. Sulem. Nonlinear modulation of gravity waves: a rigorous approach. Nonlinearity, 5(2):497–522, 1992.
- [CSS97] Walter Craig, Ulrich Schanz, and Catherine Sulem. The modulational regime of three-dimensional water waves and the Davey-Stewartson system. Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, 14(5):615–667, 1997.
- [CT04] Rama Cont and Peter Tankov. Financial modelling with jump processes. Chapman & Hall/CRC Financial Mathematics Series. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2004.
- [CW95] Walter Craig and Patrick A. Worfolk. An integrable normal form for water waves in infinite depth. Phys. D, 84(3-4):513-531, 1995.
- [DG75] J. J. Duistermaat and V. W. Guillemin. The spectrum of positive elliptic operators and periodic bicharacteristics. *Invent. Math.*, 29(1):39–79, 1975.
- [DL76] G. Duvaut and J.-L. Lions. Inequalities in mechanics and physics. Springer-Verlag, Berlin, 1976. Translated from the French by C. W. John, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, 219.
- [dlLP96] R. de la Llave and P. Panayotaros. Gravity waves on the surface of the sphere. J. Nonlinear Sci., 6(2):147–167, 1996.

- [dlLV] Rafael de la Llave and Enrico Valdinoci. Symmetry for a Dirichlet-Neumann problem arising in water waves. *To appear in Math. Res. Lett.*
- [FdlL86] C. Fefferman and R. de la Llave. Relativistic stability of matter. I. Rev. Mat. Iberoamericana, 2(1-2):119–213, 1986.
- [GG03] Günter K. Gächter and Marcus J. Grote. Dirichlet-to-Neumann map for three-dimensional elastic waves. Wave Motion, 37(3):293–311, 2003.
- [GK04] Marcus J. Grote and Christoph Kirsch. Dirichlet-to-Neumann boundary conditions for multiple scattering problems. J. Comput. Phys., 201(2):630–650, 2004.
- [GM01] Rudolf Gorenflo and Francesco Mainardi. Random walk models approximating symmetric space-fractional diffusion processes. In Problems and methods in mathematical physics (Chemnitz, 1999), volume 121 of Oper. Theory Adv. Appl., pages 120–145. Birkhäuser, Basel, 2001.
- [GW70] Joseph E. Gillis and George H. Weiss. Expected number of distinct sites visited by a random walk with an infinite variance. J. Mathematical Phys., 11:1307–1312, 1970.
- [HN05] Bei Hu and David P. Nicholls. Analyticity of Dirichlet-Neumann operators on Hölder and Lipschitz domains. SIAM J. Math. Anal., 37(1):302–320 (electronic), 2005.
- [Ind97] The State of Indiana. The Indiana Pi Bill, 1897. http://www.agecon.purdue.edu/crd/Localgov/Secondbill.htm.
- [Ito84] K. Ito. Lectures on stochastic processes, volume 24 of Tata Institute of Fundamental Research Lectures on Mathematics and Physics. Distributed for the Tata Institute of Fundamental Research, Bombay, second edition, 1984. Notes by K. Muralidhara Rao.
- [JMW05] Benjamin Jourdain, Sylvie Méléard, and Wojbor A. Woyczynski. A probabilistic approach for nonlinear equations involving the fractional Laplacian and a singular operator. *Potential Anal.*, 23(1):55–81, 2005.
- [Kur06] Matthias Kurzke. A nonlocal singular perturbation problem with periodic well potential. *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, 12(1):52– 63 (electronic), 2006.
- [Lan72] N. S. Landkof. Foundations of modern potential theory. Springer-Verlag, New York, 1972. Translated from the Russian by A. P. Doohovskoy, Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 180.

- [MK00] Ralf Metzler and Joseph Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Phys. Rep.*, 339(1):77, 2000.
- [MT96] Andrew J. Majda and Esteban G. Tabak. A two-dimensional model for quasigeostrophic flow: comparison with the two-dimensional Euler flow. *Phys. D*, 98(2-4):515–522, 1996. Nonlinear phenomena in ocean dynamics (Los Alamos, NM, 1995).
- [NS94] P. I. Naumkin and I. A. Shishmarëv. Nonlinear nonlocal equations in the theory of waves. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994. Translated from the Russian manuscript by Boris Gommerstadt.
- [NT08] David P. Nicholls and Mark Taber. Joint analyticity and analytic continuation of Dirichlet-Neumann operators on doubly perturbed domains. J. Math. Fluid Mech., 10(2):238–271, 2008.
- [Sil05] Luis Silvestre. Regularity of the obstacle problem for a fractional power of the Laplace operator. PhD thesis, University of Texas at Austin, 2005.
- [ST94] Gennady Samorodnitsky and Murad S. Taqqu. Stable non-Gaussian random processes. Stochastic Modeling. Chapman & Hall, New York, 1994. Stochastic models with infinite variance.
- [Ste70] Elias M. Stein. Singular integrals and differentiability properties of functions. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1970. Princeton Mathematical Series, No. 30.
- [Sto57] J. J. Stoker. Water waves: The mathematical theory with applications. Pure and Applied Mathematics, Vol. IV. Interscience Publishers, Inc., New York, 1957.
- [SiV09] Yannick Sire and Enrico Valdinoci. Fractional Laplacian phase transitions and boundary reactions: a geometric inequality and a symmetry result. J. Funct. Anal., 256(6):1842–1864, 2009.
- [SaV09] Ovidiu Savin and Enrico Valdinoci. Elliptic PDEs with fibered nonlinearities. J. Geom. Anal., 19(2):420–432, 2009.
- [Tol97] J. F. Toland. The Peierls-Nabarro and Benjamin-Ono equations. J. Funct. Anal., 145(1):136–150, 1997.
- [UG05] Sabir Umarov and Rudolf Gorenflo. On multi-dimensional random walk models approximating symmetric space-fractional diffusion processes. *Fract. Calc. Appl. Anal.*, 8(1):73–88, 2005.
- [Whi74] G. B. Whitham. Linear and nonlinear waves. Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], New York, 1974. Pure and Applied Mathematics.

[Zak68] V.E. Zakharov. Stability of periodic waves of finite amplitude on the surface of a deep fluid. *Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.*, 9:86–94, 1968.

Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. n°49(2009), 45–64

EFFECTS OF CHARGE-CHARGE INTERACTIONS AND EXTERNAL FIELDS IN SHAPE TRANSFORMATIONS OF CLOSED FILAMENTS

YU.B. GAIDIDEI*, C. GORRIA§, P.L. CHRISTIANSEN[†], M.P. Sørensen[‡] and H. Büttner^{†‡}

*Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Kiev, Ukraine.
[§]Department of Applied Mathematics and Statistics, University of the Basque Country, Bilbao, Spain.
[†]Informatics and Mathematical Modeling and Department of Physics, The Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark.
[‡]Department of Mathematics, The Technical University of Denmark, Lyngby Denmark.
^{†‡}Physikalisches Institut, Theoretische Physik I, Universität Bayreuth, Bayreuth, Germany

> ybg@bitp.kiev.ua carlos.gorria@ehu.es plc@imm.dtu.dk M.P.Soerensen@mat.dtu.dk Helmut.Buettner@uni-bayreuth.de

Abstract

The role of charge-charge interactions in shape transformations of closed filaments induced by the charge-curvature coupling is studied. It is shown that while sufficiently strong repulsive interaction between carriers makes a circular shape of the filament energetically more favorable with a spatially uniform charge distribution along the filament, the attractive interaction facilitates a creation of polygonal filaments. The robustness of the shape transformation process with respect to external forces which are time and space periodic, is considered. It is shown that strong enough external driving makes the shape of the filament and the charge distribution along the filament highly irregular.

Key words: charge-charge interaction, polygonal shapes, closed filaments, conformational transformation.

1 Introduction

Understanding how biological macromolecules (proteins, DNA, RNA, etc) function in the living cells remains the major challenge in molecular biology. The functioning of biological macromolecules, their mobility in cytoplasm depend

Fecha de recepción: 03/06/09. Aceptado (en forma revisada): 03/09/09.

on the shape of biopolymers. Even modest conformational changes modify the hydrogen accessibility of DNA fragments and in this way facilitates strand breaks in DNA molecules [1]. They may remove steric hindrances and open the pathways for molecular motions which are not available in rigid proteins [2]. The DNA conformation in the nucleosome core is crucial for gene replication, transcription and recombination [3]. DNA as many biological macromolecules on the length scales of few persistent lengths behaves as a worm-like chain. Recent DNA cyclication experiments [4, 5, 6] have shown the facile in vitro formation of DNA circles shorter than 30 nm (100 base pairs) which shorter than commonly accepted persistence length 50nm (150 base pairs). This means that the worm-like chain model does not work for such short DNA molecules and to explain this phenomenon one should allow local softening of DNA which facilitates disruptions (kinks) in the regular DNA structure [5, 7, 8]. According to [5] the kink formation is due to strong DNA bending while in [6] that the softening originates from Watson-Crick base-pair breathing. In Ref. [8] a new class of models with nonlinear DNA elasticity was introduced. It was shown in [8] that a "subelastic chain" model in the frame of which the bending energy is proportional to the absolute value of the curvature can reproduce the main features of Cloutier and Widom's experiments.

The description of flexible filaments in terms of elastic theory is a widely used approach which allows to interpret experimental results. The bending rigidity of a biopolymer can be varied by various means, for example, by anchoring small molecules [9], by incorporating photosensitive molecules [10], or by trapping particles [11]. The elastic behavior of polymers and membranes drastically depends on the presence of charged groups. The electrostatic repulsion between different charged parts of semiflexible polymers and membranes increases the bending rigidity [12]. Mobile charges on membranes also modify the effective elastic bending modulus and may induce a local spontaneous curvature in a single monolayer [13]. A new mechanism for a modification of bending rigidity was proposed in [14] where it was found that counterion fluctuations contribute to the bending rigidity which logarithmically depends on the radius of curvature. This may lead to negative electrostatic contribution to the bending rigidity of charged membranes and polyelectrolytes [15] and spontaneous shape transformations in membranes (vesicles) and biopolymers (e.g. DNA molecules [16]).

The description of shape transformations of membranes and filaments is a very involved mathematical problem. To describe these transformations one should solve complicated nonlinear differential equations. Even the simplest case of periodic buckling of tubular filaments is described by a set of two coupled nonlinear equations for the curvature and torsion [17] which can be solved only approximately. Polygonal shape transformations of vesicles which are widely observed in liposomes are usually analyzed on the basis of the Helfrich spontaneous curvature model and the solutions of corresponding nonlinear equations were found for circular and axisymmetric cases [18]

Quite recently a simple, *generic* model for charge-curvature interactions on closed molecular filaments was proposed [19, 20, 21]. It was shown that the

presence of charge modifies (softens or hardens) the local chain stiffness. It was found that due to the interaction between charge carriers and the bending degrees of freedom the circular shape of the filament may become unstable and the aggregate takes the shape of an ellipse or, in general, of a polygon. It was shown also that when the charge-curvature interaction leads to softening the local chain stiffness kinks spontaneously appear in the chain. These results were obtained under the assumption that the effects of carrier-carrier interactions are negligible.

The aim of this paper is to extend the results of Ref. [19] by taking into account the effects of charge-charge interaction and interaction between the macromolecule and external fields. The paper is organized as follows. In Sec. II we describe a model. In Sec. III we present an analytical approach to the problem. In Sec. IV we discuss the effects of interactions between carriers on the process of shape transformation. In Sec. V we study the effects of external driving. In Sec. VI we present some concluding remarks.

2 The model

We consider a polymer chain consisting of L units (for DNA each unit is a base pair) labeled by an index l, and located at the points $\vec{r}_l = \{x_l, y_l\}$ $(l = 1 \dots L)$. We are interested in the case when the chain is closed and so we impose the periodicity condition on the coordinates \vec{r}_l

$$\vec{r}_l = \vec{r}_{l+L}.\tag{1}$$

We assume that there is a small amount of mobile carriers (electrons, holes in the case of DNA, protons in the case of hydrogen bonded systems) on the chain. The Hamiltonian of the system can be presented as the sum

$$H_{tot} = H + H_f(t). \tag{2}$$

The first term in this equation is Hamiltonian of an isolated filament

$$H = U_b + U_s + H_{el} + H_{el-conf} + H_{cor}.$$
(3)

Here

$$U_b = \frac{k}{2} \sum_l \frac{\kappa_l^2}{1 - \kappa_l^2 / \kappa_{max}^2} \tag{4}$$

is the bending energy of the chain where

$$\kappa_l \equiv |\vec{\tau}_l - \vec{\tau}_{l-1}| = 2\sin\frac{\alpha_l}{2} \tag{5}$$

determines the curvature of the chain at the point l. Here

$$\vec{\tau}_l = \frac{\vec{r}_{l+1} - \vec{r}_l}{|\vec{r}_{l+1} - \vec{r}_l|} \tag{6}$$

is the tangent vector at the point l of the chain and α_l is the angle between the tangent vectors $\vec{\tau}_l$ and $\vec{\tau}_{l-1}$, k is the elastic modulus of the bending rigidity (spring constant) of the chain. The term $\kappa_l^2/\kappa_{max}^2$ in Eq. (4) gives the penalty for too large bending deformations. Here the parameter $\kappa_{max} = 2 \sin(\alpha_{max}/2)$ is the maximum local curvature with α_{max} being the maximum bending angle. The second term in Eq. (3)

$$U_s = \frac{\sigma}{2} \sum_{l} \left(|\vec{r}_l - \vec{r}_{l+1}| - a \right)^2 \tag{7}$$

determines the stretching energy with σ being an elastic modulus of the stretching rigidity of the chain and a is the equilibrium distance between units (in what follows we assume a = 1). We take the simplest theoretical model for charge carriers, a nearest neighbor tight binding Hamiltonian in the form

$$H_{el} = J \sum_{l} \left| \psi_l - \psi_{l+1} \right|^2, \qquad (8)$$

where ψ_l is the wave function of the carrier localized on a site l and J describes carrier hopping between adjacent sites. The next term in Eq. (3) represents the charge-curvature interaction. In the small curvature limit it has the form

$$H_{el-conf} = -\frac{1}{2} \sum_{l} \chi |\psi_l|^2 \left(\kappa_{l+1}^2 + \kappa_{l-1}^2\right), \tag{9}$$

here χ is the coupling constant. Combining Eqs. (4) and (9), we notice that the effective bending rigidity changes close to the points where the electron (hole) is localized. For positive values of the coupling constant χ there is a local softening of the chain, while for χ negative there is a local hardening of the chain.

The last term in Eq. (3) describes the effects of charge-charge correlation. We will take it in the form

$$H_{cor} = \frac{1}{2} V \sum_{n} |\psi_n|^4 \tag{10}$$

where V characterizes the intensity of the charge-charge interaction

The interaction of the filament with an external field is included in the second term of the Hamiltonian (2)

$$H_f(t) = \sum_{l=1}^{L} \vec{r_l} \cdot \vec{F_l}(t)$$
 (11)

where the external forces taken here, $\vec{F}_l(t) = (X_l(t), Y_l(t))$, affect only to the molecular coordinates (x_l, y_l) .

The quantity

$$\nu \equiv \frac{1}{L} \sum_{l} |\psi_l|^2 \tag{12}$$

Effects of charge interactions and external fields

gives the total density of charge carriers which can move along the chain and participate in the formation of the conformational state of the system.

The dynamics of the filament is described by the Schrödinger equations

$$i\frac{d}{dt}\psi_l = -\frac{\partial H}{\partial \psi_l^*} \tag{13}$$

and the Newton equations

$$\alpha \, \frac{d}{dt} \vec{r_l} = -\frac{\partial H}{\partial \, \vec{r_l}} + \vec{F_l}(t). \tag{14}$$

with the Hamiltonian H being defined by Eqs. (2). Thus the conformational dynamics is considered in an overdamped regime with α being the friction coefficient.

To analyze the evolution of the shape of the filament, it is convenient to introduce the radius-of-gyration tensor I as in Ref. [22, 23]. Its components are

$$\mathbf{I}_{xx} = \frac{1}{L} \sum_{l} (x_{l}(t) - x^{c}(t))^{2}, \quad \mathbf{I}_{yy} = \frac{1}{L} \sum_{l} (y_{l}(t) - y^{c}(t))^{2},$$
$$\mathbf{I}_{xy} = \frac{1}{L} \sum_{l} (x_{l}(t) - x^{c}(t)) (y_{l}(t) - y^{c}(t)) \quad (15)$$

where

$$(x^{c}, y^{c}) = \frac{1}{L} \sum_{l} (x_{l}, y_{l})$$
(16)

is the center-of-mass coordinate. It is convenient to characterize the shape of the filament by introducing the quantity

$$A = \sqrt{\left(\mathbf{I}_{xx} - \mathbf{I}_{yy}\right)^2 + 4\,\mathbf{I}_{xy}^2},\tag{17}$$

defined as the "aspherity" [23], that measures the shape's overall deviation from circular symmetry which corresponds to A = 0.

3 Analytic approach

Let us assume that the characteristic size of the excitation is much larger than the lattice spacing and replace ψ_l and $\vec{r_l}$ by the functions $\psi(s,t)$ and $\vec{r}(s,t)$, respectively, of the arclength s which is the continuum analogue of l. We assume that the chain is inextensible and therefore $|\partial_s \vec{r}|^2 = 1$. This constraint can be automatically taken into account by choosing the parametrization

$$\partial_s x(s) = \sin \theta(s), \qquad \partial_s y(s) = \cos \theta(s),$$
(18)

where the angle $\theta(s)$ satisfies respectively the periodicity and closure conditions followed from Eq. (1),

$$\theta(s+L) = 2\pi \, n + \theta(s), \qquad n \in \mathbb{N},$$

$$(19)$$

$$\int_{0} \cos \theta(s) \, \mathrm{d}s = \int_{0} \sin \theta(s) \, \mathrm{d}s = 0.$$
(20)

In the continuum limit the curvature (5) takes the form

$$\kappa(s) = |\partial_s^2 \vec{r}(s)| \equiv \partial_s \theta.$$
⁽²¹⁾

The carrier dynamics of the system can be written in a gradient form as follows

$$\frac{\delta S}{\delta \psi} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\delta S}{\delta \psi^*} = 0$$
 (22)

where

$$S = \int_{0}^{\infty} \mathcal{L} \,\mathrm{d}t \tag{23}$$

is the action with

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} i \int_{0}^{L} (\psi^* \ \partial_t \psi - \psi \ \partial_t \psi^*) \ \mathrm{d}s - H_{tot}$$
(24)

being the Lagrangian of the system and $\delta/\delta(\cdot)$ is a variational derivative. By introducing the dissipation function

$$\mathcal{F} = \eta \frac{1}{2} \int_{0}^{L} \left(\partial_t \vec{r}\right)^2 \,\mathrm{d}s \tag{25}$$

the equation for the position $\vec{r}(s,t)$ can also be written in the variational form

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \partial_t \vec{r}(s,t)} = -\frac{\delta H_{tot}}{\delta \vec{r}(s,t)}.$$
(26)

In Eqs. (22) and (26) the total Hamiltonian of the system can be written as the sum

$$H_{tot} = H + H_f(t), \tag{27}$$

where

$$H = \int_{0}^{L} \left[J \left| \partial_{s} \psi \right|^{2} + \frac{1}{2} V \left| \psi \right|^{4} + \left(\frac{k}{2} - \chi \left| \psi^{2} \right| \right) \left(\partial_{s} \theta \right)^{2} \right] \mathrm{d}s$$
(28)

is the continuum version of the Hamiltonian (3) and

$$H_f(t) = \int_0^L \left(\vec{r}(s,t) \cdot \vec{F}(s,t) \right) \mathrm{d}s \tag{29}$$

gives the energy pumping to the system.

In the continuum limit the carrier wave amplitude ψ satisfies the periodicity conditions

$$\psi(s+L) = \psi(s). \tag{30}$$

We will consider separately the influence of charge-charge interaction effects and the effects of external driving. Effects of charge interactions and external fields

4 Charge-charge correlation effects

The aim of this section is to clarify how the interaction between carries influences the shape transformation of closed filaments.

In the no-driving case $(\vec{F}(s,t) = 0)$ we will carry out our analytical considerations by assuming that the relaxation time of the bending degrees of freedom is very short ($\alpha \ll 1$) and that the bending degrees of freedom adiabatically follow the charge variables. This means that one can neglect the time derivative in the left-hand-side of Eq. (26) and the equations of motion of the system have the form

$$i \partial_t \psi = -J \partial_s^2 \psi + V |\psi|^2 \psi - \chi (\partial_s \theta)^2 \psi, \qquad (31)$$

and

$$\partial_s \left[\partial_s \theta \left(1 - \frac{2\chi}{k} \mid \psi \mid^2 \right) \right] = 0.$$
(32)

By integrating Eq. (32) once and taking into account the periodicity condition (19), we obtain

$$\partial_s \theta = \frac{2\pi}{L} \mathcal{I} \left(1 - \frac{2\chi}{k} \mid \psi \mid^2 \right)^{-1}$$
(33)

where the functional ${\mathcal I}$ is given by

$$\mathcal{I} = \frac{1}{L} \int_{0}^{L} \left(1 - \frac{2\chi}{k} |\psi|^{2} \right)^{-1} \mathrm{d}s.$$
 (34)

Inserting Eq. (33) into Eq. (31) we obtain

$$i\partial_t \psi = -J\partial_s^2 \psi + V \mid \psi \mid^2 \psi - \frac{\chi}{R^2} \mathcal{I}^2 \left(1 - \frac{2\chi}{k} \mid \psi \mid^2\right)^{-2} \psi, \qquad (35)$$

where $R = 2\pi/L$ is the radius of the circle.

The wave function ψ satisfies the periodicity condition (30) and the normalization condition

$$\frac{1}{L} \int_{0}^{L} |\psi|^2 \, \mathrm{d}s = \nu, \tag{36}$$

where ν is the charge density on the filament.

The spatially homogeneous solution to this equation reads

$$\Psi(t) = \sqrt{\nu} \exp\left[-i\left(\nu V - \frac{\chi}{R^2}\right)t\right]$$
(37)

where the normalization condition (36) has been used. Inserting Eq. (37) into Eq. (33), we obtain that the curvature (21) is

$$\kappa(s) = \frac{1}{R} \tag{38}$$

and the filament is a circle with the radius R.

Next we proceed in the stability region of the spatially homogeneous solution (37). Taking

$$\psi(s,t) = \Psi(t) + \delta \,\psi(s,t) \,\exp\left[-i\left(\nu \,V - \frac{\chi}{R^2}\right)t\right],\tag{39}$$

where $\delta \psi$ is a small perturbation, and linearizing Eqs. (35) and (36) around $\Psi(t)$ yields

$$\partial_t z = \mathcal{H} z, \tag{40}$$

$$\frac{1}{L} \int_{0}^{L} \operatorname{Re}\left(\delta\psi(s,t)\right) \, \mathrm{d}s = 0 \tag{41}$$

In Eq. (40) z(s,t) is a two-component column comprising of the real and imaginary parts of the perturbation

$$z(s,t) = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(\delta\psi) \\ \operatorname{Im}(\delta\psi) \end{pmatrix}$$
(42)

and \mathcal{H} is a 2×2 matrix

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & -J \partial_s^2 \\ J \partial_s^2 - 2 \left(\nu V - \frac{4 \chi^2}{k R^2} \nu \left(1 - \frac{2 \chi}{k} \nu \right)^{-1} \right) & 0 \end{pmatrix}.$$
(43)

The stability is analyzed by considering solutions of Eq. (40) of the form

$$z(s,t) = Z \exp\left(i\frac{2\pi}{L}js + i\,p\,t\right), \qquad j = 1, 2, \dots, L-1,$$
 (44)

where p is a complex frequency and Z is a constant vector. Note that to satisfy the condition (41) the wave vector with j = 0 was excluded from the Ansatz (44). Insertion of Eq. (44) into Eq. (40) leads to

$$p^{2} = J \frac{j^{2}}{R^{2}} \left(J \frac{j^{2}}{R^{2}} + \nu V - \frac{4 \chi^{2}}{k R^{2}} \nu \left(1 - \frac{2 \chi}{k} \nu \right)^{-1} \right).$$
(45)

For

$$\nu V - \frac{4\chi^2}{kR^2} \nu \left(1 - \frac{2\chi}{k}\nu\right)^{-1} > 0$$
(46)

the frequency p is real for all j. In this case the spatially homogeneous charge distribution and the circular shape of the filament are stable. For the opposite inequality the state (37) is unstable with respect to the linear modes (44) with j satisfying the inequality

$$J\frac{j^2}{R^2} + \nu V - \frac{4\chi^2}{kR^2}\nu \left(1 - \frac{2\chi}{k}\nu\right)^{-1} < 0.$$
(47)

Effects of charge interactions and external fields

As the strength of the charge-curvature interaction χ increases, the linear mode (44) with j = 1 is the first to becomes unstable. The further increasing of the strength of the charge-curvature interaction leads to instability of the spatially homogeneous state with respect to the modes (44) with $j \ge 2$. It is seen from Eq. (46) that the attractive charge-charge interaction (V < 0) facilitates creation of spatially inhomogeneous states while the sufficiently strong repulsive interaction makes the spatially homogeneous state more stable.

Let us now study the explicit stationary form of the charge distribution along the filament and the shape of the filament. In the absence of the interaction between carriers, V = 0, this problem was investigated in Ref. [19] where the ground state of the filament was studied in the limit of weak charge-curvature interaction and small charge density. Eq. (35) can be written in the gradient form as follows

$$i\,\partial_t\psi = \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta\psi^*}\tag{48}$$

where

$$\mathcal{E} = \int_{0}^{L} \left(J \mid \partial_{s}\psi \mid^{2} + \frac{1}{2}V \mid \psi \mid^{4} \right) + \frac{2k\pi^{2}}{L}\mathcal{I}$$

$$\tag{49}$$

is an effective energy functional. We restrict our analytical consideration to the case when the charge-curvature coupling is weak and/or the charge density is low: $f \equiv 2\chi\nu/k \ll 1$. Expanding the functional \mathcal{I} in terms of the small parameter w we obtain from Eq. (49)

$$\mathcal{E} = \frac{2\pi^2 k}{L(1+f)} + \int_0^L \left[J \mid \partial_s \psi \mid^2 + \frac{1}{2} \left(V - \frac{4\chi^2}{kR^2} \right) \mid \psi \mid^4 \right] \,\mathrm{d}s \tag{50}$$

We consider the stationary solution of Eqs. (48), (50) in the form

$$\psi(s,t) = e^{i\Omega t} \,\varphi(s) \tag{51}$$

where $\varphi(s)$ is a shape function (φ is real) and Ω is a nonlinear eigenfrequency. The shape function satisfies the equation

$$J \partial_s \varphi - \left(V - \frac{4\chi^2}{kR^2}\right) \varphi^3 - \Omega \varphi = 0$$
(52)

We are interested here in the case when the homogeneous state (37) of the system is linearly unstable and therefore will assume that the nonlinear parameter

$$g = \frac{1}{J} \left(\frac{4\chi^2}{k R^2} - V \right) > 0.$$
 (53)

Eq. (52) coincides with Eq. (39) of Ref. [19]. Based on the results of [19], one can obtain that the charge distribution along the filament is given by

$$\varphi = \sqrt{\frac{\mathbf{K}}{\mathbf{E}}} \, dn \left(\frac{2 \, j \, \mathbf{K}}{L} \, s \Big| m \right) \tag{54}$$

where dn(u|m) is the Jacobi elliptic function with the modulus m and $\mathbf{K}(m)$ and $\mathbf{E}(m)$ are the complete elliptic integrals of the first kind and the second kind, respectively [24]. The nonlinear frequency Ω and the modulus m we obtain from the normalization condition (36) and the periodicity condition (30). They are determined by the relations

$$\Omega = (2 - m) \frac{j^2 \mathbf{K}^2}{\pi^2} \frac{J}{R^2},$$

$$\left(\frac{4\chi^2}{kR^2} - V\right) \nu = 2 \frac{j^2 \mathbf{K} \mathbf{E}}{\pi^2} \frac{J}{R^2}.$$
(55)

where j is an integer. The shape of the filament is determined by the relations

$$x(s) = \int_{0}^{s} \cos\left(\theta(s')\right) \mathrm{d}s', \quad y(s) = \int_{L/4}^{s} \sin\left(\theta(s')\right) \mathrm{d}s'.$$
 (56)

The angle $\theta(s)$ can be presented as a Fourier series in the following way

$$\theta = \frac{2\pi}{L}s + \frac{\pi^2 f}{j\mathbf{K}\mathbf{E}} \left[\frac{\sin\left(\frac{2\pi}{L}js\right)}{\sinh\left(\frac{\pi\mathbf{K}'}{\mathbf{K}}\right)} + \frac{\sin\left(\frac{4\pi}{L}js\right)}{2\sinh\left(\frac{2\pi\mathbf{K}'}{\mathbf{K}}\right)} + \dots \right].$$
 (57)

Inserting Eq. (57) into the closure condition (20), we find that it is satisfied for $j \ge 2$. Eqs. (56) and (57) describe a polygon: for j = 2 it is an elliptically deformed chain, while for j = 3 it has a triangular shape, etc (see Fig. (1)).

4.1 Numerical studies

To verify our results we have performed also several numerical studies. To this end we carried out the dynamical simulations of the equations

$$\alpha \frac{d}{dt} \vec{r}_n = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_n},\tag{58}$$

$$i\frac{d}{dt}\psi_n = -\frac{\partial H}{\partial \psi_n^*} \tag{59}$$

with the Hamiltonian H being defined by Eqs. (3)-(10). As our starting configurations systems involving the electric charge density of (almost) the same magnitude (ψ_n) at all points (we broke the symmetry by increasing the density at one point of the chain by 1%). Initially, all the lattice points were placed at symmetric points on the circle of an appropriate radius. We considered both the cases repulsive and attractive charge-charge interaction. The results obtained for the set of parameters J = 0.25, $\chi = -4.4$, $\nu = 0.1$, k = 1 and $\kappa_{max} = 1$ are presented in Fig. 2 and Fig. 3.

It is seen that a weak repulsive interaction does not change qualitatively the shape and the charge distribution along the filament. However, in the presence of attractive interaction the shape and charge distribution change drastically.



Figure 1: The shape of the filament: in the ellipse-like state (j = 2) and in the polygon states (j = 3, 4, 5).



Figure 2: The case of repulsive charge-charge interaction. (a) the shape of the filament at the stationary state for V = 0.05 (doted line) and for V = 0 (solid line). (b) the stationary charge distribution (dashed line) and the curvature variation (solid line) along the filament for V = 0.05. (c) the filament aspherity A: solid line for V = 0.05, dashed line V = 0.



Figure 3: The case of attractive charge-charge interaction. (a) the shape of the filament at the stationary state for V = -0.14 (doted line) and for V = 0 (solid line). (b) the stationary charge distribution (dashed line) and the curvature variation (solid line) along the filament for V = -0.14. (c) the filament aspherity A: solid line for V = -0.14, dashed line V = 0.

5 Effects of external driving

The aim of this section is to study the effects of external driving on the shape transformations. To this end we use the external force $\vec{F}(s,t)$ in the form

$$\vec{F}(s,t) = \left(f_x \cos\left(\frac{2\pi}{L}j\,s - \omega t\right), \, f_y \sin\left(\frac{2\pi}{L}j\,s - \omega t\right)\right) \tag{60}$$

where f_x , f_y are the amplitudes, ω is the frequency and the index $j\mathbb{N}$ characterizes the spatial variation of the force. To gain some understanding of how the external field influences the process of the shape transformation we use the collective coordinate approach developed in Ref. [20]. By using the Madelung representation for the complex amplitude $\psi(s, t)$:

$$\psi(s,t) = \sqrt{\rho(s,t)} e^{i\phi(s,t)} \tag{61}$$

where $\rho(s,t)$ is the charge density and $\psi(s,t)$ is the phase, the Ansatz for the curvature of the filament $\kappa(s,t)$ and the charge variables $\rho(s,t)$ and $\phi(s,t)$ is taken in the form

$$\kappa(s,t) = \frac{2\pi}{L} \left[1 + c(t) \cos\left(\frac{4\pi s}{L}\right) \right],\tag{62}$$

$$\rho(s,t) = \nu \left[1 + \zeta(t) \cos\left(\frac{4\pi s}{L}\right) \right], \tag{63}$$

$$\phi(s,t) = \Phi(t) \cos\left(\frac{4\pi s}{L}\right) \tag{64}$$

The case when c = 0, $\zeta = 0$ corresponds to a uniformly distributed charge along the circular filament. A finite value of the curvature parameter c means that Effects of charge interactions and external fields

the filament is elliptically deformed. The measure of deformation is given the aspherity (17) which in the frame of the Ansatz (62) has the form

$$A(t) = \frac{L^2}{8\,\pi^2}\,c(t) \tag{65}$$

Inserting the Ansatz (62) into Eqs. (24), (27) and (60), we get

$$\mathcal{L}_{eff} = -\frac{L}{2} \nu \zeta \, \frac{d\Phi}{dt} - \mathcal{H}_{tot},\tag{66}$$

where the effective Hamiltonian \mathcal{H}_{tot} can be represented as a sum

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H} + \mathcal{H}_f(t) , \qquad (67)$$

$$\mathcal{H} = \frac{\pi^2}{L} \left(-4J\nu\sqrt{1-\zeta^2} + 8J\nu\Phi^2 + k_e c^2 - 4\chi\nu\zeta c \right) , \qquad (68)$$

$$\mathcal{H}_f(t) = \frac{L^2}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \left[f_x \sin(\omega t) \cos\left(s - \frac{c}{2}\sin\left(2s\right)\right) + f_y \cos(\omega t) \cos\left(s + \frac{c}{2}\sin\left(2s\right)\right) \right] \cos(js) \,\mathrm{d}s \tag{69}$$

where $k_e = k - 2\chi\nu$ is an effective bending elasticity constant. Note that for the sake of simplicity in this section we neglect the charge-charge interaction, V = 0.

In the limit of small shape deviations (|c| < 1) the interaction (69) can be represented in an approximate form

$$\mathcal{H}_f(t) = \frac{L^2}{16\pi} \left(\delta_{j\,1} - \delta_{j\,3} \right) \left(f_x \, \sin(\omega t) - f_y \, \cos(\omega t) \right) \, c(t) + \mathcal{O}(c^2) \tag{70}$$

where δ_{ij} is the Kronecker delta. In the same limit the effective dissipative function is written [20] as

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} b \left(\frac{dc}{dt}\right)^2,\tag{71}$$

where

$$b = \frac{5\alpha L^3}{188\pi^2} \tag{72}$$

is an effective damping coefficient. Thus in the linear approximation with respect to the curvature parameter c only forces (60) with j = 1 and j = 3contribute to the shape transformation dynamics. For the sake of definiteness we will assume that j = 1, $f_x = 0$, $f_y = f$. In this case we obtain from Eqs. (22), (26), (66)-(71) that the equations of motion for the quantities Φ , ζ and cread

$$\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{8\pi^2}{L^2} \left(J \frac{\zeta}{\sqrt{1-\zeta^2}} - \chi c \right),\tag{73}$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{32\pi^2}{L^2} J\Phi,\tag{74}$$

$$b\frac{dc}{dt} = -\frac{2\pi^2}{L}\left(k_e c - 2\chi\nu\zeta\right) + \frac{\pi^2}{2L}f\cos(\omega t) \tag{75}$$

Assuming that initially the filament is a circle: c(0) = 0, we obtain that the solution of Eq. (75) has the form

$$c(t) = B \cos(\omega t + \varphi) + \frac{4\pi^2 \chi \nu}{b L} \int_0^t dt_1 \zeta(t_1) \exp\{-\frac{2\pi^2}{b L} (t - t_1)\} -B \cos \varphi \exp\{-\frac{2\pi^2}{b L} t\}$$
(76)

where the amplitude of the forced oscillations B and their phase φ are given by

$$B = \frac{\pi^2}{2L} \left(b^2 \,\omega^2 + \frac{4 \,\pi^4 \,k_e^2}{L^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \qquad \text{and} \qquad \tan \varphi = -\frac{b \,L \,\omega}{2\pi^2}. \tag{77}$$

In the case of short relaxation time of bending degrees of freedom $b \ll 1$ one can obtain from Eq. (76) that

$$c(t) = B \cos(\omega t + \varphi) + \frac{2\chi\nu}{k_e} \left(\zeta - \frac{bL}{2\pi^2 k_e} \frac{d\zeta}{dt}\right) + \mathcal{O}\left(\exp\{-\frac{2\pi^2}{bL}t\}\right).$$
(78)

Inserting Eq. (78) into Eq. (74) and neglecting exponentially small terms we obtain an equation for ζ in the form of a driven and damped nonlinear oscillator

$$\frac{d^2\zeta}{dt^2} + \gamma \,\frac{d\zeta}{dt} = -\frac{\partial}{\partial\zeta} \,U - \chi B\,\cos(\omega t + \varphi) \tag{79}$$

where

$$U = -\left(\frac{4\pi}{L}\right)^4 J^2 \left(\sqrt{1-\zeta^2} + \frac{1}{2}\xi\zeta^2\right)$$
(80)

is a potential energy with the parameter

$$\xi = \frac{2\chi^2 \nu}{J k_e} \tag{81}$$

playing the rule of the ratio of the deformation energy (i.e. the energy shift due to the charge-bending interaction) with respect to the dispersion energy [20] and

$$\gamma = \left(\frac{4\pi}{L}\right)^3 \frac{2\,b\,\xi}{\pi\,k_e}$$

is a damping coefficient. In the no-driving case the minima of the potential U determine the stationary shape of the filament and the charge distribution along the filament. When $\xi < 1$ the potential U has a single minimum at $\zeta = 0$ (see Fig.4) and this corresponds to a spatially uniformly distributed charge and circular shape of the filament. For $\xi > 1$ the potential has a double-well profile (see Fig.4). This case corresponds to an elliptically deformed filament and spatially inhomogeneous charge distribution [20].



Figure 4: Effective potential of the collective coordinate approach for the case of weak ($\xi = 0.9$, dashed line) and strong ($\xi = 1.3$, solid line) charge-curvature interaction.

Expanding U into a Taylor series with respect to ζ we obtain that Eq. (79) takes the form of the damped Duffing equation

$$\frac{d^2\zeta}{dt^2} + \gamma \frac{d\zeta}{dt} + \left(\frac{4\pi}{L}\right)^4 J^2 \left(\left(1-\xi\right)\zeta + \frac{1}{2}\zeta^3 \right) = -\chi B \cos(\omega t + \varphi) \tag{82}$$

which exhibits multiple periodic solutions, quasiperiodic orbits, and chaos [25]. Qualitatively the same behavior can be expected from the solutions of the set of equations (73)-(75). A typical example of temporal behavior of the aspherity (65) obtained from the collective coordinate equations (73)-(75) in the case of no-driving, weak and strong external forces is presented in Fig. 5. As it seen from Fig. 5 while the weak external force does not change significantly the dynamics of the system the strong force makes it highly irregular.

5.1 Numerical studies

To verify these results we carried out numerical simulations of Eqs. (13), (14) and (60) with j = 1. Like in the previous section as an initial condition we took a uniformly charge distributed along the circular filament. We performed such simulations for the following set of parameters J = 0.25, $\nu = 0.1$, k = 1, $\chi = -4.4$, $\omega = 1$ and $\kappa_{max} = 3$. The results of these simulations for two values of the force amplitude are presented in Figs. 6 and 7.

It is seen that in full agreement with the results of collective coordinate approach the dynamics of the system depends on the strength of the external field. When the intensity of field increases the behavior of the system changes from almost regular to a highly irregular.



Figure 5: Temporal behavior of the aspherity obtained in the frame of collective coordinate approach in the no-driving case (f = 0, upper panel), and in the cases of weak (f = 0.05, middle panel) and strong (f = 0.5, lower panel) driving. Other parameters are b = 0.25, J = 0.5, $\chi = -1.3$, $\nu = 0.3$.



Figure 6: The case of weak external field: $f_x = -f_y = 0.4$. The left panel shows the shape of the filament, the right panel (b) shows the charge distribution (dashed line) and the curvature variation (solid line) along the filament at the time moment t = 3000, the right panel (c) shows the filament aspherity A.



Figure 7: The case of strong external field: $f_x = -f_y = 1$. The left panel shows the shape of the filament for three time moments, the upper right panel (b) shows the charge distribution (dashed line) and the curvature variation (solid line) along the filament at the time moment t = 950, the lower right panel (c) shows the filament aspherity A.

6 Discussion and conclusions

In this paper, we have investigated the role of charge-charge interactions in the charge-curvature induced conformational transformations of closed semiflexible filaments. We have found that there is a threshold value of the intensity of the repulsive interaction above which the circular shape and the spatially homogeneous charge distribution is always stable. The attractive charge-charge interaction facilitates transformations from the circular shape to a polygonal one.

We also studied the role external fields on the shape transformations. We investigated the case when the external field is a time and space periodic and found out that in the case of weak external field the dynamics of the shape transformation is essentially the same as in the no-driving case. However, strong external fields influence the dynamics drastically: the filament evolves highly irregularly without reaching any stationary shape.

Acknowledgments

Yu.B.G. and C. G. thank DTU Mathematics for hospitality. They also acknowledge the financial support from the Spanish Ministerio de Educación y Ciencia (grant MTM2007-62186) and the Departamento de Educación, Universidades e Investigación of the Basque Government (grant IT-305-07 for research groups). Yu.B.G. thanks the University of Bilbao for hospitality. Yu. B. G. acknowledges also support from the Special Program of Department of Physics and Astronomy of the National Academy of Sciences of Ukraine and Emil-Warburg-Stiftung. Finally this work received funding from the Danish Center for Applied Mathematics and Mechanics (DCAMM), International Graduate Research School, contract number 646-06-004, and the Mathematical Network in Modelling, Estimation and Control of Biotechnological Systems (MECOBS), Contract No. 274-05-0589, of the Danish Research Agency for Technology and Production.

References

- D. Viduna, K. Hinsen, and G. Kneller. Influence of molecular flexibility on dna radiosensitivity: a simulation study. *Phys. Rev. E*, 62:3986–3990, 2000.
- [2] J. Feitelson and G. McLendon. Migration of small molecules through the structure of hemoglobin: evidence for gating in a protein electron-transfer reaction. *Biochemistry*, 30:5051–5055, 1991.
- [3] T.J. Richmon and C.A. Davey. The structure of dna in the nucleosome core. Nature (London), 423:145–150, 2003.
- [4] T.E. Cloutier and J. Widom. Spontaneous sharp bending of doublestranded dna. Mol. Cell., 14:355–362, 2004.

- [5] Q. Du, C. Smith, N. Shiffeldrim, M. Vologodskaia, and A. Vologodskii. Cyclization of short dna fragments and bending fluctuations of the double helix. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 102:5397–5402, 2005.
- [6] C. Yuan, H. Chen, X.W. Lou, and L.A. Archer. Dna bending stiffness on small length scales. *Phys. Rev. Lett.*, 100:018102(1–4), 2008.
- [7] J. Yan and J.F. Marko. Localized single-stranded bubble mechanism for cyclization of short double helix dna. *Phys. Rev. Lett.*, 93:108108(1–4), 2004.
- [8] P.A. Wiggins, R. Philips, and P.C. Nelson. Exact theory of kinkable elastic polymers. *Phys. Rev. E*, 71:021909(1–19), 2005.
- [9] N. Diamant and D. Andelman. Binding of molecules to dna and other semiflexible polymers. *Phys. Rev. E*, 61:6740–9, 2000.
- [10] H. Kang, H. Liu, J. A. Philips, Z. Cao, Y. Kim, Y. Chen, Z. Yang, J. Li, and W. Ten. Single-dna molecule nanomotor regulated by photons. *Nano Lett.*, 2009.
- [11] E. Haleva and N. Diamant. Swelling of two-dimensional polymer rings by trapped particles. *Eur. Phys. J. E*, 21:33–40, 2006.
- [12] M. Winterhalter and W. Helfrich. Effect of surface charge on the curvature elasticity of membranes. J. Phys. Chem., 92:6865–6867, 1988.
- [13] G.D. Guttman and D. Andelman. Electrostatic interactions in twocomponent membranes. J. Phys. II (Fr.), 3:1411–1425, 1993.
- [14] A.W.C. Lau and P. Pincus. Charge-fluctuation-induced nonanalytic bending rigidity. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1338–1341, 1998.
- [15] T.T. Nguyen, I. Rouzina, and B.I. Shklovskii. Negative electrostatic contribution to the bending rigidity of charged membranes and polyelectrolytes screened by multivalent counterions. *Phys. Rev. E*, 60:7032–7939, 1999.
- [16] D. Pastré, O. Pietrement, F. Landousy, I. Sorel L. Hamon, M-O. David, E. Delain, A. Zozime, and E. Le Cam. A new approach to dna bending by polyamines and its implication in dna condensation. *Eur. Biophys. J.*, 35:214–223, 2006.
- [17] M. Todorokihara, Y. Iwata, and H. Naito. Periodic buckling of smectic-a tubular filaments in an isotropic phase. *Phys. Rev. E*, 70:021701–021707, 2004.
- [18] H. Naito, M. Okudaand, and Ou-Yang Zhong-can. Polygonal shape transformation of a circular biconcave vesicle induced by osmotic pressure. *Phys. Rev. E*, 54:2816–2826, 1996.

- [19] Yu.B. Gaididei, P.L. Christiansen, and W.J. Zakrzewski. Conformational transformations induced by the charge-curvature interaction: Mean-field approach. *Phys. Rev. E*, 74:021914(1–13), 2006.
- [20] Yu.B. Gaididei, C. Gorria, P.L. Christiansen, and M.P. Sørensen. Conformational transformations induced by the charge-curvature interaction at finite temperature. *Phys. Rev. E*, 79:051908(1–10), 2008.
- [21] Yu.B. Gaididei, C. Gorria, and P.L. Christiansen. Langevin dynamics of conformational transformations induced by the charge-curvature interaction. J. Biol. Phys., 35:103–113, 2009.
- [22] K. Solc. Shape of a random-flight chain. J. Chem. Phys., 55:335–344, 1971.
- [23] J. Rudnick and G. Gaspari. The aspherity of random walks. J. Phys. A Math. Gen., 19:L191–L193, 1986.
- [24] M. Abramowitz and I. Stegun. Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications, Inc., New York, 1972.
- [25] E.Ott. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.

UNA EXPOSICIÓN DE LOS ÚLTIMOS RÉCORDS PARA PRIMOS GEMELOS Y SEGUROS

R. DURÁN DÍAZ*, L. HERNÁNDEZ ENCINAS† Y J. MUÑOZ MASQUɆ

*Departamento de Automática, Universidad de Alcalá 28871-Alcalá de Henares, España
†Departamento Tratamiento de la Información y Codificación Instituto de Física Aplicada, CSIC
C/ Serrano 144, 28006-Madrid, España

raul.duran@uah.es, {luis, jaime}@iec.csic.es

Resumen

Se estudian y explican los últimos récords obtenidos en la búsqueda de primos gemelos y 1-seguros. Estos resultados son de especial interés en Criptografía de clave pública, dado que, por una parte, no se sabe en la actualidad si existen infinitos primos de cada una de estas clases, pero, por otra, es necesario incrementar su tamaño constantemente por razones de seguridad.

Palabras clave: Primos de Sophie Germain, Primos k-seguros, Primos gemelos, Densidades de primos especiales.

Clasificación por materias AMS: 11A41, 11N05, 11Y11

1 Introducción

El interés por los números primos nunca ha cesado como puede colegirse del número de publicaciones sobre el tema. Se pueden aducir innumerables citas: resultados modernos de fuerte impacto, como [23]; recientes informes que repasan los logros de los últimos años en este campo, como [21], [22]; o resultados con vetas innovadoras, como, por ejemplo [28] y [29]. Además, el uso que de ellos hacen actualmente algunos sistemas criptográficos populares ha incentivado todavía más el interés. En algunos casos porque parece que ciertas clases de primos considerados especiales, muestran más resistencia a

Fecha de recepción: 30/07/09. Aceptado (en forma revisada): 28/09/09.

Trabajo parcialmente subvencionado por el Ministerio de Industria, Turismo y Comercio, en colaboración con CDTI y Telefónica I+D bajo el proyecto SEGUR[®] (CENIT-2007 2004). Los autores agradecen al revisor anónimo sus sugerencias y comentarios, que han ayudado a actualizar algunos datos incluidos en este artículo.

los ataques de los criptoanalistas (véase la sección 2.1); en otros casos, el simple —e importante— interés investigador ha mantenido encendida la llama por la búsqueda de nuevos récords de primos especiales.

En este trabajo describimos algunos tipos de primos de los considerados especiales y proporcionamos algunos resultados conocidos y otros conjeturados, acerca de sus funciones recuento, lo que da una idea de su abundancia relativa bien en el conjunto de los enteros, bien dentro del conjunto de los primos ordinarios.

Finalmente presentamos algunos de los resultados más recientes en cuanto a récords obtenidos para los primos de las diversas clases consideradas.

2 Primos especiales

En lo que sigue, vamos a recordar varias familias de primos caracterizadas por alguna propiedad especial. En todos los casos denotaremos por \mathbb{P} el conjunto de los números primos.

2.1 Primos 1-seguros y primos de Sophie Germain

Un número primo p se dice que es 1-seguro si se escribe como $p = 2p_1 + 1$, siendo p_1 otro número primo. Denotaremos el conjunto de los números primos 1-seguros por \mathbb{P}_1 . Por ejemplo, 7, 11, 23 son 1-seguros; en cambio, 17, 19, 29 no son 1-seguros. Este concepto está inmediatamente relacionado con el de primos de Sophie Germain, que esta autora introdujo alrededor de 1825 en sus trabajos sobre «el primer caso del último teorema de Fermat» (véase por ejemplo [34, 2.VII p. 66], [44]). Un primo q se dice que es de Sophie Germain si 2q + 1es primo. Por ejemplo, 7 es un primo 1-seguro que no es de Sophie Germain, mientras que, como se ha dicho, 29 no es 1-seguro pero sí es un primo de Sophie Germain. A su vez, 11 es tanto un primo 1-seguro como un primo de Sophie Germain. El teorema de Sophie Germain establece que si p es un primo de Sophie Germain entonces no existen enteros x, y, z no nulos y no múltiplos de p tales que $x^p + y^p = z^p$.

Los primos 1-seguros aparecen como consecuencia del criptoanálisis de los factores $p \ y \ q$ de un módulo del criptosistema de clave pública RSA (cf. [7], [16], [37], [39]), $n = p \cdot q$, con exponentes de cifrado y descifrado $e \ y \ d$, respectivamente. En particular, para prevenir los ataques por factorización de n, las primeras propiedades que se requieren a estos factores (véase [32], [39]) son las siguientes:

(i) mcd(p-1, q-1) debe ser "pequeño". En efecto, si mcd(p-1, q-1) fuera grande, se tendría que:

$$u = mcm(p-1, q-1) = \frac{\phi(n)}{mcd(p-1, q-1)}$$

sería pequeño en comparación con el indicador de Euler, $\phi(n)$. Ahora bien, cualquier inverso de *e* módulo *u*, *d'*, tal que $e \cdot d' \equiv 1 \mod u$ sirve como

exponente de descifrado; esto es, se verifica:

$$m^{ed'} \equiv 1 \mod n$$

para todo mensaje m. Entonces, si u es pequeño, esta propiedad se aprovecha para romper el criptosistema llevando a cabo los siguientes pasos:

- (a) Elegir un valor para u y calcular el inverso d' de e módulo u.
- (b) Cifrar varios mensajes sucesivos con el criptosistema y tratar de descifrarlos usando el exponente d'.
- (c) Si en alguno de los ensayos del punto b) se tiene éxito, el sistema queda roto. En caso contrario, se repite el paso a).

Si u es realmente pequeño en comparación con $\phi(n)$ el éxito de los pasos anteriores puede alcanzarse con relativa eficacia computacional.

(ii) p-1 y q-1 deben contener un factor primo "grande". En otro caso, se tendría que los factores de $\phi(n) = (p-1)(q-1)$ también serían pequeños. En esta situación, si todos los factores de $\phi(n)$ son menores que una cota, es posible construir todos los posibles candidatos v a ser $\phi(n)$ y entonces probar si el mensaje cifrado elevado a la potencia (v+1)/e, supuesto que sea un número entero, proporciona un mensaje legible.

Por otra parte, J.M. Pollard publicó en [32] un método de factorización formalizando una serie de reglas que eran conocidas desde antiguo. La idea es utilizar la información relativa al orden de algún elemento a del grupo \mathbb{Z}_n^* para deducir propiedades sobre los factores de n. En efecto, por el teorema de Fermat, sabemos que si p es un primo y mcd(a, p) = 1, entonces $a^{p-1} \equiv 1 \mod p$. Con esto, si Q es un entero tal que p - 1|Q, entonces $p|a^Q - 1$, puesto que $a^Q \equiv 1 \mod p$. Por lo tanto, si coincide que alguno de los p es un factor de n, resulta que p divide a $mcd(a^Q - 1, n)$, luego basta comprobar si $mcd(a^Q - 1, n) \neq 1$ y $mcd(a^Q - 1, n) \neq n$.

La idea consiste en elegir números Q con muchos divisores de la forma p-1, con p cualquier primo, y así buscar factores de n en un solo golpe de entre los diversos primos con los que se ha construido el número Q.

El método de Pollard resulta especialmente interesante si da la casualidad de que todos los factores de p-1, donde p es uno de los factores de n, son menores que una cierta cota M. Entonces es sencillo construir números Q que sean productos de esos primos "pequeños" y calcular $mcd(a^Q - 1, n)$. El problema original queda así convertido en el problema de generar múltiplos de todos los enteros que contengan divisores pequeños.

Estas condiciones se satisfacen óptimamente si $p \ge q$ son primos 1-seguros. En efecto, si $p = 2p_1 + 1$, $q = 2q_1 + 1$, siendo p_1,q_1 primos, entonces $mcd(p-1,q-1) = mcd(2p_1,2q_1) = 2$, que es el mínimo valor posible ya que $p-1 \ge q-1$ son pares. Análogamente, p-1 (resp. q-1) contiene el factor primo más grande posible cuando es 1-seguro. Queda claro, pues, que es muy recomendable utilizar este tipo de primos como factores para el módulo de RSA, al tiempo que aparece la razón de la terminología empleada: este tipo de primos son "más seguros" frente a los ataques por factorización.

Los primos de Sophie Germain son también importantes para determinar números de Mersenne que no son primos. En efecto, si p es un primo de Sophie Germain, entonces 2^p-1 es divisible por 2p+1; por ejemplo, $2^{3539}-1$ es divisible por 7079. Tienen también otras aplicaciones al estudio de los *repunits*, que son los números cuya expresión en base 10 está formada por n unos, de modo que su valor es $(10^n - 1)/9$.

2.2 Primos k-seguros

La noción de primo 1-seguro se puede extender fácilmente a primos k-seguros. Un número primo impar p se dice que es k veces seguro (o que es un primo k-seguro) si existen k números primos impares p_1, \ldots, p_k tales que $p = 2p_1 + \varepsilon$, $p_1 = 2p_2 + \varepsilon, \ldots, p_{k-1} = 2p_k + \varepsilon$, con $\varepsilon \in \{+1, -1\}$. Al conjunto de primos k-seguros con $\varepsilon = +1$ lo denominamos \mathbb{P}_k^+ y al conjunto de primos k-seguros con $\varepsilon = -1$ los denotamos \mathbb{P}_k^- .

La noción de primos k-seguros se relaciona inmediatamente con las llamadas cadenas de Cunningham. Una cadena de Cunningham (véase por ejemplo [24, A7], [42]) es una sucesión de $k \ge 2$ primos p_1, \ldots, p_k tales que $p_{i+1} = 2p_i + \varepsilon$, $i = 1, \ldots, k - 1, \varepsilon \in \{-1, +1\}$ (cuando $\varepsilon = +1$ se denominan cadenas de Cunningham de primera clase y cuando $\varepsilon = -1$, de segunda clase). Nótese que si k = 2, entonces una cadena de Cunningham de longitud 2 no es más que un par (q, 2q + 1), donde q es un primo de Sophie Germain. En [19] se da cuenta de una cadena de Cunningham de segunda clase con 16 elementos, cuyo primer primo es 3203000719597029781. El récord actual es una cadena de 17 elementos obtenida por Jarosław Wróblewski en mayo de 2008, tal como se recoge en la página Cunningham Chain records (véase [3]).

2.3 Primos gemelos

Cuando $p \ge p+2$ son simultáneamente primos, decimos que son primos gemelos. Por ejemplo, los pares (3, 5), (5, 7), (11, 13), (17, 19), (41, 43) son primos gemelos. Existen algunas caracterizaciones, pero son de poco interés pues, en la práctica, no permiten determinar una pareja de primos gemelos.

La cuestión más interesante que se plantea es decidir acerca de la existencia de infinitos números primos gemelos.

3 Funciones recuento de primos

En las secciones sucesivas vamos a presentar los resultados conocidos — frecuentemente conjeturados— respecto a las funciones recuento de distintas clases de primos.

3.1 Recuento de primos ordinarios

Definición 1 Sea $\pi: [1, \infty) \to \mathbb{R}$ la función recuento

$$\pi(x) = \# \left\{ p \in \mathbb{P} : p \le x \right\},$$

esto es, $\pi(x)$ es el número de primos que no exceden el valor x.

Para el caso de los primos ordinarios, existe una serie de resultados bien conocidos. Ya en 1896, los analistas Hadamard y La Vallée-Poussin demostraron, cada uno independientemente del otro (véanse, por ejemplo, [13, §1.1.5], [34]), el llamado teorema de los números primos, que afirma:

$$\lim_{x \to \infty} \frac{\ln x}{x} \pi(x) = 1.$$
(1)

Con ello, se puede establecer que, aproximadamente, la función recuento de números primos es:

$$\pi(x) \sim \frac{x}{\ln x},\tag{2}$$

donde $f \sim g$ si y sólo si: $\lim_{x \to \infty} f(x)/g(x) = 1$.

Una aproximación aún mejor había sido ya conjeturada por Gauss, con la siguiente fórmula:

$$\pi(x) \sim \operatorname{Li}(x) = \int_{2}^{x} \frac{1}{\ln t} \mathrm{d}t.$$
 (3)

De hecho, es fácil ver que la integral de Gauss se puede aproximar por el resultado de la fórmula (2). Vamos a presentar un argumento estadístico aproximado que permite justificar la fórmula (3) (véase [40]) a partir del teorema de los números primos (1) con ayuda del llamado *segundo teorema de Mertens* (véase, por ejemplo, [41, p. 21]), que éste demostró en 1874.

En primer lugar, observemos que la probabilidad de que un número entero cualquiera x sea divisible por p es obviamente 1/p, pues cada p-ésimo número entero es divisible por p. Por lo tanto la probabilidad de que x no sea divisible por p será 1-1/p. Por definición, un número cualquiera x es primo si y sólo si no es divisible por ninguno de los números primos menores que su raíz cuadrada. En otras palabras, x es primo si para todo número primo $p_i \leq \sqrt{x}$, se cumple que p_i no divide a x. Así pues, si suponemos que los sucesos "ser divisible por p_i " para todos los $p_i \leq \sqrt{x}$ son estadísticamente independientes, podremos decir que, en primera aproximación, la probabilidad de que un entero cualquiera x sea primo viene dada por:

$$\prod_{p \le \sqrt{x}} \left(1 - \frac{1}{p} \right), \quad p \in \mathbb{P}.$$
(4)

Sin embargo, para valores grandes de p, esta independencia no es del todo cierta. En efecto, el segundo teorema de Mertens demuestra que:

$$\prod_{p \le x} \left(1 - \frac{1}{p} \right) = \frac{e^{-\gamma}}{\ln x} + O(1), \qquad \forall x \ge 1,$$
(5)

donde γ representa la constante de Euler o de Mascheroni, que se define como:

$$\gamma = \lim_{n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} - \ln n \right) = 0,577215665\dots,$$

y hemos utilizado la notación asintótica O(1). Recordemos que g(n) = O(f(n))significa que existe un entero n_0 y una constante c > 0 tales que para $n > n_0$ se verifica que $g(n) \leq cf(n)$; por tanto, O(1) equivale a una constante.

Si en la ecuación (5) hacemos el cambio de variable $x \to \sqrt{x}$, podremos reescribirla como:

$$\prod_{p \le \sqrt{x}} \left(1 - \frac{1}{p} \right) = \frac{2 \cdot e^{-\gamma}}{\ln x} + O(1), \qquad \forall x \ge 1.$$

Reordenando términos y combinando con el teorema de los números primos, se puede afirmar que:

$$\frac{\pi(x)}{x} \sim \frac{1}{2} e^{\gamma} \prod_{p \le \sqrt{x}} \left(1 - \frac{1}{p} \right) \sim \frac{1}{\ln x}.$$

Este resultado nos impulsa a "corregir" el valor de la probabilidad obtenido en la ecuación (4), y denominarla W(x), asignándole el valor:

$$W(x) = \frac{1}{2}e^{\gamma} \prod_{p \le \sqrt{x}} \left(1 - \frac{1}{p}\right).$$
(6)

Más aún, como se dice en [36, p. 66]:

«La probabilidad de que un número entero grande x elegido al azar sea primo es $1/\ln x$. Por otro lado, el número x es primo si y solo si no es divisible por ninguno de los primos $\leq \sqrt{x}$. Por tanto, podría esperarse que

$$\prod_{2 \le p \le \sqrt{x}} \left(1 - \frac{1}{p} \right)$$

fuera aproximadamente igual a $1/\ln x$ para x suficientemente grande, lo cual está claramente en discrepancia con el teorema de Mertens. Esta discrepancia tiene que surgir del hecho de que existen sutilezas en la distribución de los primos hasta \sqrt{x} , que influyen en los primos en el entorno de x y de las que no puede dar cuenta el sencillo modelo estadístico utilizado, en el que se considera independiente la divisibilidad por distintos primos. O, dicho de otro modo, la criba de Eratóstenes es especial en el sentido de que criba los números de manera más eficiente que una criba 'aleatoria'. En efecto, cuando usamos la criba de Eratóstenes con todos los primos $p \leq \sqrt{x}$, el teorema de los números primos nos asegura que en un entorno de x quedarán $1/\ln x$ números sin cribar, mientras que usando la criba aleatoria, la fórmula de Mertens (5) nos dejaría la fracción $2e^{-\gamma}/\ln x \simeq 1,123/\ln x$ números sin cribar, que es un poco más alta.»

Lo anterior justifica que aceptemos la fórmula (6) como función densidad de probabilidad, de modo que podemos estimar el número de primos menores o iguales que x por la siguiente expresión:

$$\pi(x) \sim \int_2^x W(t) \mathrm{d}t \sim \int_2^x \frac{1}{\ln t} \mathrm{d}t,$$

con lo que hemos alcanzado nuestro objetivo de justificar la fórmula de Gauss a partir del teorema de los números primos. Véanse, al respecto, [17], [18].

3.2 Recuento de primos gemelos

En el caso de los primos gemelos, podemos definir también la función recuento, $\pi_g(x)$, como el número de primos p tales que $p \ge p+2$ son primos $p + 2 \le x$, es decir:

$$\pi_q(x) = \#\{p \colon p \in \mathbb{P}, \ p+2 \in \mathbb{P}, \ p+2 \le x\}$$

Brun estudió este tema a principios del siglo XX y obtuvo ya algunos resultados. Por ejemplo, en [9], se afirma que existe un entero x_0 computable tal que, si $x \ge x_0$, entonces

$$\pi_g(x) < \frac{100x}{(\ln x)^2}.$$

Otro resultado famoso de Brun está relacionado con el recuento de primos gemelos. En [8], probó que la suma de las parejas de primos gemelos

$$B = \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{5}\right) + \left(\frac{1}{5} + \frac{1}{7}\right) + \left(\frac{1}{11} + \frac{1}{13}\right) + \dots + \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{p+2}\right) + \dots,$$

llamada en su honor *constante de Brun*, converge, lo cual da una idea de la relativa escasez de esta clase de primos, aun si existen infinitos de ellos. En [30] se informa del cómputo de la constante de Brun, que resulta ser de

$B = 1,9021605823 \pm 0,000000008.$

Existen estimaciones para la función recuento $\pi_g(x)$, conocidas desde antiguo. La más extendida dice:

$$\pi_g(x) \le 2C \prod_{p>2} \left(1 - \frac{1}{(p-1)^2}\right) \frac{x}{(\ln x)^2}.$$

Ya Hardy y Littlewood en un famoso artículo (véase [25]) conjeturan que C es igual a 1, aunque esto no se ha probado. El producto infinito

$$C_2 = \prod_{p>2} \left(1 - \frac{1}{(p-1)^2} \right)$$

recibe el nombre de constante de los primos gemelos y su valor es del orden de $C_2 = 0,66016...$ si se computa usando los 100000 primeros primos. También en [30] se informa de que

$$\pi_q(3 \cdot 10^{15}) = 3310517800844$$

computado exactamente. Si aplicamos la estimación de $\pi_g,$ suponiendo C=1,obtenemos

$$\pi_g(3 \cdot 10^{15}) \sim 2C_2 \frac{3 \cdot 10^{15}}{\left(\ln(3 \cdot 10^{15})\right)^2} \simeq 3118817238173, 125,$$

que supone un error por defecto del $5,8\,\%$ aproximadamente.

3.3 Recuento de primos 1-seguros

Y. Cai realizó un trabajo en 1994 (véase la referencia [10]) donde conjetura una distribución para los números primos que él denomina seguros (primos 1seguros en nuestra terminología) utilizando para ello el método que C. Pan ya había usado para tratar el tema de la Conjetura de Goldbach en [31].

Recordemos que en 1742, Goldbach escribió una carta a Euler, planteándole dos conjeturas relacionadas con la representación de un entero como suma de números primos.

Estas conjeturas, en realidad equivalentes (conocidas como *conjetura de Goldbach*), son las siguientes:

- 1. todo entero par mayor de 2 es suma de dos primos;
- 2. todo entero mayor de 5 es suma de tres primos.

Es interesante señalar que, a pesar del esfuerzo realizado y de la abrumadora confirmación experimental, esta conjetura sigue sin una demostración a día de hoy.

Recordemos (véase, por ejemplo, [38]) que la función de von Mangoldt, que denotamos por Λ , viene dada por

$$\Lambda(n) = \begin{cases} \ln p, & \text{si } n = p^{\nu}, \text{ con } \nu \ge 1 \text{ y } p \text{ primo}, \\ 0, & \text{en el resto de casos.} \end{cases}$$

Por su lado, la función aritmética de Möbius, μ se define como

$$\mu(n) = \begin{cases} 1, & \text{si } n = 1; \\ (-1)^r, & \text{si } n = p_1 p_2 \cdots p_r, \text{donde } p_i \text{ son primos distintos}; \\ 0, & \text{en el resto de casos.} \end{cases}$$
Con estas herramientas, Cai introduce las siguientes definiciones:

$$S(x) = \sum_{n \le x} \Lambda(n)\Lambda(2n+1),$$
$$Q(x) = \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\left(\ln x\right)^{20}},$$
$$\sigma = 2\prod_{p>2} \left(1 - \frac{1}{(p-1)^2}\right).$$

Observemos que la constante $\sigma = 2C_2$ es, en realidad, dos veces la constante de los primos gemelos. El autor afirma que la función S(x) así definida es esencialmente el número de primos seguros que no exceden x. Aplicando entonces el método del círculo (véase, por ejemplo, [12], [43]), demuestra que

$$S(x) = \sigma x + R(x),$$

donde

$$R(x) = R_1(x) + R_2(x) + R_3(x) + O\left(\frac{x}{\ln x}\right)$$

у

$$R_{1}(x) = \sum_{n \leq x} \left(\sum_{\substack{d_{1} \mid n \\ d_{1} \leq Q(x)}} a(d_{1}) \right) \left(\sum_{\substack{d_{2} \mid 2n+1 \\ d_{2}Q(x)}} a(d_{2}) \right),$$
$$R_{2}(x) = \sum_{n \leq x} \left(\sum_{\substack{d_{1} \mid n \\ d_{1}Q(x)}} a(d_{1}) \right) \left(\sum_{\substack{d_{2} \mid 2n+1 \\ d_{2} \leq Q(x)}} a(d_{2}) \right),$$
$$R_{3}(x) = \sum_{n \leq x} \left(\sum_{\substack{d_{1} \mid n \\ d_{1}Q(x)}} a(d_{1}) \right) \left(\sum_{\substack{d_{2} \mid 2n+1 \\ d_{2}Q(x)}} a(d_{2}) \right),$$

con

$$a(m) = -\mu(m)\ln m,$$

donde μ es la función de Möbius. El autor demuestra que se verifica:

$$R_1(x) = O\left(\frac{x}{\ln x}\right),$$
$$R_2(x) = O\left(\frac{x}{\ln x}\right).$$

Sin embargo, $R_3(x)$ resulta difícil de estimar y el autor conjetura:

$$R_3(x) = O\left(\frac{x}{\ln x}\right).$$

Por ello, el resultado final es también una conjetura; el autor propone que $\pi_1(x)$, el número de primos seguros (de hecho 1-seguros) que no exceden x, es

$$\pi_1(x) = \frac{S(x)}{(\ln x)^2} \left(1 + O\left(\frac{\ln^2 x}{\ln x}\right) \right) + O\left(\frac{x}{(\ln x)^3}\right).$$

Concluye afirmando, sin presentar ulteriores argumentos, que una conjetura más afinada es la siguiente:

$$\pi_1(x) = \sigma \frac{x}{(\ln x)^2} + O\left(\frac{x \ln^2 x}{(\ln x)^3}\right).$$

Es de notar, en primer lugar, que esta función recuento es esencialmente la misma que se conjetura para los primos gemelos.

3.4 Recuento de primos k-seguros

En analogía a los casos anteriores, definiremos

$$\pi_k^{\pm}(x) = \# \left\{ p \in \mathbb{P}_k^{\pm} : p \le x \right\}$$

la función recuento de los primos k-seguros.

Recogemos a continuación un resultado, presentado como Lema 3 en la referencia [6], que dice lo siguiente:

Lema 2 Sean $f_1, f_2, \ldots, f_s \in \mathbb{Z}[x]$, polinomios irreducibles y con el coeficiente del término de mayor grado positivo. Sea F el producto de todos ellos. Sea también $Q_F(N)$ el número de enteros positivos $j \in [1, N]$ tales que $f_1(j), f_2(j), \ldots, f_s(j)$ son números primos. En este caso, se tiene,

$$Q_F(N) \le 2^s s! C(F) N(\ln N)^{-s} + o(N(\ln N)^{-s}),$$

donde

$$C(F) = \prod_{p} \left(1 - \frac{1}{p}\right)^{-s} \left(1 - \frac{\omega(p)}{p}\right)$$

estando extendido el producto a todos los primos, y $\omega(p)$ denota el número de soluciones de la congruencia

$$F(X) \equiv 0 \mod p.$$

La demostración puede consultarse en la citada referencia. Este lema dio origen a una conjetura que puede leerse en [4] y establece, con idénticas condiciones y notación que en el Lema 2, lo siguiente:

$$Q_F(N) \sim h_1^{-1} h_2^{-1} \cdots h_s^{-1} C(F) \int_2^N (\ln u)^{-s} \mathrm{d}u,$$
 (7)

donde h_1, h_2, \ldots, h_s representan los grados de los polinomios f_1, \ldots, f_s .

Esta conjetura no ha sido demostrada hasta la fecha pero sí ha recibido una abrumadora confirmación numérica experimental, empezando por la que los propios autores aportan en [4] para el caso particular de los polinomios x, $x^2 + x + 1$. Además, ha sido aplicada con éxito en otros ámbitos de investigación, como por ejemplo, la factorización de polinomios (véase [1], [2]) o en la obtención de los récords recientes que presentaremos en la última sección.

Este resultado es claramente de aplicación para el caso de los primos k-seguros. En efecto, recordemos que para que $x \in \mathbb{P}_k^{\pm}$, el siguiente conjunto de condiciones simultáneas han de verificarse:

(1)
$$x$$
 es un primo;

(2)
$$x_1 = \frac{1}{2}(x \mp 1)$$
 es primo;

(3)
$$x_2 = \frac{1}{2}(x_1 \mp 1) = \frac{1}{4}(x \mp 3)$$
 es primo;

 $(k+1) \ x_k = \frac{1}{2}(x_{k-1} \mp 1) = \frac{1}{2^k}(x \mp (2^k - 1))$ es primo.

Es claro que podemos expresar las anteriores condiciones de manera que la fórmula (7) sea de aplicación. En efecto, si en el anterior conjunto de condiciones hacemos $x_k = y$ y despejamos los sucesivos valores de x_i en función de y obtenemos el siguiente conjunto de polinomios:

$$f_1(y) = y, f_2(y) = 2y \pm 1, f_3(y) = 4y \pm 3, \dots, f_{k+1}(y) = 2^k y \pm (2^k - 1).$$

En tal caso, $x = 2^k y \pm (2^k - 1)$ estará en \mathbb{P}_k^{\pm} si todos los polinomios $f_i(y)$ toman un valor primo para algún valor de y.

A partir de sus respectivas definiciones, podemos relacionar la función Q_F , definida en el Lema 3.4, con la función recuento de los primos k-seguros de la siguiente manera:

$$\pi_k^{\pm}(2^k y \pm (2^k - 1)) = Q_F(y),$$

o bien, en función de x (recordemos que hemos hecho $x_k = y$)

$$Q_F\left(\frac{1}{2^k}(x \mp (2^k - 1))\right) = \pi_k^{\pm}(x).$$

Aplicando entonces la fórmula (7), tendremos

$$\pi_k^{\pm}(x) = Q_F\left(\frac{1}{2^k}(x \mp (2^k - 1))\right) \sim C(F) \int_2^{\frac{1}{2^k}(x \mp (2^k - 1))} (\ln u)^{-k-1} \mathrm{d}u.$$

Es conveniente hacer el siguiente cambio de variable:

$$u = \frac{1}{2^k} (t \mp (2^k - 1)),$$

$$du = \frac{1}{2^k} dt,$$

con lo que finalmente obtenemos:

$$\pi_k^{\pm}(x) \sim \frac{1}{2^k} C(F) \int_{2^{k+1} \pm 2^k - 1}^x (\ln \frac{1}{2^k} (t \mp (2^k - 1)))^{-k-1} \mathrm{d}t.$$

Que da calcular el valor de la constante ${\cal C}(F).$ Según su definición, tendremos para nue stro caso,

$$C(F) = \prod_{p} \left(1 - \frac{1}{p}\right)^{-k-1} \left(1 - \frac{\omega(p)}{p}\right).$$

Ahora necesitamos calcular $\omega(p)$ para los distintos valores de p. Definamos el siguiente conjunto

$$V(k) = \{j : p | 2^{j} - 1, \quad 1 < j \le k, \quad 2 < p \le 2^{k} - 1\}.$$

La solución ha de ser considerada caso a caso de la siguiente manera:

$$\omega(p) = \begin{cases} 1, & \text{si } p = 2\\ p - \#V(k), & \text{si } 2 2^k - 1 \end{cases}$$

Como ejemplo, podemos considerar el caso k = 2, que correspondería a los 2-seguros. Se tiene que $V(2) = \{1\}$. Con ello, el valor de $\omega(p)$ sería:

$$\omega(p) = \begin{cases} 1, & \text{si } p = 2\\ 2, & \text{si } p = 3\\ 3, & \text{si } p > 3 \end{cases}$$

con lo que tendríamos para C(F)

$$\begin{split} C(F) &= \left((1 - \frac{1}{2})(1 - \frac{1}{3}) \right)^{-3} (1 - \frac{1}{2})(1 - \frac{2}{3}) \prod_{p>3} (1 - \frac{1}{p})^{-3}(1 - \frac{3}{p}) \\ &= \frac{9}{2} \prod_{p>3} \frac{p^2(p-3)}{(p-1)^3}. \end{split}$$

Consiguientemente, obtendríamos para la función recuento

$$\pi_2^+(x) \sim \frac{9}{8} \prod_{p>3} \frac{p^2(p-3)}{(p-1)^3} \int_{11}^x (\ln \frac{t-3}{4})^{-3} \mathrm{d}t.$$

4 Récords

4.1 El récord de Dubner

Durante mucho tiempo el mayor número de Sophie Germain conocido fue $p = 39051 \cdot 2^{6001} - 1$, descubierto por Wilfrid Keller, de Hamburgo, en 1986;

véase [34, 2.VII p. 66], [44]. Esto puede reformularse diciendo que p' = 2p + 1 es un primo 1-seguro de más de 1800 cifras. Otros primos de Sophie Germain son $296385 \cdot 2^{4251} - 1$ y $53375 \cdot 2^{4203} - 1$: para más detalles, véase [34, p. 166].

A lo largo de los años noventa, Harvey Dubner obtuvo récords sucesivamente crecientes para este tipo de primos como puede verse en la página web *The Chronology of Prime Number Records* [20]. En enero de 1994, el propio Dubner encontró el primo de Sophie Germain: $q = c \cdot 3003 \cdot 10^b - 1$, donde c = 1803301, b = 4526. Nótese que p tiene alrededor de 1812 dígitos, mientras que q tiene 4536. Este valor y otros obtenidos anteriormente fueron publicados por él en [15].

En esa misma referencia, Dubner explica que los números considerados tienen esta forma concreta por las siguientes razones:

- 1. Los números q, $2q + 1 \ge (q 1)/2$ son siempre de la forma $6k \pm 1$, lo que facilita la aplicación de test de primalidad específicos.
- 2. La sucesión 6k 1, 12k 1, 24k 1, \dots , $6 \cdot 2^m 1$ puede contener teóricamente cualquier número de primos consecutivos.
- 3. Los números q, 2q+1 y (q-1)/2 nunca contienen un factor primo menor de 17. Esto es ventajoso desde el punto de vista computacional, pues permite una representación binaria eficiente para c.
- 4. Si $q \ge 2q+1$ son primos, entonces q es de Sophie Germain. Si $q \ge (q-1)/2$ son primos, entonces (q-1)/2 es de Sophie Germain. Así se divide por dos el tiempo de búsqueda.
- 5. Los números q, $2q + 1 \ge (q 1)/2$ son siempre de la forma 4k + 3.

El modo computacional de proceder consiste básicamente en aplicar un test de primalidad de Fermat, después de haber eliminado los valores de c para los que q, 2q+1 o (q-1)/2 contienen algún factor menor que cierto límite prefijado.

De paso, Dubner explica que se prueba también a ver si q + 2 fuera primo, pues en tal caso se habría encontrado un primo gemelo por un coste adicional casi nulo.

Con los datos obtenidos, en ese momento el número de Mersenne compuesto más grande tenía del orden de $1,63 \times 10^{4535}$ cifras decimales.

4.2 Los récords recientes

4.2.1 Los trabajos de Indlekofer y Járai

De forma más o menos simultánea, los investigadores Indlekofer y Járai (véase [26] y [27]), en Alemania, fueron capaces de obtener primos gemelos de tamaño récord. En el contexto de un proyecto de computación paralela en el ámbito de teoría de números computacional, desarrollaron rutinas aritméticas especialmente dedicadas a la computación serie y paralela con números arbitrariamente grandes. Con ellas, encontraron la pareja de números 697053813 $\cdot 2^{16352} \pm 1$, que tienen 4932 cifras decimales.

El método de trabajo consistió en buscar candidatos a primos gemelos de la forma $(3 + 30h) \cdot 2^{16352} \pm 1$. Los pasos fueron los siguientes:

- 1. Se tomaron los valores de h no negativos por debajo de 2^{25} .
- 2. Se cribaron los casos ± 1 con los primos entre 7 y $2^{37}.$ Tras la criba, quedaron 209571 candidatos.
- 3. A los candidatos se les aplicó el test de Miller-Rabin (ver [33]), hasta encontrar una pareja candidata a la primalidad gemela.
- 4. Finalmente se aplicaron a la pareja candidata tests exactos: para el caso -1, el test lucasiano (ver [35]) y para el caso +1, los tests de Brillhart, Lehmer y Selfridge, y el test de Proth (ver [34, pp. 37–40]).

4.2.2 Los trabajos de Csajbók, Farkas, Járai y Kasza

Varios investigadores de la Facultad de Informática de la Universidad Eőtvős Lorand, de Budapest, siguieron en la búsqueda de primos gemelos y de Sophie Germain cada vez más grandes. En [14] se da cuenta de los récords, hasta esa fecha. El primo de Sophie Germain más alto conocido en ese momento, con 51780 cifras, resultaba ser:

 $137211941292195 \cdot 2^{171960} - 1,$

mientras que el par de primos gemelos más altos eran:

 $100314512544015 \cdot 2^{171690} \pm 1$,

con, también, 51780 cifras.

La estrategia seguida fue, esencialmente, la misma que en los trabajos previos de Indlekofer y Járai citados en la sección anterior. Algunos de los parámetros de la computación fueron fijados atendiendo a los resultados de la conjetura de Bateman-Horn (véase [4], [5]).

4.3 Registro web The Prime Pages

En la página web *The Prime Pages* (véase [11]), C. Caldwell mantiene un registro de los primos más altos conocidos de diversos tipos. En particular, a fecha de septiembre de 2009, la pareja de primos gemelos más alta conocida es:

 $65516468355 \cdot 2^{333333} \pm 1.$

Se trata de dos números de 100355 cifras cada uno.

Referencias

- L. ADLEMAN Y A. ODLYZKO, Irreducibility testing and factorization of polynomials, in SFCS '81: Proceedings of the 22nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science, Washington, DC, USA, 1981, IEEE Computer Society, pp. 409–418.
- [2] L. ADLEMAN Y A. ODLYZKO, Irreducibility testing and factorization of polynomials, Mathematics of Computation, 41 (1983), pp. 699–709.
- [3] D. AUGUSTIN, Cunningham chain records. http://users.cybercity.dk/ ~dsl522332/math/Cunningham_Chain_records.htm, 2009.
- [4] P. BATEMAN Y R. HORN, A heuristic asymptotic formula concerning the distribution of prime numbers, Mathematics of Computation, 16 (1962), pp. 363–367.
- [5] —, Primes represented by irreducible polynomials in one variable, in Proceedings of Symposia in Pure Mathematics VIII, Providence, RI, 1965, American Mathematical Society, pp. 119–132.
- [6] P. BATEMAN Y R. STEMMLER, Waring's problem for algebraic number fields and primes of the form (p^r - 1)/(p^d - 1), Illinois Journal of Mathematics, 6 (1962), pp. 142–156.
- [7] D. BONEH, Twenty years of attacks on the RSA cryptosystem, Notices of the AMS, 46 (1999), pp. 203–213.
- [8] V. BRUN, La série 1/5 + 1/7 + 1/11 + 1/13 + 1/17 + 1/19 + 1/29 + 1/31 + 1/41 + 1/43 + 1/59 + 1/61 + ..., où les dénominateurs sont «nombres premieres jumeaux» est convergente ou finie, Bulletin des sciences mathématiques, 43 (1919), pp. 100–104, 124–128.
- [9] —, Le crible d'Eratosthène et le théorème de Goldbach, Videnskapsselskapet i Kristiania Skrifter I, Matematisk-Naturvidenskapelig Klasse, I (1920), pp. 1–36.
- [10] Y. CAI, On the distribution of safe-primes, Journal of Shandong University, 29 (1994), pp. 388–392.
- [11] C. CALDWELL, The prime pages. http://primes.utm.edu/, 2005.
- [12] F. CHAMIZO, E. CRISTÓBAL Y A. UBIS, *El método del círculo*, La Gaceta de la RSME, 9 (2006), pp. 465–481.
- [13] R. CRANDALL Y C. POMERANCE, Prime Numbers. A Computational Perspective, Springer-Verlag, New York, 2001.
- [14] T. CSAJBÓK, G. FARKAS, A. JÁRAI, Z. JÁRAI Y J. KASZA, Report on the largest known Sophie Germain and twin primes, Ann. Univ. Sci. Budap. Rolando Eőtvős, Sect. Comput., 26 (2006), pp. 181–183.

- [15] H. DUBNER, Large Sophie Germain primes, Math. Comput., 65 (1996), pp. 393–396.
- [16] R. DURÁN DÍAZ, L. HERNÁNDEZ ENCINAS Y J. MUÑOZ MASQUÉ, El criptosistema RSA, RA-MA, Madrid, 2005.
- [17] R. DURÁN DÍAZ, F. MONTOYA VITINI Y J. MUÑOZ MASQUÉ, Densidad de primos seguros, in Actas del XIV Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI), Santiago de Compostela, 8–10 de septiembre de 1999, 1999, pp. 86–87.
- [18] —, Safe primes density and cryptographic applications, in IEEE Proceedings of the 33rd Annual International Carnahan Conference on Security Technology, Madrid, 5–7 de octubre de 1999, 1999, pp. 363–367.
- [19] T. FORBES, Prime Clusters and Cunningham Chains, Mathematics of Computation, 68 (1999), pp. 1739–1747.
- [20] Y. GALLOT Y L. GALLOT, The chronology of prime number records. http: //pagesperso-orange.fr/yves.gallot/primes/chrrcds.html, 2009.
- [21] A. GRANVILLE, Un buen milenio para los primos, La Gaceta de la RSME, 12 (2009), pp. 547–556.
- [22] A. GRANVILLE Y G. MARTIN, Carreras de números primos, La Gaceta de la RSME, 8 (2005), pp. 197–240.
- [23] B. GREEN Y T. TAO, The primes contain arbitrarily long arithmetic progressions, Annals of Mathematics, 167 (2008), pp. 481–547.
- [24] R. GUY, Unsolved Problems in Number Theory, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [25] G. HARDY Y E. LITTLEWOOD, Some problems of 'partitio numerorum'; III: On the expression of a number as a sum of primes, Acta Mathematica, 44 (1922), pp. 1–70.
- [26] K.-H. INDLEKOFER Y A. JÁRAI, Largest known twin primes, Math. Comput., 65 (1996), pp. 427–428.
- [27] —, Largest known twin primes and Sophie Germain primes, Math. Comput., 68 (1999), pp. 1317–1324.
- [28] G. IOVANE, The distribution of prime numbers: The solution comes from dynamical processes and genetic algorithms, Chaos, Solitons and Fractals, 37 (2008), pp. 23–42.
- [29] —, The set of primes: Towards an optimized algorithm, prime generation and validation, and asymptotic consequences, Chaos, Solitons & Fractals, 41 (2009), pp. 1344–1352.

- [30] T. R. NICELY, A new error analysis for Brun's constant, Virginia Journal of Science, 52 (2001), pp. 45–55.
- [31] C. PAN, A new attempt on Goldbach conjecture, Chinese Annals of Mathematics, 3 (1982), pp. 555–560.
- [32] J. POLLARD, Theorems on factorization and primality testing, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 76 (1974), pp. 521– 528.
- [33] M. RABIN, Probabilistic algorithms for testing primality, Journal of Number Theory, 12 (1980), pp. 128–138.
- [34] P. RIBENBOIM, *The little book of big primes*, Springer-Verlag, New York, 1991.
- [35] H. RIESEL, Lucasian criteria for the primality of $n = h \cdot 2^n 1$, Math. Comp., 23 (1969), pp. 869–875.
- [36] —, Prime Numbers and Computer Methods of Factorization, Birkhäuser, Boston, 1994.
- [37] R. RIVEST, A. SHAMIR Y L. ADLEMAN, A method for obtaining digital signatures and public-key cryptosystems, Communications of the ACM, 21 (1978), pp. 120–126.
- [38] K. H. ROSEN, *Elementary Number Theory*, Pearson, Addison-Wesley, Boston, 5th ed., 2005.
- [39] A. SALOMAA, Public Key Cryptography, Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [40] M. SCHROEDER, Number Theory in Science and Communication, Springer-Verlag, Berlin, 3rd ed., 1984, 1997.
- [41] G. TENENBAUM Y M. MENDÈS-FRANCE, The Prime Numbers and Their Distribution, American Mathematical Society, Providence, RI, 2000.
- [42] E. TESKE Y H. WILLIAMS, A Note on Shanks's Chains of Primes, in Proceedings of Algorithmic Number Theory Seminar, ANTS IV, vol. 1838 of Lecture Notes in Computer Science, Berlin, 2000, Springer-Verlag, pp. 563–580.
- [43] R. VAUGHAN, The Hardy-Littlewood method, vol. 80 of Cambridge Tracts in Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1981.
- [44] S. YATES, Sophie Germain Primes, in The mathematical heritage of C.F. Gauss, G. Rassias, ed., World Scientific Publ. Co., River Edge, NJ, 1991, pp. 882–886.

MODELLING AND NUMERICAL SIMULATION OF SUBMARINE SEDIMENT SHALLOW FLOWS: TRANSPORT AND AVALANCHES

ENRIQUE D. FERNÁNDEZ-NIETO

Departamento de Matemática Aplicada I, Universidad de Sevilla E.T.S. Arquitectura. Avda, Reina Mercedes, s/n. 41012 Sevilla, Spain

edofer@us.es

Abstract

This work presents two different types of models to study submarine sediment movements and its numerical discretization by finite volume methods. First, bedload sediment transport models are introduced. They are characterized by the slow movement of the sediment layer. The movement depends on the type of interaction between the fluid and the sediment layer, that generally is very weak. Secondly, a submarine avalanches model is presented. This model takes into account the coupling between the sediment and the fluid layer. The generated tsunamis by a submarine avalanche can be studied with this model. A family of twodimensional finite volume methods is introduced. It is based on the fact that the models are invariant under rotations. Finally, two numerical tests are considered. In the first numerical test the spread angle for a sediment bump is studied. In the second one a submarine avalanche is simulated over a bottom with a rectangular bump.

1 Introduction

This work begins by presenting some shallow models to study submarine sediment movements in channels or coastal areas.

Two different type of movements are considered. In the first part bedload sediment transport models are presented. In this case, the movement of the sediment deposited on the bottom of the channel is produced by the interaction with the fluid.

The other type of presented models study very quick movements of the sediment layer, submarine avalanches. The interaction of the movement of the sediment layer with the fluid can produce in some cases a tsunami.

After presenting these two types of models the work continues with the numerical discretization of a general two-dimensional hyperbolic system. The

Fecha de recepción: 13/12/2009. Aceptado: 14/12/2009.

property of invariance under rotation of the presented models is used in the design of the numerical scheme.

From a computational point of view, three-dimensional models are generally very expensive, so in a lot of cases it is interesting to study integrated models. In the deduction of the model, the hypothesis of shalloness of the domain is considered. The resulting model can be used by itself or combined with a threedimensional model in areas requiring greater precision or when the considered hypothesis for the shallow model are not valid.

A first example corresponds to the well-known Saint-Venant model. It is obtained from the Navier-Stokes equations.

The steps in the deduction of Saint-Venant model, also known as Shallow Water Equations (SWE), are the following ones: First dimensionaless variables are defined depending on the charactestic horizontal and vertical lengths of the domain. Then, a change of variable is considered, in order to write Navier-Stokes equations in terms of dimensionless variables. In this way, the system of equations can be written in terms of the aspect ratio between vertical and horizontal characteristic dimensions.

By considering that the aspect ratio is small, some terms of the system are omitted. In this way we can obtain an expression for the pressure from the vertical momentum equation. We obtain an hydrostatic pressure. It coincides with the pressure corresponding to fluid at rest. The deduction of the model finish with a process of integration over the vertical direction of the domain and a hypothesis over the vertical velocity profile.

One important hypothesis used in the deduction of shallow models is the hydrostatic pressure. This is also one of the most important restriction of aplication of the models. In some situations the pressure of the system cannot be approximated by an hydrostatic pressure. For example when there is recirculation of the fluid, that is, the vertical acceleration of the fluid is am important effect.

A typical example is to simulate the evolution of a dam break. For this example it is well known that at the beginning of the movement the velocity of the fluid predicted by using SWE is bigger than the velocity obtained with Navier-Stokes equations (see [27]). This is a consequence of the hydrostatic pressure. Nevertheless, the results obtained with SWE and Navier-Stokes equations for the evolution of the water depth far from the dam are close. So, the SWE approach is appropriate for large computational domains or large time simulations, due to a smaller computational cost.

An example of long time simulations is the study of summerged sediment evolution. In this problem we consider that the bottom of the domain is composed of a fixed component and a mobile sediment layer (See [24], [11], [14]). The evolution of the sediment layer is very slow, because its evolution is produced by the interaction with the fluid. The interaction between the fluid and the sediment layer depends on the friction between these two layers. It is introduced in the problem via the definition of the solid transport discharge (see [15], [21]), defining a continuity equation. So, we have a coupled system defined by the SWE and the continuity equation for the sediment evolution.

Another type of sediment evolution can be observed when there is a sedimentation over the bottom and the sediment layer colapses, by producing a submarine avalanche. In [9] it is proposed a two layers SWE system where the submarine avalanche and the eventual generated tsunami can be studied. The first layer corresponds to the fluid and the second one to the sediment layer.

For the sediment layer a Savage-Hutter type model is considered. The pionering work of Savage-Hutter [28] derives a model to describe granular flows over a slopping plane based on Mohr-Coulomb considerations: a Coulomb friction is assumed to reflect the avalanche/bottom interaction and the normal stress tensor is defined by a constitutive law relating the longitudinal and the normal stresses through a proportionality factor.

One of the characteristics of the model proposed in [9] is that the definition of the Coulomb friction term takes into account bouyancy effects, because we are studying submarine avalanches. Another characteristic is that, depending on the aspect ratio between the water density and the sediment density, the movement of the sediment avalanches can be more or less influenced by the presence of the fluid. The submarine avalanches produces a movement on the fluid layer, whose consequence can be a tsunami.

There are many other effects that can be studied around summerged sediments, such as suspension, erosion or deposition effects (see [18] for more details).

In this work we focus on the presentation of the models corresponding to sediment bedload transport and submarine avalanches. These models can be written under the general formulation

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(U) + \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(U) = B_1(U)\frac{\partial W}{\partial x_1} + B_2(U)\frac{\partial U}{\partial x_2} + S_1(U)\frac{\partial H}{\partial x_1} + S_2(U)\frac{\partial H}{\partial x_2}$$
(1)

where the unknown $U(\mathbf{x}, t)$ is defined in the domain $D \times (0, T)$, where D is a subset of \mathbb{R}^2 , with values in an open subset Ω of \mathbb{R}^N ; F_i , i = 1, 2 are regular functions from Ω to \mathbb{R}^N ; B_i , i = 1, 2 are regular function matrices from Ω to $\mathcal{M}_{N \times N}(\mathbb{R})$; S_i , i = 1, 2 are defined from D to \mathbb{R}^N ; and $H(\mathbf{x})$ is a known function from D to \mathbb{R} .

This general framework includes particular cases corresponding to conservation laws $(B_i = 0, S_i = 0, i = 1, 2)$; hyperbolic systems with source terms, or balance laws $(B_i = 0, i = 1, 2)$; and nonconservative system, corresponding to coupled hyperbolic systems.

This work is organized as follows: In Section 2 we focus on bedload sediment transport models. Theoretical and experimental models are presented by including a brief description of the principles considered to define the solid transport discharge. In Section 3 we present a simplied 2D extention of the model proposed in [9] for submarine avalanches. Section 4 is devoted to the presentation of a family of finite volume methods. Finally, in Section 5 we present two numerical tests. In the first numerical test the spread angle for a sediment bump is studied. In the second one a submarine avalanche is simulated over a bottom with a rectangular bump.

2 Bedload sediment transport

In this work we consider two different types of submarine sediment movements. In this section we study the transport of sediment over the bottom by interaction with the fluid.

Sediment transports are classified into three types: bedload, saltation and suspension. Bedload transport is defined as the type of transport where sediment grains roll or slide along the bed. Saltation is produced when single grains jump over the bed, losing for instants the contact with the soil. Sediment is suspended when the flux is intense enough such as the sediment grains reach height over the bed.

We only consider the case of bedload sediment transport. To study this problem a coupled system defined by the Shallow Water equations and a continuity equation can be considered. The continuity equation depends on the definition of the solid transport discharge.

The definition of the solid transport discharge is done by empirical laws. Some of them are deterministic formulae and other are based on probabilistic terms. Some of the proposed models have been proposed by the following authors: Grass [13], Meyer-Peter&Müller's [17], Van Rijn's [30], Nielsen [21], Kalinske [16], Einstein [8], etc.

In the following subsection we present the formulation for a family of deterministic beload sediment transport models.

We denote by z_s the height of the sediment layer and z_b the fixed bottom. By h we denote the height of the water layer. The discharge vector is denoted by $\vec{q} = (q_1, q_2) = h\vec{u}$, where by $\vec{u} = (u_1, u_2)$ we denote the vector of velocities at x and y directions. Then, the model can be written as follows,

$$\begin{cases} \partial_t h + \partial_x(q_1) + \partial_y(q_2) = 0, \\ \partial_t(q_1) + \partial_x(\frac{q_1^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2) + \partial_y(\frac{q_1q_2}{h}) = -gh\partial_x(z_s + z_b) - ghS_{f1}, \\ \partial_t(q_2) + \partial_x(\frac{q_1q_2}{h}) + \partial_y(\frac{q_2^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2) = -gh\partial_y(z_s + z_b) - ghS_{f2}, \\ \partial_t z_s + \xi\partial_x(\mathcal{Q}_{s\,x}(h,\vec{q})) + \xi\partial_y(\mathcal{Q}_{s\,y}(h,\vec{q})) = 0. \end{cases}$$

where g is the gravity constant, $\xi = 1/(1 - \psi_0)$ being ψ_0 the porosity of the sediment layer and $Q_s = (Q_{sx}, Q_{sy})$ the solid transport discharge vector formula. For friction term $\vec{S}_f = (S_{f1}, S_{f2})$ we consider Manning laws,

$$\vec{S}_f = \frac{n^2 \|\vec{u}\|}{R_h^{4/3}} \vec{u},$$

where n is the bed roughness coefficient and R_h is the hydraulic ratio.



Figure 1: Notation: Bedload sediment transport

2.1 Solid transport discharge formulae

The continuity equation describing the evolution of the sediment layer is defined in terms of the solid transport discharge $Q_s = (Q_{sx}, Q_{sy})$.

If by q_s we denote the solid transport discharge for a one-dimensional model, then,

$$\mathcal{Q}_{s,x}(h,\vec{q}\,) = \frac{q_1}{\|\vec{q}\,\|} \left| q_s(h,\|\vec{q}\,\|) \right|, \quad \mathcal{Q}_{s,y}(h,\vec{q}\,) = \frac{q_2}{\|\vec{q}\,\|} \left| q_s(h,\|\vec{q}\,\|) \right|, \tag{2}$$

where $\|\vec{q}\,\| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$.

As we mentioned previously, there is a lot of formulae, which are deduced empirically and corresponds to different ranges of applycation (see [24]).

One of the simpler models was proposed by Grass (see [13]). This model supposes that the solid transport discharge is proportional to a power of the velocity,

$$q_b = Au|u|^k,$$

where A and k are two parameters of the model. Constant A depends on the interaction between the fluid and the sediment. Generally it is a small value, $A = \mathcal{O}(10^{-3})$ (See [2]). A typical value of k is k = 2.

This is a theoretical model, whose main characteristic is that the sediment layer moves when the fluid layer does. For other type of models, which are deduced in terms of empirical data, the sediment layer does not move for any movement of the fluid. The sediment moves when the shear stress, τ , is bigger than a critical shear stress, τ_c .

The definition of the shear stress depends on the definition of the friction term \vec{S}_f ,

$$\tau = \gamma R_h \|S_f\|.$$

where γ denotes the specific weight of the fluid, $\gamma = g\rho$, where ρ is the water density.

Usually, the model is presented in dimensionless form. Then, the definition of the solid transport discharge is done in terms of the difference between the dimensionless shear stress, τ^* and a dimensionless critical shear stress, τ^*_c .

The dimensionless solid transport discharge, q_b^* , is written in terms of the mean grain size, d_i , and the characteristic settling velocity $\sqrt{(G-1)gd_i}$,

$$q_b^* = \frac{q_b}{d_i \sqrt{(G-1)gd_i}},$$

where $G = \rho_s/\rho$ is the relative density, being ρ_s the sediment density. The dimensionless shear stress τ^* (see [15]) is defined in terms of the ratio between drag forces, $F_D = \tau d_i^2$, and the summerged weight, $F_S = (\gamma_s - \gamma) d_i^3$, where $\gamma_s = g\rho_s$ is the specific sediment weight. We have,

$$\tau^* = \frac{\tau}{(\gamma_s - \gamma)d_i} = \frac{R_h \|S_f\|}{(G-1)d_i}.$$

Analogously the critical shear stress is defined as

$$\tau_c^* = \frac{\tau_c^*}{(\gamma_s - \gamma)d_i}.$$

A great number of proposed models can be written under the following formulation,

$$q_b^* = f(h, q, \tau) (K \tau^* - \tau_c^*)_+^m.$$

where power m, constant K and function f depend on the model. This formulation includes that the movement of the sediment layer begins only when the shear stress is bigger than the critical shear stress, because it depends on the positive part of the difference between τ^* and τ_c^* . Constant K is usually set to 1, although it can be defined as the ratio between the the bed roughness coefficient of the sediment layer and the fixed bottom.

Some models corresponds to:

- Meyer-Peter&Müller: $q_b^* = 8(\tau^* \tau_c^*)_+^{3/2}$
- Fernández Luque & Van Beek: $q_b^* = 5.7(\tau^* \tau_c^*)_+^{1/3}$
- Nielsen: $q_b^* = 12\sqrt{\tau^*}(\tau^* \tau_c^*)_+$

All these formulae have a range of application in function of grain size, the slope of the bottom, the Froude number and the relative density G. For example in the case of the Meyer-Peter&Müller model it is applied for a $0.4 \leq d_i \leq 29$ mm., slopes of the bottom smaller than 0.02 and $1.25 \leq G \leq 4.2$ (see [24] and [11] for more details).

To determine τ_c^* many experiments have been performed in different works. Concretely, Shields proposed the well-known Shields-diagram.

In [31] two grass type models are proposed, in the sense that they do not depend on a critical shear stress. We denote the models presented in [31] by $\mathcal{M}S1$ and $\mathcal{M}S2$, defined by:

Modelling and numerical simulation of submarine

• $\mathcal{M}S1: q_b = Ahu|u|^k$ with 0 < k < 1/2,

•
$$\mathcal{M}S2: q_b = Ah(1 + log(1 + |u|^2))u,$$

where A is the constant of interaction between the fluid and the sediment.

3 Submarine avalanches model

Submarine avalanches or landslides are poorly studied compared to aerial avalanches. This is however a key issue in geophysics. For example, submarine granular flows driven by gravity participate in the evolution of the sea floor and in particular of the continental margins.

In [9] a two-layer 1D model is presented to study submarine avalanches. The sediment layer is modelled as a Savage-Hutter type system (see [28]). It is summerged in a fluid, that is considered as the other layer of the model.

Savage-Hutter model is characterized by the presence of a Coulomb friction term. This term opposes to the movement of the avalanches, and its definition depends on a critical value in terms of the pressure at the bottom and a friction angle. The definition of the Coulomb friction term for the model proposed in [9] also includes the bouyancy effect.

In this section we present a 2D simplified extention of the model proposed in [9]. With subindex 1 we denote the unknowns corresponding to the fluid layer: h_1 is the height of the fluid layer and $\vec{q}_1 = (q_{11}, q_{12})$ is the vector of discharges. Index 2 corresponds to the sediment layer: by h_2 we denote denote the height of the sediment layer and $\vec{q}_2 = (q_{21}, q_{22})$ is the discharge. The fixed bottom topography is described by function z_b (See Figure 2).



Figure 2: Notation, 2D submarine avalanches

By simplicity we consider a fixed bottom with small slope. Then, we obtain the following model:

$$\begin{split} \partial_t h_1 &+ \partial_x (q_{11}) + \partial_y (q_{12}) = 0, \\ \partial_t (q_{11}) &+ \partial_x (\frac{q_{11}}{h_1} + g\frac{h_1^2}{2}) + \partial_y (\frac{q_{11}q_{12}}{h_1}) = -g h_1 \partial_x (z_b + h_2), \\ \partial_t (q_{12}) &+ \partial_x (\frac{q_{11}q_{12}}{h_1}) + \partial_y (\frac{q_{12}^2}{h_1} + g\frac{h_1^2}{2}) = -g h_1 \partial_y (z_b + h_2), \\ \partial_t h_2 &+ \partial_x (q_{21}) + \partial_y (q_{22}) = 0, \\ \partial_t (q_{21}) &+ \partial_x (\frac{q_{21}^2}{h_2} + g\frac{h_2^2}{2}) + \partial_y (\frac{q_{21}q_{22}}{h_2}) = -g h_2 \partial_x (z_b + rh_1) + \mathcal{T}_x, \\ \partial_t (q_{22}) &+ \partial_x (\frac{q_{21}q_{22}}{h_2}) + \partial_y (\frac{q_{22}}{h_2} + g\frac{h_2^2}{2}) = -g h_2 \partial_y (z_b + rh_1) + \mathcal{T}_y. \end{split}$$

where $r = \rho_1/\rho_2$ and $\mathcal{T} = (\mathcal{T}_x, \mathcal{T}_y)$ denotes the Coulomb friction term,

If
$$|\mathcal{T}| \ge \sigma_c \quad \Rightarrow \quad \mathcal{T} = -g(1-r)h_2 \frac{\vec{u}_2}{|\vec{u}_2|} \mu.$$

If $|\mathcal{T}| < \sigma_c \quad \Rightarrow \quad \vec{u}_2 = 0.$
(3)

with $\sigma_c = g(1-r)h_2 \tan(\delta_0)$. The definition of the frictional term μ depends on the model. The simplest definition corresponds to

$$\mu = \tan(\delta_0),\tag{4}$$

where δ_0 is the frictional angle. Altough some other definitions have been proposed in the bibliography (see [19], [25]). For example, in order to incorporate turbulence effects McDougall and Hungr [20] proposed to add to the definition of \mathcal{T} a turbulent term proportional to $|\vec{u}_2|^2$. Other definition, deduced from experimental data, has been proposed by Pouliquen (see [26]). It depends on the Froude number, the thickness of the sediment layer, the mean diameter of the sediment, the velocity of the moving layer, and two friction angles.

4 Numerical scheme

The models that we have presented previously can be written under the following structure,

$$\partial_t W + \partial_{x_1} F_1(W) + \partial_{x_2} F_2(W) = B_1(W) \partial_{x_1} W + B_2(W) \partial_{x_2} W.$$
(5)

These models verify the property of invariance under rotations. If $\eta = (\eta_1, \eta_2)$ is a unitary vector, we define

$$T_{\eta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{1} & \eta_{2} & 0 \\ 0 & -\eta_{2} & \eta_{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{or} \quad T_{\eta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{1} & \eta_{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\eta_{2} & \eta_{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \eta_{1} & \eta_{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\eta_{2} & \eta_{1} \end{pmatrix},$$

Modelling and numerical simulation of submarine

for the sediment transport model and the submarine avalanches model, respectively.

We denote $F_{\eta} = F_1\eta_1 + F_2\eta_2$ and $\mathcal{B}(W) = (B_1(W), B_2(W))$. Then, by the invariance under rotations property we have,

$$F_{\eta} = T_{\eta}^{-1} F_1(T_{\eta} W).$$
(6)

and

$$T_{\eta}(\mathcal{B}(W) \cdot \eta) = B_1(T_{\eta}W). \tag{7}$$

For example, for the sediment transport model, we can see that (6) is verified by using the definition of the solid transport discharge (2) and the proof of invariance under rotations for Shallow Water Equations (See for example [29]).

Moreover, it is easy to see that, for a given unitary vector η , system (5) can be rewritten as follows,

$$\partial_t(W) + \partial_\eta F_\eta + \partial_{\eta^{\perp}} F_{\eta^{\perp}} = (\mathcal{B}(W) \cdot \eta) \partial_\eta W + (\mathcal{B}(W) \cdot \eta^{\perp}) \partial_{\eta^{\perp}} W$$

By multiplying previous system by T_{η} and by using (6), (7) we obtain

$$\partial_t (T_\eta W) + F_1(T_\eta W) = B_1(T_\eta W) \partial_\eta W + \mathcal{P}_{\eta^\perp}, \tag{8}$$

where

$$\mathcal{P}_{\eta^{\perp}} = T_{\eta} \bigg(-\partial_{\eta^{\perp}} F_{\eta^{\perp}}(W) + (\mathcal{B}(W) \cdot \eta^{\perp}) \partial_{\eta^{\perp}} W \bigg).$$

The design of the numerical scheme is done by using (8) at each edge of a mesh, being η the normal vector to the edge (see [1], [3] and [10]).



Figure 3: Notation, control volumes

We begin by considering a mesh of the domain Ω into control volumes. We denote the volumes that define the mesh by K_i . By E_{ij} we denote the common edge between the volumes K_i and K_j . And η_{ij} is the unitary normal vector to E_{ij} outward to K_i (See Figure 3). The structure of the 2D finite volume method is:

$$W_{i}^{n+1} = W_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{|K_{i}|} \sum_{j \in K_{i}} |E_{ij}| \Phi(W_{i}^{n}, W_{j}^{n}, \eta_{ij}) + \frac{\Delta t}{2|K_{i}|} \sum_{j \in K_{i}} |E_{ij}| \mathcal{B}_{\eta_{ij}}(W_{j}^{n} - W_{i}^{n}).$$
(9)

where $\Phi(W_i^n, W_j^n, \eta_{ij})$ is an approximation of the normal flux associated to the edge E_{ij} . And $\mathcal{B}_{\eta_{ij}}$ is an approximation of $\mathcal{B}(W) \cdot \eta_{ij}$.

By using (7) we can define

$$\mathcal{B}_{\eta_{ij}} = T_{\eta_{ij}}^{-1} B_1(T_{\eta_{ij}} W_{(i+j)/2}).$$

And, by using (6), we define

$$\Phi(W_i, W_j, \eta_{ij}) = T_{\eta_{ij}}^{-1} \phi(T_{\eta_{ij}} W_i, T_{\eta_{ij}} W_j),$$

where $\phi(W_i, W_j)$ is the numerical flux function of a 1D system, obtained from the 2D system by a projection over η_{ij} . The 1D system is defined by (8) with $\eta = \eta_{ij}$, after to neglect the term $\mathcal{P}_{\eta_{ij}^{\perp}}$. We have the system,

$$\partial_t (T_{\eta_{ij}}W) + \partial_{\eta_{ij}}F_1(T_{\eta_{ij}}W) = B_1(T_{\eta_{ij}}W)\partial_{\eta_{ij}}W.$$
 (10)

For the sediment transport model and the submarine avalanche model, presented previously, we have

$$T_{\eta}W = \begin{pmatrix} h_{1} \\ q_{1,\eta} \\ q_{1,\eta^{\perp}} \\ z_{b} \end{pmatrix}, \quad \text{and} \quad T_{\eta}W = \begin{pmatrix} h_{1} \\ q_{1,\eta} \\ q_{1,\eta^{\perp}} \\ h_{2} \\ q_{2,\eta} \\ q_{2,\eta^{\perp}} \end{pmatrix},$$

respectively. Then, for the sediment transport model, system (10) reduces to the following one:

$$\begin{cases} \partial_t h_1 + \partial_\eta (q_{1,\eta}) = 0, \\ \partial_t (q_{1,\eta}) + \partial_\eta (\frac{q_{1,\eta}^2}{h_0} + g\frac{h_1^2}{2}) = -gh_1 \partial_\eta (z_b - H), \\ \partial_t (q_{1,\eta^\perp}) + \partial_\eta (\frac{q_{1,\eta}q_{1,\eta^\perp}}{h_0}) = 0, \\ \partial_t (z_b) + \partial_\eta (q_b (h, \|(q_{1,\eta}, q_{1,\eta^\perp})\|)) = 0. \end{cases}$$
(11)

For the submarine avalanches model, system (10) corresponds to:

$$\begin{cases} \partial_{t}h_{1} + \partial_{\eta}(q_{1,\eta}) = 0, \\ \partial_{t}(q_{1,\eta}) + \partial_{\eta}(\frac{q_{1,\eta}^{2}}{h_{1}} + g\frac{h_{1}^{2}}{2}) = -gh_{1}\partial_{\eta}z_{b} - gh_{1}\partial_{\eta}h_{2}, \\ \partial_{t}(q_{1,\eta^{\perp}}) + \partial_{\eta}(\frac{q_{1,\eta}q_{1,\eta^{\perp}}}{h_{1}}) = 0, \\ \partial_{t}h_{2} + \partial_{\eta}(q_{2,\eta}) = 0, \\ \partial_{t}h_{2} + \partial_{\eta}(\frac{q_{2,\eta}}{h_{2}} + g\frac{h_{2}^{2}}{2}) = -gh_{2}\partial_{\eta}z_{b} - rgch_{2}\partial_{\eta}h_{1}, \\ \partial_{t}(q_{2,\eta^{\perp}}) + \partial_{\eta}(\frac{q_{2,\eta}q_{2,\eta^{\perp}}}{h_{1}}) = 0. \end{cases}$$
(12)

System (11) has a linearly degenerated field. And system (12) has two linearly degenerated fields. Moreover, they are associated to a passive escalar. That is, the evolution of the unknown corresponding to the passive escalar does not have influence over the other unknowns of the problem. For (11), the passive scalar is $q_{\eta^{\perp}}$. For (12), there are two passive scalars, corresponding to the unknowns $q_{1,\eta^{\perp}}$ and $q_{2,\eta^{\perp}}$.

Previously to define the numerical scheme we remark another property. The components of the flux functions corresponding to the equations for the passive scalars are related to the components of the flux corresponding to the mass conservation equations (see equations (11) and (12)).

For the mass conservation law the component of the flux function is $q_{l,\eta}$, l = 1, 2 (we denote $q_{1,\eta} = q_{\eta}$ for the sediment transport model). And the component of the flux functions corresponding to passive scalar evolution $q_{l,\eta^{\perp}}$

is
$$\left(q_{l,\eta}\frac{q_{l,\eta^{\perp}}}{h_l}\right), l = 1, 2.$$

That is, the flux corresponding to the passive scalar is the product of the component of the flux function for the mass conservation equation and the concentration of the passive scalar: $(q_{l,\eta^{\perp}}/h_l), l = 1, 2$.

Then, we can generalize the technique introduced in the definition of the HLLC method for the Shallow Water equations, by using a similar relationship. To define the numerical flux function, the component for the passive scalar is defined in terms of the numerical flux function for the mass conservation component and the concentration of the passive scalar.

In this way, the definition of $\phi(T_{\eta_{ij}}W_i, T_{\eta_{ij}}W_j)$ is done by components. In a first step we define the components of the numerical flux function corresponding to non passive scalar unkowns. In a second step we define the components of the numerical flux function associated to the passive scalars.

To define the numerical scheme we introduce the following notation. By \mathcal{N} we denote the set of index associated to the non passive scalar unknowns. We

have $\mathcal{N} = \{1, 2, 4\}$ for the sediment transport model and $\mathcal{N} = \{1, 2, 4, 5\}$, for the submarine avalanches model. We also denote by $[\phi]_{\mathcal{N}}$ the vector defined by the components of ϕ with index in \mathcal{N} .

The definition of the numerical scheme is done in the following two steps.

• Step 1: Definition of $[\phi]_{\mathcal{N}}$.

We consider a family of finite volume methods, that can be written under the following notation (See [4]):

$$[\varphi(V_i, V_j)]_{\mathcal{N}} = \frac{[F_1(V_j)]_{\mathcal{N}} + [F_1(V_i)]_{\mathcal{N}}}{2} - \mathcal{D}(V_i, V_j)([V_j - V_i]_{\mathcal{N}}).$$

By \mathcal{D} we denote the numerical viscosity matrix of the numerical scheme (see [12]). For different definitions of the matrix \mathcal{D} we obtain different methods such as Roe, Lax-Wendroff, Rusanov or Lax-Friedrichs. For example, Roe method corresponds to define

$$\mathcal{D}(V_i, V_j) = |\mathcal{A}_{ij}|,$$

the absolute value of Roe matrix. By \mathcal{A}_{ij} we denote the Roe matrix associated to system (10) for the equations of the set \mathcal{N} .

As in system (10) a nonconservative term appears, the definition of Roe matrix depends on the choice of a family of paths (See [22], [5], [23]).

For a given family of paths, $\varphi(s, [V_i]_{\mathcal{N}}, [V_j]_{\mathcal{N}})$ with $s \in [0, 1]$, verifying

$$\varphi(0, [V_i]_{\mathcal{N}}, [V_j]_{\mathcal{N}}) = [V_i]_{\mathcal{N}}, \quad \varphi(1, [V_i]_{\mathcal{N}}, [V_j]_{\mathcal{N}}) = [V_j]_{\mathcal{N}},$$

Roe matrix is defined as follows (see [22] for details),

$$\mathcal{A}_{ij}([V_j - V_i]_{\mathcal{N}}) = [F_1(V_j) - F_1(V_i)]_{\mathcal{N}} - \int_0^1 B_1(\varphi(s, [V_i]_{\mathcal{N}}, [V_j]_{\mathcal{N}}))\partial_s\varphi(s, [V_i]_{\mathcal{N}}, [V_j]_{\mathcal{N}})ds$$

We suppose that the Roe matrix \mathcal{A}_{ij} can be diagonalized, $\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{K}_{ij}\mathcal{L}_{ij}\mathcal{K}_{ij}^{-1}$, where \mathcal{K}_{ij} is the matrix defined by their eigenvectors and \mathcal{L}_{ij} is the diagonal matrix defined by the eigenvalues,

$$\mathcal{L}_{ij} = \operatorname{diag}(\lambda_{ij,l}, l = 1, ., N),$$

with N = 3 for the sediment transport model and N = 4 for the submarine avalanche one. Then, the absolute value of Roe matrix is defined as follows,

$$|\mathcal{A}_{ij}| = \mathcal{K}_{ij}|\mathcal{L}_{ij}|\mathcal{K}_{ij}^{-1}$$
, with $|\mathcal{L}_{ij}| = \operatorname{diag}(|\lambda_{ij,l}|, l = 1, ., N)$.

• Step 2: In this second step we define the components of the numerical flux functions corresponding to the equations of the passive escalar. For the sediment transport model we define $[\phi]_3$ and for the submarine avalanches model we define $[\phi]_3$ and $[\phi_6]$. The third components are defined un terms of the first components of the numerical flux functions, and the sixth component in terms of the fourth component of the numerical flux functions.

Modelling and numerical simulation of submarine

By following the idea of HLLC method we propose the following definitions:

$$[\phi]_3 = \left([\phi]_1 \right) \mathcal{C}^*_{1,\eta_{ij}^{\perp}}, \quad [\phi]_6 = \left([\phi]_3 \right) \mathcal{C}^*_{2,\eta_{ij}^{\perp}}$$

By $C_{l,\eta_{ij}^{\perp}}^{*}$, l = 1, 2 we denote an uncentered approximation of the concentration of pasive scalar, $(q_{l,\eta_{ij}^{\perp}}/h_l)$, l = 1, 2, over the edge E_{ij} . The definition is the following one:

$$\mathcal{C}_{l,\eta_{ij}^{\perp}}^{*} = \begin{cases} q_{l\,i,\eta_{ij}}/h_l & \text{if } S_{l,ij}^{*} < 0, \\ q_{l\,j,\eta_{ij}}/h_l & \text{if } S_{l,ij}^{*} > 0, \end{cases} \quad l = 1,2$$
(13)

The value $S_{l,ij}^*$, l = 1, 2 is an approximation of the velocity $(q_{l,\eta_{ij}}/h_l)$, l = 1, 2 over the edge E_{ij} . We can use for example $S_{l,ij}^* = u_{l,ij}$, the averaged Roe velocity. Some other definitions are possible, as the one proposed in [10].

5 Numerical tests

5.1 Test 1: Bedload sediment transport: expansion angle

The objective of this test is to compare classical Grass model with the models proposed in [31], described in Section 2. We have denoted these two models by $\mathcal{M}S1$ and $\mathcal{M}S2$.

In order to understand the properties and differences between Grass, $\mathcal{M}S1$ and $\mathcal{M}S2$ models, we consider the test that we describe in what follows.

When the interaction between the fluid and the sediment is weak, the spread angle of a sediment bump can be estimated analytically. DeVriend in [6, 7] deduces the following formula for the spread angle, α :

$$\tan \alpha = \frac{3 T_u \sqrt{3}}{9 T_u - 8 T_h}.\tag{14}$$

where T_u and T_h is defined in function of the solid transport discharge expressed as a function of the height of the fluid and the velocity modul: $q_s = q_s(h, |u|)$. Concretely,

$$T_u = \frac{u}{S_b(h,u)} \frac{\partial q_s(h,|u|)}{\partial |u|} - 1, \quad T_h = \frac{h}{q_s(h,|u|)} \frac{\partial q_s(h,|u|)}{\partial h} - 1.$$

For $\mathcal{M}S1$ model we obtain,

$$q_s(h, |u|) = A h |u|^{k+1}.$$

Then, by applying (14) we have,

$$\tan \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

That is, the spread angle is independent of the parameter k. We obtain that the spread angle is $\alpha = 30^{\circ}$, for any value of k.

For $\mathcal{M}S2$ model we have

$$q_s(h, |u|) = A h|u|(1 + log(1 + |u|^2)).$$

We also obtain that $\alpha = 30^{\circ}$ for any value of k. Nevertheles, for Grass model, defined by

$$q_s(h, |u|) = A_g |u|^{k+1}$$

we obtain that

$$\tan \alpha = \frac{3k\sqrt{3}}{9k\sqrt{3}+8}.$$

That is, the spread angle depends on the value of parameter k. Moreover, we obtain that the limit of the angle is 30° . A typical value for parameter k is k = 2. For this value we obtain $\alpha = 21.78^{\circ}$.

To study the spread angle we simulate numerically the evolution of a sediment bump for these three models. The constant of interaction is set to A = 0.01. The domain is $[0, L] \times [0, L]$ with L = 1000. The mesh of the domain is composed by 7600 edge type control volumes. As boundary condition we impose $q_y = 0$ for y = 0 and y = L. At x = 0 we impose the discharge $\vec{q} = (10, 0)$. And at x = L we impose free boundary conditions. And as initial conditions,

$$h(x, y, 0) = 10.1 - z_b(x, y, 0), \quad q_x(x, y, 0) = 10, \quad q_y(x, y, 0) = 0;$$

with

$$z_b(x, y, 0) = \begin{cases} 0.1 + \sin^2\left(\frac{\pi(x-300)}{200}\right) \sin^2\left(\frac{\pi(y-400)}{200}\right) & \text{if } 300 \le x \le 500, \\ 0.1 & 400 \le y \le 600, \\ 0.1 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

In Figure 4 we present the evolution of the sediment bump. We superpose the level curves corresponding to the initial condition, an intermediate time, and the final time of simulation. The final time simulation is t = 36000 s. for $\mathcal{MS1}$ and Grass model. Nevertheless, for $\mathcal{MS2}$ model the final time is t = 14000 s. In these figures we also represent the lines corresponding to $\alpha = 21.78^{\circ}$ and $\alpha = 30^{\circ}$.

In Figure 4(a) we observe that, as predicted by the approximation of DeVriend's formula, the numerical results obtained with Grass model follows an spread angle close to $\alpha = 21.78^{\circ}$. And in Figure 4(b) we observe that the spread angle for model $\mathcal{M}S1$ is closer to $\alpha = 30^{\circ}$.

In Figure 4(c) we compare the level curves for the final time for Grass and $\mathcal{M}S1$ models. We can observe that altough the spread angle for these models are different, the evolution for the position of the bump is nearly analogous. Nevertheless, as we can see in Figure 4(d), when we compare it to model $\mathcal{M}S2$, with spread angle $\alpha = 30^{\circ}$, the evolution time of the bump is very different.

The difference in the evolution of the sediment bump for Grass or $\mathcal{M}S1$ model in comparison with $\mathcal{M}S2$ is the logarithmic formulation. Usually, the



- (c) t = 36000 s. MS1 model (black lines) (d) MS2 model, t = 14000 s. and Grass model (magenta lines).

Figure 4: Spread angles. Level curves of the sediment bump evolution

laboratory experiments are done with small velocities of the fluid. Following these results, the proposed models are written in terms of a power of the velocity. When we use the model for higger velocities, as we are using a power of the velocity, the values of the solid transport discharge are very high. Nevertheless, the formulation in form of logaritmic allows to control the range of the solid transport discharge with high velocities.

5.2 Test 2: submarine avalanche

In this test we present an application of the submarine avalanche model. We consider that the fixed bottom is flat except by a bump in form of rectangle. And we define the sediment layer as a cilinder next to the bump. We study the influence of the bump, by comparing the amplitude and velocity of the front in the water surface.

The domain is $[0, 1] \times [0, 1]$ that is discretized by a regular mesh of 150×150 volumes. The CFL condition is 0.8. We impose free boundary conditions over all the edges of the domain. The fixed bottom function is

$$z_b(x,y) = \begin{cases} 0.025 & \text{if } x \in [0.6, 0.7], \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

As initial conditions we impose fluid and sediment at rest, $\vec{q}_1 = 0$, $\vec{q}_2 = 0$, constant free surface and a cilindrical profile for the sediment layer:

$$h_2(x,y) = \begin{cases} 0.05 & \text{if } (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 \le 0.01, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$
$$h_1(x,y) = 0.1 - h_2(x,y) - z_b(x,y).$$

The final time is set to t = 0.36 s. and the frictional angle is $\delta_0 = 7^{\circ}$. In Figure 5 we can see the evolution of the sediment layer and the perturbation of the water surface. The water surface is pictured with colors in function of the module of the velocity. Red colors correspond to higger velocities. We can observe that the amplitude of the waves to the left and to the right of the rectangle are not exactly the same. Some differences on the velocity module can be also appreciated.

In Figure 6 we present a cut of the profiles at y = 0.5. This figure has two columns. At the left colum we present the evolution of the free surface and the sediment layer. We can observe that the amplitude of the wave fronts are different. At the right column of Figure 6 we present a comparison of the velocities in the following form: we present the symmetric graph from x = 0.5, in order to compare the velocity fronts. We can observe the influence of the bottom on the velocity. The velocity of the front is smaller to the right of the rectangle bump. And consequently the position of the wave front is delayed with respect to the position of the front to the left of the rectangle bump.



Figure 5: Submarine avalanche and generated tsunami

Acknowledgments

I would like to thanks all people who I have had the oportunity to collaborate with in different research papers. Specially to all the components of the research groups of Sevilla and Málaga directed by professors Chacón and Parés.

This research has been partially supported by the Spanish Government Research project MTM2006-01275 and P06-RNM-01594.

References

- M.J. Castro Díaz, T. Chacón Rebollo, E.D. Fernández-Nieto, J.M. González Vida. C. Parés. Well-balanced finite volume schemes for 2D non-homogeneous hyperbolic systems. Application to the dam break of Aznalcóllar. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 197, no. 45-48, 3932-3950 (2008).
- [2] M.J. Castro Díaz, E.D. Fernández Nieto, A.M. Ferreiro. Sediment transport models in Shallow Water equations and numerical approach by high order finite volume methods. Computers and Fluids, 37(3): 299-316, (2008).
- [3] M.J. Castro, E.D. Fernández-Nieto, A. Ferreiro, J.A. García-Rodríguez, C. Parés. *High order extensions of Roe schemes for two-dimensional* nonconservative hyperbolic systems. J. Sci. Comput. 39, no. 1, 67-114 (2009).



Figure 6: Left: Cut over the central edge of the domain (Water surface: continuous blue line. Sediment interface: dashed red line. Bottom: continuous black line). Right: Velocity comparison for the cut, from the center of the domain (Front to the right: continuous red line. Front to the left: dashed blue line)

- [4] T. Chacón Rebollo, A. Domínguez, E.D. Fernández-Nieto. A family of stable numerical solvers for the shallow water equations with source terms. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 192, no. 1-2, 203-225 (2003).
- [5] G. Dal Maso, P.G. LeFloch, F. Murat. Definition and weak stability of nonconservative products. J. Math. Pures Appl. 74:483-548, (1995).
- [6] H.J. De Vriend. 2DH Mathematical Modelling of Morphological Evolutions in Shallow Water. Coastal Engineering, vol, 11 1-27 (1987).
- H.J. De Vriend. Analysis of Horizontally Two-Dimensional Morphological Evolutions in Shallow Water. J. Geophys. Res. vol. 92, C4 3877-3893 (1987).
- [8] H.A. Einstein Formulas for the transportation of bed load. Trans. ASCE. 107: 561-575, (1942).
- [9] E. D. Fernández-Nieto, F. Bouchut, D. Bresch, M.J. Castro, A. Mangeney. A new Savage-Hutter type model for submarine avalanches and generated tsunami. J. Comput. Phys., 227(16): 7720-7754, (2008).
- [10] E.D. Fernández-Nieto, D. Bresch, J. Monnier. A consistent intermediate wave speed for a well-balanced HLLC solver. C. R. Math. Acad. Sci. Paris 346, no. 13-14, 795-800 (2008).
- [11] A. Ferreiro Ferreiro. Desarrollo de técnicas de post-proceso de flujos hidrodinámicos, modelización de problemas de transporte de sedimentos y aproximación numérica mediante técnicas de volúmenes finitos. Tesis Doctoral. Universidad de Sevilla (2006).
- [12] E. Godlewski E, P.A. Raviart. Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws. New York: Springer-Verlag, (1996).
- [13] A.J. Grass. Sediments transport by waves and currents. SERC London Cent. Mar. Technol., Report No. FL29, (1981).
- [14] J. Hudson. Numerical technics for morphodynamic modelling. Tesis doctoral. University of Whiteknights (2001).
- [15] P.Y. Julien. Erosion and Sedimentation. Cambridge (1994).
- [16] A.A. Kalinske Criteria for determining sand transport by surface creep and saltation. Trans. AGU. 23(2): 639–643, (1942).
- [17] E. Meyer-Peter, R. Müller. Formulas for bed-load transport. Rep. 2nd Meet. Int. Assoc. Hydraul. Struct. Res., Stockholm: 39-64, (1948).
- [18] T. Morales, M.J. Castro, C. Parés, E.D. Fernández-Nieto. On a shallow water model for the simulation of turbidity currents. Communications in computational physics, 848-882, vol. 6, (2009).

- [19] A. Mangeney-Castelnau, J.P. Vilotte, M.O. Bristeau, B. Perthame, F. Bouchut, C. Simeoni, S. Yernini. Numerical modeling of avalanches based on Saint-Venant equations using a kinetic scheme. J. Geophys. Res.108 (B11), 2527 (2003).
- [20] S. McDougall, O. Hungr, O. Dynamic modelling of entrainment in rapid landslides. Can. Geotech. J. 42, 1437-1448 (2005).
- [21] P. Nielsen. Coastal Bottom Boundary Layers and Sediment Transport. World Scientific Publishing, Singapore, Advanced Series on Ocean Engineering, 4, (1992).
- [22] C. Parés, M.J. Castro. On the well-balance property of Roe's method for nonconservative hyperbolic systems. Applications to shallow-water systems. ESAIM: M2AN, 38(5):821–852 (2004).
- [23] C. Parés, M.L. Muñoz-Ruiz. On some difficulties of the numerical approximation of nonconservative hyperbolic systems. Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. (SEMA), 47: 23-52 (2009).
- [24] E. Peña González. Estudio numérico y experimental del transporte de sedimentos en cauces aluviales. Tesis Doctoral. Universidade da Coruña, (2002).
- [25] M. Pirulli, A. Mangeney. Result of Back-Analysis of the Propagation of Rock Avalanches as a Function of the Assumed Rheology. Rock Mech. Rock Engng., 41(1), 59-84, (2008).
- [26] O. Pouliquen, Scaling laws in granular flows down rough inclined planes. Phys. Fluid. 11, 542-548 (1999).
- [27] M. Quecedo, M. Pastro, M.I. Herreros, J.a. Fernández Merodo, Qinfen Zhang, Comparison of two mathematical models for solving the dam break problem using the FEM method. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 194, 3984-4005 (2005).
- [28] S.B. Savage, K. Hutter, The dynamics of avalanches of granular materials from initiation to run-out, Acta Mech. 86, 201-223 (1991).
- [29] E.F. Toro. Shock-Capturing Methods for Free-Surface Shallow Flows. Wiley and Sons Ltd. (2001).
- [30] L.C. Van Rijn. Sediment transport (I): bed load transport. J. Hydraul. Div., Proc. ASCE, 110: 1431-56, (1984).
- [31] J.D. Zabsonré, C. Lucas, E.D. Fernández-Nieto. An energetically consistent viscous sedimentation model. Math. Models Methods Appl. Sci. 19, no. 3, 477-499 (2009).

Enrique es licenciado en Ciencias Matemáticas en 1999 por la Universidad de Sevilla. También es doctor en Matemáticas en 2003 por la Universidad de Sevilla, recibiendo el Premio del Ayuntamiento de la ciudad hispalense a la mejor tesis doctoral en el área científico técnica. Actualmente es profesor Titular en el Departamento de Matemática Aplicada I de la Universidad de Sevilla.



En sus inicios la investigación se ha centrado en el estudio de esquemas de volúmenes finitos bien equilibrados para sistemas hiperbólicos no homogéneos y sus aplicaciones. Posteriormente, se ha dedicado al estudio de modelos y simulación numérica de flujos someros para problemas de erosión en avalanchas, avalanchas submarinas, transporte de sedimento y avalanchas de materiales rígido-viscoplásticos, entre otros.

Ha realizado varias estancias de investigación en la Universidad de Savoie, Instituto de Física Globe y Escuela Normal Superior de

París, en Francia. Cabe destacar un gran número de colaboraciones con investigadores de varias universidades francesas, Universidad de Sevilla y Universidad de Málaga.

También ha codirigido dos tesis doctorales, con el profesor M.J. Castro de la Universidad de Málaga y el profesor D. Bresch de la Universidad de Savoie, respectivamente.

Título:	Análisis numérico de modelos matemáticos
	Y PROBLEMAS INVERSOS EN TECNOLOGÍA DE
Doctorando:	Juan-Antonio Infante del Río.
Director/es:	Angel Manuel Ramos del Olmo José María Rey Cabezas.
Defensa: Calificación:	24 de noviembre de 2009, Madrid. Sobresaliente cum laude por unanimidad.

Resumen:

Una de las tecnologías que pueden usarse para el procesado de alimentos desde el punto de vista industrial, sin degradar las propiedades organolépticas y nutricionales de los mismos, es el tratamiento a altas presiones. Su desarrollo a nivel de investigación arrancó a principios de los años noventa (del siglo pasado), materializándose sus primeras aplicaciones comerciales ya desde mediados de la misma década.

El objetivo de esta memoria es la modelización de este tipo de procesos, haciendo especial énfasis en los aspectos numéricos, es decir, en su simulación computacional, con vistas a marcar pautas que permitan diseñar metodologías que contribuyan a la optimización de los tratamientos. La exposición de los resultados se ha estructurado en tres partes. La primera de ellas se centra en la modelización del tratamiento de alimentos mediante altas presiones y su simulación numérica; la segunda y la tercera versan sobre la identificación aproximada de sendos parámetros termofísicos que aparecen en los modelos presentados en la primera parte, para versiones simplificadas de los mismos.

Los modelos que se utilizan en este contexto son complejos (ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos débilmente compresibles acopladas con transferencia de calor) y requieren sofisticadas herramientas numéricas para su resolución aproximada. Pero además, en las ecuaciones aparecen un conjunto de coeficientes ligados a parámetros físicos (densidad, calor específico, conductividad térmica, coeficiente de intercambio de calor, coeficiente de dilatación, etc.) característicos de los materiales en los que están planteadas. Se da la circunstancia de que los valores de estos coeficientes, que son sensibles a los cambios de presión y temperatura, no suelen ser conocidos para presiones distintas de la atmosférica.

Esto hace que para aproximar numéricamente el comportamiento del modelo haya que prescribir dichos valores mediante argumentos heurísticos o basados en metodologías experimentales, como se hace en el estudio llevado a cabo en el Capítulo 1. Allí se presenta un modelo matemático que permite trabajar con fluidos compresibles. Mediante su simulación numérica se consigue describir el comportamiento térmico y fluidodinámico de la muestra de alimento, cuando es sometida a un tratamiento a altas presiones.

Por otro lado, puesto que parte de la degradación de los alimentos la producen enzimas presentes en ellos, es importante que los tratamientos aplicados consigan reducir al máximo su actividad. Con la vista puesta en este objetivo, el modelo termofluidodinámico citado se acopla con ecuaciones cinéticas que modelizan la actividad de diversas enzimas. Mediante su resolución numérica se consigue estimar la actividad de estas enzimas tras el uso de diversos tratamientos.

Existen en la literatura otros trabajos con estos objetivos, aunque en ninguno se explicitan los modelos en la medida en que aquí se hace; además, nuestra forma de acoplar la actividad enzimática con la transferencia de masa y calor es original, pues se realiza a posteriori, una vez aproximada la distribución de temperatura. Asimismo, nosotros presentamos un estudio comparativo del modelo completo frente a otros modelos más sencillos; este estudio es de gran interés, pues puede justificar el uso de modelos simplificados en los primeros pasos de una eventual optimización del diseño de los tratamientos (los resultados obtenidos para las enzimas estudiadas dan prueba de ello). Finalmente, en esta primera parte llevamos a cabo un novedoso análisis de sensibilidad de los modelos respecto a errores en los datos; la conveniencia de conocer cómo de sensibles se muestran los modelos a estos errores se justifica, no sólo en la probable presencia de errores de medición, sino en la citada metodología con la que se determinan los parámetros termofísicos que aparecen en las ecuaciones que gobiernan los modelos. Este análisis muestra que dicha sensibilidad depende, en gran medida, de la enzima en consideración.

La motivación del trabajo que se recoge en las partes segunda y tercera de esta memoria es la mencionada falta de información relativa a los parámetros físicos de este tipo de problemas. Se plantea la posibilidad de identificar los valores que, para cada material en concreto, toman esos coeficientes en un rango de temperaturas y presiones dados. La idea es realizar una cantidad (lo menor posible) de experimentos en los que se realicen mediciones de la temperatura (magnitud sencilla de medir) y, a partir de ellas, intentar determinar los valores de algunos de los parámetros. Esto nos coloca en el contexto de los problemas inversos en los que, a partir de cierto conocimiento de la solución de un problema, se pretende obtener información sobre el modelo que lo gobierna. En este contexto se diseñan algoritmos numéricos mediante los que se consigue identificar dos de estos parámetros.

En concreto, en la segunda parte se suponen simplificaciones del modelo que llevarán a plantearlo como un problema de valor inicial en dimensión uno, en el que el parámetro que se pretende identificar es un coeficiente de intercambio de calor que puede depender de la presión (que se supone conocida) y de la temperatura (que es la incógnita de la ecuación diferencial ordinaria). En la tercera parte, el modelo simplificado se plantea como una ecuación en derivadas parciales con condiciones de contorno mixtas, siendo el coeficiente de conductividad térmica el objeto de la identificación. Abordamos la identificación de estos coeficientes en el supuesto de que la única información que se tiene sobre ellos es meramente cualitativa (continuidad, positividad,...). Presentamos una variada gama de metodologías (experimentos especialmente diseñados, algoritmos basados en la diferenciación aproximada, estrategias de regularización, métodos de colocación) todas ellas originales en este contexto.

Los métodos utilizados en esta memoria se han mostrado eficaces para resolver los problemas planteados. Han proporcionado resultados adecuados para la aproximación de los coeficientes que se pretendía identificar y proporcionan una muy satisfactoria aproximación de la temperatura para las distintas simulaciones que, utilizando tal identificación aproximada, se han realizado para una variada gama de datos de partida.
XIII PREMIO SEMA AL JOVEN INVESTIGADOR

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE MATEMÁTICA APLICADA

PREÁMBULO

La Sociedad Española de Matemática Aplicada (SēMA), en cumplimiento de su objetivo de contribuir al desarrollo en nuestro país de las Matemáticas y sus aplicaciones y, más en concreto, de promover y estimular la investigación y procurar medios para efectuarla, consciente del notable desarrollo que las Matemáticas están experimentando y de la necesidad de promover el interés de las jóvenes generaciones por la tarea de la creación científica, convencida del papel positivo que el aprecio de la comunidad juega en la vida científica de los investigadores y siguiendo con una tradición honrosa y habitual tanto en las Artes como en las Ciencias, convoca el "Décimotercer Premio SēMA al Joven Investigador", según las bases que se adjuntan.

BASES GENERALES

- 1. La Sociedad Española de Matemática aplicada (SēMA) convoca el "Premio SēMA al Joven Investigador", que se concederá anualmente.
- 2. Son posibles candidatos todos los investigadores españoles que, a la fecha del límite de presentación de candidaturas, no rebasen la edad de 33 años. También pueden serlo aquellos investigadores de otras nacionalidades que tengan un puesto de trabajo permanente en una Universidad o Centro de investigación español y cumplan la condición de edad. No pueden concurrir al Premio candidatos galardonados en convocatorias precedentes.
- 3. El Premio está destinado a promover la excelencia en el trabajo matemático original en todas las ramas de las Matemáticas que tienen una componente aplicada. Su objetivo es premiar la contribución personal del candidato. El límite de edad fijado pretende señalar candidatos que hayan tenido tiempo de desarrollar su creatividad matemática independiente tras la etapa formativa correspondiente a la Tesis Doctoral. El Premio tiene así por objetivo abrirles el camino de su periodo de madurez y reconocer al mismo tiempo sus capacidades demostradas.
- 4. Los méritos serán juzgados por un Comité Científico de cinco miembros, nombrado por el Consejo Ejecutivo de la Sociedad entre investigadores de probado prestigio. Este Comité tendrá su propio reglamento de funcionamiento. En todo caso, será presidido por el Presidente de la

Sociedad u otro miembro del Consejo Ejecutivo en quien delegue, no pudiendo ser miembros del Comité Científico más de dos miembros del Consejo Ejecutivo.

- 5. Los candidatos habrán de presentar, dentro del plazo que se cite, una Memoria exponiendo la trayectoria vital y los méritos que concurren, un curriculum normalizado, así como otros documentos que puedan ser pertinentes para acreditar sus contribuciones originales a las Matemáticas y sus aplicaciones. Las candidaturas pueden ser presentadas también por otros investigadores. El Comité se reserva el derecho de recabar la información complementaria necesaria del candidato o de quien le haya presentado
- 6. El galardonado con el Premio recibirá de la Sociedad un Diploma acreditativo y una cuantía que será establecida en cada convocatoria por la Sociedad.
- 7. La Sociedad requerirá al candidato galardonado un resumen de su trabajo de investigación escrito en estilo divulgativo, con una extensión a convenir entre las 6 y las 20 páginas para su publicación en el Boletín de la Sociedad. Este resumen puede formar parte de la Memoria mencionada en el punto 5.
- 8. El fallo del concurso es irrevocable. El Comité acompañará la concesión del Premio de una exposición de los méritos hallados en el candidato galardonado. Por lo demás, las deliberaciones y resoluciones del Comité serán regidas por su reglamento.

BASES PARTICULARES DE LA CONVOCATORIA DE 2010

- La fecha límite de presentación de candidaturas es el 30 de abril de 2010. Podrán concursar por tanto las personas que hayan nacido después del 30 de abril de 1976.
- 10. La documentación presentada constará de la Memoria y el curriculum citados, así como copia de las cinco contribuciones más importantes del investigador a las Matemáticas y sus aplicaciones, todo ello por quintuplicado.

Se recomienda a los candidatos que presenten su propia candidatura que la Memoria se adecúe o en su caso contenga el resumen del trabajo de investigación referido en el apartado 7.

11. La documentación debe ser dirigida a

Prof. Carlos Vázquez Cendón Premio SēMA Joven Investigador 2009 Departamento de Matemáticas Facultad de Informática Universidad de La Coruña 15071 - La Coruña

- 12. La cuantía actual del Premio es de 1800 euros. El Premio es indivisible. Además, el candidato galardonado quedará eximido del pago de las cuotas como socio de SēMA correspondientes a los años 2011 y 2012. En caso de no ser miembro de SēMA, pasaría automáticamente a serlo.
- 13. El Premio será fallado antes del 31 de agosto de 2010 y será entregado con ocasión de la Asamblea anual de la Sociedad, en el marco de la "XIV Escuela Jacques-Louis Lions Hispano-Francesa sobre Simulación Numérica en Física e Ingeniería", se celebrará en A Coruña, entre el 6 y el 10 de septiembre de 2010.

A Coruña, a 1 de diciembre de 2009

PREMIO AL MEJOR ARTÍCULO DEL BOLETÍN SEMA

PREÁMBULO

La Sociedad Española de Matemática Aplicada (SēMA), consciente del notable desarrollo que las Matemáticas están experimentando, del incremento de su influencia sobre todos los aspectos de la vida en las sociedades desarrolladas y de la necesidad de estimular el interés del público por la cultura científica, en cumplimiento de sus objetivos, anuncia el "Premio al mejor artículo del Boletín SēMA", según las bases que se adjuntan.

Es uno de los intereses principales de SēMA promover la divulgación de las Matemáticas, su relevancia y su eficacia. Dada la enorme variedad de intereses aplicados de las Matemáticas, las Bases del concurso pretenden dar preferencia a los temas que tradicionalmente han estado ligados a SēMA de una u otra manera. Muy en especial, deben ser mencionados el análisis teórico y numérico, el control y los aspectos computacionales de sistemas que permiten modelar fenómenos con origen en otras Ciencias.

BASES GENERALES

- 1. La Sociedad Española de Matemática Aplicada (SēMA) concederá anualmente el "Premio al mejor artículo del Boletín SēMA".
- Serán posibles candidatos todos los artículos publicados en los volúmenes del Boletín SēMA del año indicado en la convocatoria.
- 3. El artículo premiado será elegido por un Comité Científico de cinco miembros nombrados por el Comité Ejecutivo de la Sociedad. El Comité estará formado por el Editor Jefe del Boletín, el Presidente de la Sociedad u otro miembro del Comité Ejecutivo en quien delegue, y tres miembros del Comité Científico del Boletín propuestos por el Editor Jefe, quien actuará como presidente del Comité. Una vez constituido, el Comité tendrá sus propias normas de funcionamiento.
- 4. El Premio tendrá una dotación económica, a repartir entre los autores del artículo. La concesión del Premio llevará aparejada la entrega de un diploma acreditativo y las certificaciones correspondientes. Además, los autores quedarán eximidos del pago de las cuotas como socios de SēMA durante un año. En caso de no ser miembros de SēMA, pasarían automáticamente a serlo de manera gratuita durante ese período.
- 5. El fallo del Premio es irrevocable. El Comité acompañará la concesión del Premio de una exposición de los méritos hallados en el artículo galardonado.

6. El trabajo premiado deberá ser presentado por alguno de sus autores en alguna de las actividades organizadas por la Sociedad en el año en que se otorga, durante la cual se entregará el diploma.

BASES DEL PREMIO AL MEJOR ARTÍCULO DEL BOLETÍN SēMA 2009

- Serán posibles candidatos al "Premio al mejor artículo del Boletín SEMA 2009" todos los artículos publicados en el Boletín SEMA en el año 2009.
- 8. La dotación económica de este Premio es de 1.500€.
- 9. El fallo del Comité se hará público antes del 30 de abril de 2010.
- 10. El trabajo premiado deberá ser presentado por alguno de sus autores en el contexto de la Escuela Hispano-Francesa de Simulación Numérica en Física e Ingeniería, que se celebrará en A Coruña, del 6 al 10 de septiembre de 2010. Asimismo, en dicho evento se entregará el correspondiente Diploma acreditativo.

BOLETIN SEMA BEST PAPER AWARD

The Sociedad Española de Matematica Aplicada (SēMA), aware of the remarkable development of Applied Mathematics and of its growing influence in the life of modern societies, and aware as well of the necessity to encourage the transfer of scientific knowledge within our community, is proud to announce the "Boletín SēMA Best Paper Award", for outstanding papers published in the Boletín SēMA. The guidelines of this prize are established below.

One of the main interests of SēMA is to promote the dissemination of Applied Mathematics, emphasizing its relevance and its potential. There is an increasingly large body of applied interests in Mathematics, and the guidelines below seek to enforce those subjects that traditionally have formed the core of the scientific activities in SēMA, that is theoretical and numerical analysis, control theory and computational techniques in mathematical modeling in science.

GENERAL GUIDELINES

- 1. The Sociedad Española de Matemática Aplicada (SēMA) will award the "Boletin SēMA Best-Paper Award" on a yearly basis.
- 2. All papers published in the volumes of the Boletín SēMA of the corresponding year will be eligible for the prize.

- 3. There will be an ad-hoc prize Committee, composed by 5 members: The editor in chief of the Boletín SēMA, who will act as chair of the committee, the president of SēMA (or a member of the executive committee of SēMA acting in his name) and three members of the scientific committee of the Boletín SēMA, proposed by the editor in chief and appointed by the executive committee of the Society. The prize committee will devise its own procedures to carry out the selection process.
- 4. The award includes a diploma containing the citation and a cash prize to be shared among the authors of the awarded paper. If the authors are SēMA members, the SēMA membership fee will be waived for a one year period. If any of the authors is not a member of SēMA, he or she will be automatically granted membership in the Society, and the fee will be waived for one year.
- 5. The decision of the Committee is final. The committee will report on the merits found in the awarded paper.
- 6. One of the authors of the awarded paper should agree to deliver a presentation about the contents of the paper in one of the activities organized by SēMA during the year in which the prize is awarded.

BOLETÍN SEMA BEST PAPER AWARD 2009. GUIDELINES

- 7. All papers published in the Boletín SēMA in 2009 are elegible for the "Boletin SeMA Best Paper Award".
- 8. The award includes a cash prize of $1.500 \in$.
- 9. The decision of the committee will be published before April 30th 2010.
- 10. The Best-Paper of the year will be the object of a lecture, delivered by one of its authors, within the Spanish-French School of Numerical Simulation in Physics and Engineering, that will be held in A Coruña from September 6 to 10, 2010. The corresponding diploma will be given at this same conference.

Tipo de evento:	Conference
Nombre:	European Student Conference in Mathema- tics (EUROMATH 2010)
Lugar:	Bad Goisern, AUSTRIA
Fecha:	25–28 February, 2010
Organiza:	Cyprus Mathematical Society and THALES Foun- dation, in cooperation with European Mathemati- cal Society Sonderpädagogisches Zentrum Gmunden Süd and Department of Social and Political Science, University of Cyprus
Información: E-mail: WWW:	<pre>cms@cms.org.cy, makrides.g@ucy.ac.cy http://www.euromath.org/</pre>

Tipo de evento:	Course
Nombre:	DOC-COURSE: CONSTRUCTIVE APPROXIMATION,
-	Optimization and Mathematical Modeling
Lugar:	Facultad de Matemáticas, Universidad de Sevilla,
	Campus Reina Mercedes, 41012 Sevilla, SPAIN
Fecha:	March 1st–May 28th, 2010
Organiza:	Antonio Durán Guardeño (duran@us.es) Enrique
	Fernández–Cara (cara@us.es)
Información:	
E-mail:	admin-imus@us.es
WWW:	http://institucional.us.es/doc-course-imus

Tipo de evento: Nombre:	Escuela Second International School on Geometry and Physics. Geometric Langlands and Gauge Theory
Lugar:	Centre de Recerca Matemàtica (CRM), Bellaterra,
	Barcelona, SPAIN
Fecha:	March 17 to 26, 2010
Organiza:	Luis Álvarez–Cónsul, ICMAT - CSIC, Madrid, Çhairman"; José Ignacio Burgos Gil, ICMAT - CSIC, Madrid; Oscar García-Prada, ICMAT - CSIC, Madrid; Ignasi Mundet i Riera, Universitat de Barcelona
Información:	
E-mail:	aclanglands@crm.cat
WWW:	http://www.crm.cat/Activitats/Activitats/ 2009-2010/aclanglands/web-aclanglands/ default.asp

Tipo de evento:	Workshop
Nombre:	THE TUTORIAL WORKSHOP: LINEAR MATRIX INEQUALITIES AND POLYNOMIAL OPTIMIZATION (LMIPO)
Lugar:	Mathematics Department, UCSD, USA
Fecha:	March 22–25, 2010
Organiza:	Jiawang Nie (njw@math.ucsd.edu), Bill Helton (helton@math.ucsd.edu)
Información:	
E-mail:	Jiawang Nie (njw@math.ucsd.edu), Bill Helton (helton@math.ucsd.edu)
WWW:	http://www.math.ucsd.edu/~njw/SCOD/ LMIP0_2009/lmipo.html

Tipo de evento: Nombre:	Escuela 2nd Spring School "Analytical and Numeri- cal Aspects of Evolution Equations"
Lugar:	TU Berlin, GERMANY
Fecha:	March 28 – April 1, 2010
Organiza:	Etienne Emmrich, Petra Wittbold
Información:	
E-mail:	emmrich@math.uni-bielefeld.de,
	wittbold@math.tu-berlin.de
WWW:	http://www.math.tu-berlin.de/spring10/

Tipo de evento:	Conferencia
Nombre:	SIAM Conference on Mathematical Aspects
	of Materials Science (MS10)
Lugar:	Philadelphia, Pennsylvania, USA
Fecha:	May 23–26, 2010
Organiza:	David Kinderlehrer, Carnegie Mellon University;
	Robert V. Kohn, Courant Institute of Mathematical
	Sciences, New York University
Información:	
E-mail:	kohn@courant.nyu.edu
WWW:	http://www.siam.org/meetings/ms10/

Tipo de evento:	Conferencia
Nombre:	ICCM 2010 : "INTERNATIONAL CONFERENCE ON
Lugar:	Tokyo, JAPAN
Fecha:	May 26–28, 2010
Organiza:	World Academy of Science, Engineering and Technology
Información: E-mail: WWW:	http://www.waset.org/conferences/2010/tokyo/ iccm/

Tipo de evento: Nombre:	Meeting Joint SIAM/RSME-SCM-SEMA Meeting Emerging Topics in Dynamical Systems AND Partial Differential Equations (DSP- DEs'10)
Lugar:	Barcelona, SPAIN
Fecha:	May 31st–June 4th, 2010
Organiza:	José A. Carrillo (Chair), ICREA & Universitat Autònoma de Barcelona; Coloma Ballester, Univer- sitat Pompeu Fabra; Carme Calderer, SIAG/APDE, University of Minnesota; José A. Cañizo, Uni- versitat Autònoma de Barcelona; Irene M. Gam- ba, SIAG/APDE, University of Texas at Austin; Alex Haro, Universitat de Barcelona; Joan Solà- Morales, Universitat Politècnica de Catalunya; Tere Martínez-Seara, Universitat Politècnica de Catalun- ya; Mary Lou Zeeman, SIAG/DS, Bowdoin College
Información: E-mail: WWW:	dspdes2010@cimne.upc.edu http://www.siam.org/meetings/dspdes/

Tipo do overto:	Conforencia
Tipo de evento.	Conterencia
Nombre:	TAMC 2010 – 7th Annual Conference on
	Theory and Applications of Models of
	Computation
Lugar:	Charles University, Prague, CZECH REPUBLIC
Fecha:	7–11 June 2010
Organiza:	Tomas Dvorak, Jiri Fiala (chair), Petr Gregor, Petr
	Kolman, Anna Kotesovcova, Martin Mares, Ondrej
	Pangrac
Información:	
E-mail:	
WWW:	http://www.tamc2010.cz/

Tipo de evento: Nombre:	Escuela Gene Golub SIAM Summer School 2010. International Summer School on Numerical Linear Algebra
Lugar:	Selva di Fasano, Brindisi, ITALY
Fecha:	June 7–18, 2010
Organiza:	Daniel B. Szyld, SIAM Activity Group on Linear Algebra
Información:	
E-mail:	ISSNLA2010@ba.iaccnr.it, Daniel B. Szyld
WWW:	(szyld@temple.edu) http://www.ba.cnr.it/ISSNLA2010/

Tipo de evento: Nombre:	Conferencia 13th International Conference on "Hyper- Bolic Problems: Theory, Numerics and Ap- Plications" (HYP2010)
Lugar:	Beijing, CHINA
Fecha:	June 15–19, 2010
Organiza:	Daqian Li (Co–Chair, Fudan University); Song Jiang (Co–Chair, Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics); Feimin Huang (Chinese Academy of Sciences); Hai–Liang Li (Capital Normal University); Yaguang Wang (Shanghai Jiao Tong University); Huijiang Zhao (Wuhan University); Changjiang Zhu (Central China Normal University)
Información: E-mail: WWW:	hyp2010@amss.ac.cn http://www.amt.ac.cn/hyp2010/

-

Tipo de evento: Nombre:	Conferencia Teichmüller Theory and its Interactions in Mathematics and Physics
Lugar:	Centre de Recerca Matemàtica, Bellaterra, SPAIN
Fecha:	28 June – 3 July 2010
Organiza:	The European Science Foundation (ESF) in partnership with the European Mathematical Society (EMS) and the European Research Centres on Mathematics (ERCOM)
Información: E-mail: WWW:	aguehl@esf.org http://www.esf.org/index.php?id=6305

Tipo de evento: Nombre:	Conferencia The 2010 International Conference of Applied and Engineering Mathematics (ICAEM2010, held under the World Con- gress on Engineering 2010)
Lugar:	London, UK
Fecha:	30 June – 2 July, 2010
Organiza:	International Association of Engineers (IAENG)
Información:	
E-mail:	WCE@iaeng.org
WWW:	http://www.iaeng.org/WCE2010/ICAEM2010.html

Tipo de evento: Nombre:	Conferencia SIAM Conference on the Life Sciences (LS10)		
Lugar:	Pittsburgh, Pennsylvania, USA		
Fecha:	July 12–15, 2010		
Organiza:	Tim Lewis, University of California, Davis; Jonathan		
	E. Rubin, University of Pittsburgh		
Información:			
E-mail:	Tim Lewis (tjlewis@ucdavis.edu), Jonathan		
	E. Rubin (rubin@math.pitt.edu)		
WWW:	http://www.siam.org/meetings/ls10/		

Tipo de evento:	Escuela
Nombre:	XIV Escuela Hispano-Francesa sobre Simu-
	lación Numérica en Física e Ingeniería
Lugar:	Escuela Técnica Superior de Náutica y Máquinas,
	Campus de Riazor, 15011 A Coruña, SPAIN
Fecha:	6–10 septiembre 2010
Organiza:	María J. Esteban, CNRS y Université Paris-
	Dauphine; Carlos Vázquez Cendón, Universidad de
	A Coruña
Información:	
E-mail:	ehf2010@udc.es
WWW:	http://dm.udc.es/ehf2010/

Direcciones útiles

Consejo Ejecutivo de SëMA

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:

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.

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:

Sergio Amat Plata. (sergio.amat@upct.es)

Dpto. de Matemática Aplicada y Estadística. Univ. Politécnica de Cartagena. Paseo de Alfonso XIII, 52. 30203 Cartagena (Murcia). *Tel:* 968 325 694.

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. Edifici C. 08193 Bellaterra (Barcelona). *Tel:* 935 812 413.

Inmaculada Higueras Sanz. (higueras@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. Úniv. 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 Ćastilla-La Mancha. Avda. de Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. *Tel:* 926 295 436

Luis Vega González. (luis.vega@ehu.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Aptdo. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel*: 944 647 700.

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 SëMA

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.

Carlos Conca Rosende. (cconca@dim.uchile.cl).

D
pto. de Ingeniería Matemática. Univ. de Chile. Blanco Encalada 2120. Santiago (Chile)
 $\mathit{Tel:}\ (+56)$ 0 978 4459.

Amadeus Delshams Valdés. (Amadeu.Delshams@upc.es).

Dpto. de Matemática Aplicada I. Univ. Politécnica de Cataluña. Diagonal 647. 08028 Barcelona. *Tel:* 934 016 052.

Martin J. Gander (Martin.Gander@math.unige.ch).

Section de Mathématiques. Université de Genève. 2-4 rue du Liévre, CP 64. CH-1211 Genève (Suiza). Fax: (+41) 22 379 11 76.

Vivette Girault (girault@ann.jussieu.fr). Laboratoire Jacques-Louis Lions. Université Paris VI. Boite Courrier 187, 4 Place Jussieu 75252 Paris Cedex 05 (Francia).

Arieh Iserles (A.Iserles@damtp.cam.ac.uk).

Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics. University of Cambridge. Wilberforce Rd Cambridge (Reino Unido). *Tel:* (+44) 1223 337891.

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.

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

D
pto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda
. Camilo José Cela $\rm s/n.$ 13071 Ciudad Real
.Tel:926 295 436 .

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.

Benoît Perthame. (benoit.perthame@ens.fr).

Laboratoire Jacques-Louis Lions. Université Paris VI. 175, rue du Chevaleret. 75013 Paris, (Francia). *Tel:* (+33) 1 44 32 20 36.

Olivier Pironneau (pironneau@ann.jussieu.fr).

Laboratoire Jacques-Louis Lions. Université Paris VI. 35 rue de Bellefond. 75009 Paris (Francia). *Tel*: (+33) 1 42 80 12 97.

Alfio Quarteroni. (alfio.quarteroni@epfl.ch).

Institute of Analysis and Scientific Computing. Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne. Piccard Station 8. CH-1015 Lausanne (Suiza) *Tel:* (+41) 21 69 35546.

Juan Luis Vázquez Suárez. (juanluis.vazquez@uam.es).

Dpto. de Matemáticas, C-XV. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Crta. 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. Aptdo. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel:* 944 647 700.

Chi-Wang Shu. (shu@dam.brown.edu).

Division of Applied Mathematics Box F. 182 George Street Brown University Providence RI 02912 *Tel:* (401) 863-2549

Enrique Zuazua Iriondo. (zuazua@bcamath.org).

Basque Center for Applied Mathematics Bizkaia Technology Park Building 208B 48170 - Zamudio (Vizcaya) Tel: 944 014 690

Grupo Editor del Boletín de SëMA

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).

D
pto. 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 SëMA

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. (mepleitm@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemática Aplicada, Estadística e I. O. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Aptdo. 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 SëMA:

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. (oscar.lopez@usc.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matémáticas. Univ. de Santiago de Compostela. Campus sur, s/n. 15782 Santiago de Compostela *Tel:* 981 563 100, ext. 13228.

Responsables de otras secciones de SëMA

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.

INFORMACIÓN PARA LOS AUTORES

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 SēMA 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 SëMA

Remitir a: Iñigo Arregui, Dpto de Matemáticas, Fac. de Informática, Universidad de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. 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: \Box Profesional

 \Box Personal

Cuota anual para el año 2009

\Box Socio ordinario: 30 \in	\Box Socio de reciprocidad con la RSME: 12€
\Box Socio estudiante: 15 \in	

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	Oficina	D.C.	Número de cuenta
(4 dígitos)	(4 dígitos)	(2 dígitos)	(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:

> SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244 Bankinter C/ Hernán Cortés, 63 39003 Santander

Atentamente,

Fdo.

Ficha de Inscripción Institucional

Sociedad Española de Matemática Aplicada SëMA

Remitir a: Iñigo Arregui, Dpto de Matemáticas, Fac. de Informática, Universidad de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. 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 2009 como Socio Institucional es de 150 ${\in}.$ El pago se realiza mediante transferencia bancaria a

SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244 Bankinter C/ Hernán Cortés, 63 39003 Santander