

Matemática nas Ciências e Tecnologia

Editor Convidado: José Augusto Ferreira

<i>M. Filomena Teodoro, Pedro M. Lima, Neville J. Ford, Patricia M. Lumb</i> Aproximação Numérica de Equações Funcionais Diferenciais do Tipo Misto	119
<i>Pedro Lima, Filomena Teodoro, Neville Ford, Patricia Lumb</i> Modelação Matemática da Propagação de Sinais no Sistema Nervoso	123
<i>Olivier Pellegrino, Andreia Furtado, Eduarda Filipe</i> Incertezas associadas a retas de calibração	127
<i>José Carlos Santos</i> A linearidade das transformadas de Lorenz	131
<i>J. R. Branco</i> Modelos matemáticos para o desenvolvimento de gliomas	135
<i>Daniela Coelho, João Brandão</i> Symmetric coordinates for an A_2B_2 molecule	139

APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES FUNCIONAIS DIFERENCIAIS DO TIPO MISTO

M. Filomena Teodoro

Escola Superior de Tecnologia de Setúbal, IPS
Campus do IPS, Estefanilha, 2910-761 Setúbal, Portugal
e-mail: maria.teodoro@estsetubal.ips.pt

Pedro M. Lima

Instituto Superior Técnico
A. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal
e-mail: plima@math.ist.utl.pt

Neville J. Ford, Patricia M. Lumb

University of Chester
Parkgate Road, Chester CH4BJ, UK
e-mail: njford@chester.ac.uk, p.lumb@chester.ac.uk

Resumo: Neste artigo apresentam-se algoritmos para cálculo de soluções aproximadas de algumas equações funcionais diferenciais do tipo misto (EFDTM), ou seja, equações cujos argumentos têm atraso ou avanço. É feita uma descrição dos diferentes métodos computacionais propostos para a solução numérica de problemas lineares, baseados em colocação, mínimos quadrados e elementos finitos.

Abstract: In this article are presented algorithms which solve numerically some linear mixed type functional differential equations. Computational methods based on collocation, least squares and finite element methods are described.

palavras-chave: Equações funcionais diferenciais mistas; método dos passos; colocação; mínimos quadrados; elementos finitos.

keywords: Mixed-type functional differential equation; method of steps; collocation method; least squares; finite element.

1 Introdução

No contexto das ciências aplicadas, nomeadamente economia [1], biologia [2] e controle óptimo [6], muitos modelos matemáticos contêm EFDTM. A análise das EFDTM pode ser dividida em duas classes distintas: i) as equações lineares, exposto neste artigo e ii) as equações lineares não lineares.

Em geral, as EFDTM são mal condicionadas, tornando difícil a sua análise e resolução, quer exacta quer numérica. Estamos particularmente interessados em obter uma solução numérica da EFDTM linear da forma

$$x'(t) = \alpha(t)x(t) + \beta(t)x(t-1) + \gamma(t)x(t+1), \quad (1)$$

onde x é desconhecido, α , β e γ são funções dadas. Os autores de [3] analisaram EFDTM como problemas de valores de fronteira (PVF). Eles consideraram a equação (1) no caso autónomo e tentaram encontrar uma solução diferenciável num dado intervalo $[-1, k]$ (k inteiro positivo), conhecendo a solução nos intervalos $[-1, 0]$ e $(k-1, k]$ respectivamente. Os mesmos autores introduziram um algoritmo numérico baseado no método θ . Esta abordagem foi mais desenvolvida em [7], considerando ainda o caso autónomo da equação (1) onde novos métodos numéricos foram introduzidos. Em [4] estes métodos foram adaptados para o caso não autónomo (onde α , β e γ são funções suaves de t). Neste mesmo artigo foi dada uma base teórica aos métodos computacionais, relacionando resultados analíticos existentes sobre EFDTM com resultados clássicos da análise numérica.

Neste artigo daremos uma visão geral dos métodos introduzidos baseados em colocação, mínimos quadrados e elementos finitos. Uma análise comparativa é fornecida.

2 Métodos Computacionais

2.1 Método dos passos

O objectivo é determinar uma solução da equação (1) da forma

$$x(t) = \begin{cases} \varphi_1(t), & \text{if } t \in [-1, 0], \\ f(t), & \text{if } t \in (k-1, k], \end{cases} \quad (2)$$

onde φ_1 e f são funções regulares definidas em $[-1, 0]$ e $(k-1, k]$, respectivamente ($1 < k \in \mathbf{N}$). De forma a analisar e resolver este PVF, consideramos um problema de valores iniciais (PVI) com as condições $x(t) = \varphi(t)$, $t \in [-1, 1]$, onde a função φ é definida por

$$\varphi(t) = \begin{cases} \varphi_1(t), & \text{if } t \in [-1, 0], \\ \varphi_2(t), & \text{if } t \in (0, 1]. \end{cases} \quad (3)$$

Esta reformulação fornece uma base quer teórica quer numérica de construção de soluções usando ideias baseadas no método dos passos de Bellman usado para resolução de equações diferenciais com atraso. A equação é resolvida em sucessivos intervalos de amplitude unitária. Assumindo que $\gamma(t) \neq 0, \forall t \geq 0$, a equação (1) pode ser escrita na forma

$$x(t+1) = a(t)x'(t) + b(t)x(t-1) + c(t)x(t), \quad (4)$$

onde $a(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$, $b(t) = -\frac{\beta(t)}{\gamma(t)}$, $c(t) = -\frac{\alpha(t)}{\gamma(t)}$. Usando repetidamente a fórmula (4) pode-se construir uma solução regular da equação (1) em qualquer intervalo $[1, k]$, começando na sua definição em $[-1, 1]$ pela fórmula (3). Podemos prolongar a solução a qualquer intervalo, continuando o processo, desde que

a função inicial φ e os coeficientes da equação (1) sejam suficientemente regulares. Em [3] e em [4] o método dos passos é analisado em detalhe para os casos autónomo e não autónomo, respectivamente.

2.2 Algoritmos

Nesta secção descrevemos alguns dos métodos numéricos introduzidos para resolução da equação (1).

Procuramos uma solução aproximada de (1) em $[-1, 1]$ na forma

$$\tilde{x}_N(t) = x_0(t) + \sum_{j=0}^{d-1} C_j x_j(t), \quad t \in [-1, 1] \quad (5)$$

onde x_0 é uma aproximação inicial da solução; $\{x_j\}_{0 \leq j \leq d-1}$ é uma base no espaço de funções onde a correcção inicial é procurada; d é a dimensão deste espaço. Os algoritmos de cálculo de \tilde{x}_N seguem três passos: construção da aproximação inicial, definição das funções de base, cálculo dos coeficientes.

1. Construção da aproximação inicial. Da fórmula (4) tem-se que a solução da equação (1) pertence a $C^n((l-1, l])$ (para dado $l \geq 1, n \geq 1$), então também pertence a $C^{n-1}((l, l+1])$. Dado que queremos \tilde{x}_N pelo menos contínuo em $[-1, k]$ (para $k \geq 2$), exigimos que x_0 pertença a $C^k((-1, l])$. A aproximação x_0 em $[-1, 1]$ é definida da seguinte forma:

$$x_0(t) = \begin{cases} \varphi_1(t), & t \in [-1, 0] \\ P_{2k}(t) = a_0 + a_1 t + \dots + a_{2k} t^{2k}, & t \in [0, 1]. \end{cases} \quad (6)$$

As $2k + 1$ incógnitas a_0, a_1, \dots, a_{2k} ($k \geq 2$) são determinadas impondo algumas condições de regularidade (x_0 tem de pertencer a $C^k([-1, 0])$). Por fim x_0 é prolongado a partir de $[-1, 1]$ para $[-1, k]$ usando o método dos passos. Seja $x_0^{[-1, k]}$ esse prolongamento.

2. Definição das funções de base. Para o cálculo da correcção da aproximação inicial em $[0, k]$, consideramos numa primeira fase a correcção em $[0, 1]$. Consideremos uma rede uniforme em $[0, 1]$, com passo $h = 1/N$ (onde $N \in \mathbb{N}, N \geq k+1$). A correcção $\tilde{x}_d(t) - x_0(t)$ em $[0, 1]$ será considerada um spline de grau k , $S_k(t)$, que satisfaz $S_k(0) = S_k(1) = 0$. Usamos como funções de base em $[0, 1]$, $x_j(t)$, os chamados B -splines de grau k . As funções de base são prolongadas ao intervalo $[0, k]$ pelo método dos passos, sendo o respectivo prolongamento definido por $x_j^{[0, k]}$. Em $[0, k]$, a solução aproximada é dada por

$$\tilde{x}_N^{[0, k]}(t) = x_0^{[-1, k]}(t) + \sum_{j=0}^{d-1} C_j x_j^{[0, k]}(t), \quad t \in [0, k]. \quad (7)$$

3. Cálculo dos coeficientes C_j . Finalmente, calculamos os coeficientes C_j , $j = 0, \dots, d-1$ da expansão (7) a partir da condição que \tilde{x}_N aproxima f no intervalo $(k-1, k]$. Três métodos alternativos foram usados:

colocação, mínimos quadrados e elementos finitos. Encontram-se descritos em [7], [4] e [5] respectivamente. Em qualquer destes três métodos, os coeficientes C_j , $j = 0, \dots, d-1$ são calculados resolvendo um sistema de equações li-neares cuja matriz é uma matriz em banda.

Neste artigo foram apresentados esquemas numéricos para solução de EFDTM lineares baseados no método dos passos, colocação, mínimos quadrados e elementos finitos. O resultados numéricos confirmaram a eficiência dos métodos numéricos propostos. A análise de convergência dos algoritmos descritos encontra-se exposta em [8] com maior detalhe.

Referências

- [1] H. D’Albis and E. Augeraud-Veron, “Competitive Growth in a Life-Cycle Model: existence and dynamics”, *International Review of Economics* 50 (2009), pp. 459–484.
- [2] H. Chi, J. Bell and B. Hassard, “Numerical solution of a nonlinear advance-delay-differential equation from nerve conduction theory”, *Journal of Mathematical Biology* 24 (1986), pp. 583–601.
- [3] N. J. Ford, P. M. Lumb, “Mixed-type functional differential equations: a numerical approach”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 229 (2009), pp. 471–479.
- [4] P. M. Lima, M. F. Teodoro, N.J. Ford and P.M. Lumb, “Analytical and Numerical Investigation of Mixed Type Functional Differential Equations”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 234, N. 9 (2010), pp. 2732–2744.
- [5] P. M. Lima, M. F. Teodoro, N. J. Ford and P. M. Lumb, “Finite Element Solution of a Linear Mixed-Type Functional Differential Equation”, *Numerical Algorithms*, Vol. 55 (2010), pp. 301–320.
- [6] L. S. Pontryagin, R. V. Gamkrelidze, E. F. Mischenko, *The mathematical Theory of Optimal Process*, Interscience, New York (1962).
- [7] M. F. Teodoro, P. M. Lima, N. J. Ford, P. M. Lumb, “New approach to the numerical solution of forward-backward equations”, *Frontiers of Mathematics in China*, Vol.4, N.1 (2009), pp. 155–168.
- [8] M. F. Teodoro, “Computational Methods for Functional Differential Equations with Deviating Arguments”, Tese de Doutorado, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Portugal, 2012.

MODELAÇÃO MATEMÁTICA DA PROPAGAÇÃO DE SINAIS NO SISTEMA NERVOSO

Pedro Lima

Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1049-001 Lisboa, Portugal
e-mail: plima@math.ist.utl.pt

Filomena Teodoro

Escola Superior de Tecnologia de Setúbal,
Campus do IPS, Estefanilha
2910-761 Setúbal, Portugal
e-mail: maria.teodoro@estsetubal.ips.pt

Neville Ford, Patricia Lumb

University of Chester
Parkgate Road
Chester CH4BJ, UK
e-mail: njford@chester.ac.uk, p.lumb@chester.ac.uk

Resumo: Neste artigo tratamos da solução aproximada de uma equação não-linear funcional diferencial de tipo misto, que surge na teoria da condução de sinais no sistema nervoso. A equação considerada descreve a propagação de um sinal num axónio mielinizado. Procura-se uma solução monótona, definida em todo o eixo real, que tende para certos valores em $\pm\infty$. Os algoritmos criados pelos autores para a resolução de equações lineares do mesmo tipo são aqui adaptados ao caso de problemas não-lineares em domínios ilimitados. São apresentados e discutidos resultados numéricos.

Abstract: This paper is concerned with the approximate solution of a nonlinear mixed type functional differential equation (MTFDE) arising from nerve conduction theory. The equation considered describes conduction in a myelinated nerve axon. We search for a solution defined on the whole real axis, which tends to given values at $\pm\infty$. The numerical algorithms, developed previously by the authors for linear problems, were upgraded to deal with the case of nonlinear problems on unbounded domains. Numerical results are presented and discussed

palavras-chave: axónio; propagação de sinais; equação funcional diferencial de tipo misto; método de Newton; métodos de colocação.

keywords: axon; signal propagation; mixed-type functional differential equation; Newton's method; collocation methods.

1 Introdução

No presente artigo consideramos um modelo que descreve a propagação de estímulos nervosos em axónios, que funcionam como cabos de transmissão. Neste modelo, tratamos de axónios mielinizados, isto é, revestidos de mielina, uma substância que funciona como isolador eléctrico. Ao longo destes axónios estão distribuídos nódulos, chamados os nódulos de Ranvier, nos quais ocorrem todos os processos eléctricos responsáveis pela transmissão do sinal. A mielina tem uma resistência tão alta e uma capacidade eléctrica tão baixa, que nos intervalos entre os nódulos a membrana fica completamente isolada. Por isso, se um nódulo é estimulado de tal modo que o seu potencial transmembrânico atinge um certo valor crítico, geram-se correntes iónicas que são transmitidas ao nódulo vizinho. Em consequência, este último também atinge o potencial crítico. Deste modo, o processo propaga-se ao longo do axónio, dando a impressão que a excitação salta de um nódulo para o outro.

Este fenómeno pode ser modelado através de uma equação funcional diferencial de tipo misto (EFDTM), chamada a equação discreta de Fitzhugh-Nagumo. Para isso, considera-se que os nódulos são todos idênticos entre si e estão uniformemente distribuídos ao longo do axónio. Além disso, supõe-se que o sinal se propaga com uma velocidade constante e que cada nódulo de Ranvier interage apenas com os dois nódulos contíguos. Sob estas hipóteses, e representando por $v(t)$ o potencial eléctrico, num certo nódulo, no instante t , a variação desse potencial ao longo do tempo satisfaz a seguinte equação:

$$RCv'(t) = f(v(t)) + v(t - \tau) + v(t + \tau) - 2v(t), \quad (1)$$

onde R e C (constantes reais) representam a resistividade e a capacidade nodal, respectivamente, e f é uma função que reflecte a resposta voltagem-corrente e tem a forma

$$f(v) = bv(v - a)(1 - v), \quad (2)$$

onde $b > 0$ e $0 < a < 1/2$. Estamos interessados numa solução v da equação (1), crescente em \mathbb{R} , que satisfaz as condições

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} v(t) = 0, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} v(t) = 1, \quad v(0) = 0.5. \quad (3)$$

Refira-se que o valor τ (desvio do argumento), que é inversamente proporcional à velocidade de propagação, também é uma incógnita.

O problema (1)-(3) é analisado em [1] e [2]. No presente artigo, reve-mos brevemente alguns resultados conhecidos desses trabalhos e outros mais recentes, resultantes da nossa investigação sobre este problema.

2 Métodos Analíticos e Computacionais

O problema (1)-(3), embora de aspecto simples, apresenta várias dificuldades, do ponto de vista matemático, que o transformam num desafio, tanto para a análise, como para a aproximação numérica. Por exemplo, o facto de serem dadas duas condições de fronteira no infinito obriga-nos a estudar o comportamento assintótico da solução quando $t \rightarrow \pm\infty$. Para isso, torna-se necessário linearizar a equação para $v \approx 0$ e $v \approx 1$ e considerar a equação característica em cada caso. Representando por λ_+ a raiz positiva da equação característica em $-\infty$ e por λ_- a raiz negativa da equação característica em $+\infty$, podemos então construir aproximações da solução procurada, com a forma:

$$w_1(t) = \epsilon_1 e^{\lambda_+(t+L)}, \quad (4)$$

quando $t < -L$, e

$$w_2(t) = 1 - \epsilon_2 e^{\lambda_-(t-L)}, \quad (5)$$

quando $t > L$. Nesta fórmulas, L é um número suficientemente grande para que a representação assintótica da solução, dada por (4) e (5), permita aproximá-la com a precisão requerida, fora do intervalo $[-L, L]$. As constantes ϵ_1 e ϵ_2 são determinadas durante o processo de cálculo da solução. Deste modo, o problema fica reduzido à resolução numérica da equação (1) num intervalo limitado $[-L, L]$, com a condição $v(0) = 1/2$.

Para a resolução deste novo problema, baseámo-nos numa abordagem que desenvolvemos recentemente para o tratamento numérico de problemas de valores de fronteira para EFDTM. Esta abordagem está descrita, por exemplo, em [3] e [4]. Essa técnica permite calcular uma solução aproximada de uma EFDTM linear, num certo intervalo $[-L, L]$, sendo dados os valores da solução nos intervalos $[-L - \tau, -L]$ e $[L, L + \tau]$, onde τ representa o valor absoluto do desvio nos argumentos. Dado que o reduzido espaço disponível não nos permite descrever este método, limitamo-nos a dizer que se baseia na redução do problema considerado a um problema de valores de fronteira (PVF) para uma equação diferencial ordinária linear de uma certa ordem, sendo que essa ordem depende da relação entre L e τ . Feita esta transformação, o PVF linear é resolvido numericamente através de técnicas clássicas, como o método de colocação com uma base de B-splines.

Voltando no entanto ao problema original para a equação (1) recorde-se que esta equação é não-linear (dada a presença da função f), pelo que as técnicas que acabámos de referir não são directamente aplicáveis. Para as podermos aplicar, torna-se necessário recorrer ao método de Newton, que permite transformar a equação (1) numa sucessão de equações lineares.

Em cada uma das iteradas do método de Newton resolve-se uma equação linear, à qual pode ser aplicado o método a que nos referimos anteriormente. Note-se ainda que a convergência do método de Newton depende criticamente da escolha da aproximação inicial $v_0(t)$, pelo que foi dispensada muita atenção à questão da escolha prévia de uma aproximação razoável da solução. Para mais pormenores sobre esta questão, remete-se o leitor para o artigo [5] e a tese [6], onde também poderão encontrar resultados numéricos.

Em conclusão, gostaríamos de referir que os resultados obtidos até agora mostram que o algoritmo proposto permite resolver de forma eficiente as dificuldades do problema descrito. Está em curso a implementação de outros métodos que permitem elevar a precisão dos resultados numéricos, nomeadamente através da melhoria da ordem de convergência.

Referências

- [1] J. Bell, “Behaviour of some models of myelinated axons”, *IMA Journal of Mathematics Applied in Medicine and Biology*, 1 (1984), pp. 149–167.
- [2] H. Chi, J. Bell and B. Hassard, “Numerical solution of a nonlinear advance-delay-differential equation from nerve conduction theory”, *J. Math. Biol.*, 24 (1986), pp. 583–601 .
- [3] P. Lima, F. Teodoro, N. Ford e P.Lumb, “Analytical and numerical investigation of mixed-type functional differential equations”, *J. Comput. Appl. Math.*, 234 (2010), pp. 2826–2837.
- [4] P. Lima, F. Teodoro, N. Ford e P. Lumb, “Finite element solution of a linear mixed-type functional differential equation”, *Numerical Algorithms*, 55 (2010), pp. 301–320.
- [5] P. Lima, F. Teodoro, N. Ford e P. Lumb, “Analysis and computational approximation of a forward-backward equation arising in nerve conduction”, accepted for publication in the Proceedings of the International Conference on Differential and Difference Equations, Ponta Delgada, 2011.
- [6] F. Teodoro, “Computational methods for functional differential equations with deviating arguments”, Tese de Doutoramento, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 2012.

INCERTEZAS ASSOCIADAS A RETAS DE CALIBRAÇÃO

Olivier Pellegrino, Andreia Furtado, Eduarda Filipe

Laboratório Central de Metrologia, IPQ
Rua António Gião n.º2
2829-513 Caparica, Portugal
e-mail: opellegrino@ipq.pt

Resumo: A lei de propagação das incertezas aplicada a uma reta de calibração utilizando as variâncias dos parâmetros da reta permite obter uma expressão analítica da incerteza da grandeza de saída. Nesta expressão, evidencia-se também que a incerteza das grandezas de entrada contém componentes que podem ser estimadas por avaliações de tipo estatístico ou por avaliações de tipo não estatístico. Uma aplicação à refratometria de soluções aquosas de glucose é considerada.

Abstract The application of the law of propagation of uncertainty to a straight line calibration function, using the variances of the parameters of the straight line, enables to obtain an analytical expression for the uncertainty of the output quantity. In this expression, it is also evidenced that the input quantities have uncertainty components that can be evaluated by either statistical type or nonstatistical type. An application to the refractometry of glucose aqueous solutions is considered.

palavras-chave: Calibração; incerteza; regressão linear; refratometria.

keywords: Calibration; uncertainty; linear regression; refractometry.

1 Introdução

Na 3ª edição do Vocabulário Internacional da Metrologia (VIM), novos significados são dados a termos já estabelecidos. Assim, a calibração consiste agora ‘...num primeiro passo,...’ no estabelecimento de ‘...uma relação entre os valores e as incertezas de medição fornecidos por padrões e as indicações correspondentes com as incertezas associadas; num segundo passo, utiliza esta informação para estabelecer uma relação visando a obtenção dum resultado de medição a partir duma indicação’ [1]. Este incentivo à utilização de modelos matemáticos já tinha sido efetuado há quinze anos pelo Guia de expressões da incerteza de medição (GUM) [2]. A calibração inclui agora explicitamente o estabelecimento dum modelo de medição capaz de fornecer o resultado de medição em função da indicação do sistema em calibração,

tendo em conta as incertezas associadas [3]. Um modelo linear de calibração tem a vantagem da existência de expressão analítica para a variância associada à utilização deste modelo, o que permite obter uma expressão da incerteza associada ao resultado de medição por aplicação da metodologia do GUM, que tem por base a lei de propagação das incertezas. A refratometria das soluções aquosas de glucose permite apresentar valores de grandezas como as frações mássicas de glucose ou as frações volúmicas potencias de etanol deduzidos de valores medidos do índice de refração por meio de tabela de correspondência com valores dessas grandezas. O refratómetro é calibrado pela comparação do valor indicado do índice de refração com o valor certificado de solução de referência.

2 Incerteza associada à reta de calibração

2.1 Método dos mínimos quadrados

Considerando os valores indicados x_i e os valores de referência y_i , as expressões dos coeficientes da regressão a_0 e a_1 e das respetivas variâncias, $u^2(a_0)$ e $u^2(a_1)$, são conhecidas [4], na hipótese de os y_i não serem correlacionados e não apresentarem amplitudes de incerteza significativas. Se se verificar a desigualdade $\frac{a_1}{u(a_1)} > t_{\frac{\alpha}{2}, N-2}$, em que $N - 2$ é o número de graus de liberdade, α é o nível de significância do teste e $t_{\frac{\alpha}{2}, N-2}$ é a distribuição t de Student, então a hipótese $H_0 : a_1 = 0$ é rejeitada a $(1 - \alpha)100$ %, o que justifica o uso do modelo linear correspondente.

2.2 Incerteza segundo a metodologia do GUM

2.2.1 Lei de propagação das incertezas

Segundo o GUM [2], efetuando o desenvolvimento de Taylor do 1º grau ao modelo de medição $Y = f(Z_p)$ das variáveis Z_p , na proximidade dos pontos de interesse $(Y_0; Z_{p,0})$ e calculando a variância correspondente, obtém-se a lei de propagação das incertezas: $u^2(Y_j) = \sum_{k=1}^N \frac{\partial Y_j}{\partial Z_k}^2 u^2(Z_k) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^N \frac{\partial Y_j}{\partial Z_k} \frac{\partial Y_j}{\partial Z_l} u(Z_k, Z_l)$.

Aplicando ao modelo linear de calibração $Y = a_0 + a_1 X$, tendo em conta as incertezas associadas $u(X_i)$, obtém-se: $u^2(Y_j) = a_1^2 u^2(X_j) + X_j^2 u^2(a_1) + u^2(a_0) + 2[u(a_0, a_1) + u(a_0, X_j) + u(a_1, X_j)]$. As expressões conhecidas

$u(a_0, a_1) = -\bar{x}u^2(a_1)$ e $u(a_0, X_j) = xu(a_1, X_j) = 0$ permitem obter:

$u(Y_j) = \sqrt{a_1^2 u^2(X_j) + \left\{ \frac{(X_j - \bar{x})^2}{Q_{xx}} + \frac{1}{N} \right\} S_R^2}$ em que \bar{x} é o valor médio das N indicações x_i do instrumento de medição,

$$Q_{xx} = \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \text{ e } S_R^2 = \frac{R^2}{N-2} = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2}{N-2}.$$

2.2.2 Métodos de avaliação das incertezas

Um primeiro método de avaliação das incertezas, designado por método de tipo A, consiste numa 'análise estatística dos valores medidos, obtidos sob condições definidas de medição'. Um segundo método, designado por método tipo B, consiste na determinação 'por meios diferentes daquele adotado para uma avaliação do tipo A da incerteza de medição' [1]. Assim na expressão da incerteza de medição associada à utilização do modelo linear definida na secção 2.2.1, temos: $u^2(X_j) = u_A^2(X_j) + u_B^2(X_j)$.

Por exemplo, no caso de p repetições, de variância experimental, $s^2(X_j)$, a componente A da incerteza é dada por $u_A^2 = \frac{s^2(X_j)}{p}$. No caso dum instrumento de medição de divisão instrumental *div*, de distribuição *a priori* retangular de valores, a componente B de incerteza é dada por $u_B^2 = \frac{div^2}{12}$.

3 Refratometria das soluções aquosas

O refratómetro mede o índice de refração de soluções aquosas diluídas a fim de deduzir a sua concentração, por consulta de tabelas de correspondência entre estas grandezas. A utilização de soluções padrão de índice de refração permite construir uma reta de calibração. A medição de índice de refração com o refratómetro assim calibrado utiliza esta reta de calibração, também considerada como uma correção da indicação do instrumento, que inclui a incerteza associada à utilização deste modelo matemático.

A correspondência tabelada entre índice de refração e concentração é estabelecida a uma temperatura de referência, 20 °C. O refratómetro do laboratório do Instituto Português da Qualidade tem um intervalo de medição de índices de refração entre 1,320 00 e 1,580 00, uma resolução instrumental em índice de refração *div* = 0,000 01 e em temperatura de 0,01 °C. As medições de índice de refração efetuadas a $t \neq 20$ °C são corrigidas por meio de:

$n_{lido}(20\text{ }^{\circ}\text{C}) = n_{lido}(t) - (t - 20\text{ }^{\circ}\text{C})dn/dt$, em que $dn/dt \sim 1,6 \cdot 10^{-4}\text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ é o valor para a água, o majorante das soluções analisadas.

Após p repetições de leituras de indicação do índice de refração e da temperatura, podemos escrever a incerteza-padrão da grandeza de entrada como:

$$u^2[n(20\text{ }^{\circ}\text{C})] = s_{rep}^2(n)/p + div^2(n)/12 + (dn/dt)^2 [s_{rep}^2(t)/p + div^2(t)/12]$$

Para a temperatura de referência, $20\text{ }^{\circ}\text{C}$, podemos aplicar a função de calibração linear: $n_{ref} = a_0 + a_1 n_{lido}$ e a expressão da incerteza-padrão de

$$\text{medição: } u(n_{ref}) = \sqrt{a_1^2 u^2(n_{lido}) + \left\{ \frac{(n_{lido} - \bar{n})^2}{Q_{nn}} + \frac{1}{N} \right\} S_R^2}.$$

4 Conclusões

A definição da calibração publicada na nova edição do vocabulário internacional de metrologia (VIM) explicitamente inclui a determinação e a utilização de um modelo de calibração que reforça o papel da matemática neste ramo das ciências e tecnologia. Esta comunicação ilustra estes novos conceitos com um modelo linear de calibração aplicado à refratometria de soluções aquosas de glucose.

Referências

- [1] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML, ILAC, *Vocabulário Internacional de Metrologia - Conceitos fundamentais e gerais e termos associados*, IPQ, Caparica, 2012.
- [2] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML, *Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement*, JCGM, 2008.
- [3] M. Désenfant, R. André, L. Leblond, A. Dugast, B. Savanier, J.M. Pou, G. Clauss, M. Priel, D. Lelong, N. Bouillon, P. Otal, C. Delacroix, “Le nouveau concept d’étalonnage du VIM 3”, *15ème Congrès International de Métrologie, Paris*, 2011.
- [4] O. Pellegrino, A. Furtado, E. Filipe “Linear fitting procedures applied to refractometry of solutions”, *XIX IMEKO World Congress, Lisbon*, 2009.

A LINEARIDADE DAS TRANSFORMADAS DE LORENZ

José Carlos Santos

Departamento de Matemática
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
Rua do Campo Alegre 687
4169-007 Porto, Portugal
e-mail: jcsantos@fc.up.pt

Resumo: A linearidade das transformadas de Lorenz é deduzida directamente dos pressupostos da Teoria da Relatividade, sem hipóteses adicionais.

Abstract: The linearity of the Lorenz transformations is deduced directly from the assumptions of Relativity Theory, without further hypothesis.

palavras-chave: Transformadas de Lorenz; linearidade; Teoria da Relatividade.

keywords: Lorenz transformations; linearity; Relativity Theory.

Introdução

Considerem-se dois observadores O e O' a moverem-se em referenciais inerciais, que se deslocam a uma velocidade uniforme relativamente um ao outro, sendo v a velocidade de O' relativamente a O . Se, para o observador O , um evento tiver lugar num determinado lugar e num determinado momento, em que lugar e em que momento têm lugar relativamente ao observador O' ? A resposta relativística a esta pergunta é distinta da clássica. Veja-se [2] para uma introdução à Teoria da Relatividade e [4] para a sua história.

Para simplificar, vai-se supor que tudo se passa a uma dimensão espacial e que, além disso, quer o local 0 quer o instante 0 são os mesmos para ambos os observadores. Então, se o evento E teve lugar em (x, t) (onde a primeira coordenada é a coordenada espacial e a segunda é a temporal) relativamente a O e teve lugar em (x', t') relativamente a O' , a relação clássica entre os pares (x, t) (x', t') é

$$\begin{cases} x' = x - vt \\ t' = t, \end{cases} \quad (1)$$

enquanto que a relação relativística é dada pela transformada de Lorenz:

$$\begin{cases} x' = \gamma \cdot (x - vt) \\ t' = \gamma \cdot \left(t - \frac{vx}{c^2} \right), \end{cases} \quad (2)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo e $\gamma = \left(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right)^{-1}$.

Há muitas maneiras de demonstrar a validade das transformadas de Lorenz. Einstein, no seu artigo original sobre a Teoria da Relatividade (reproduzido no apêndice de [4]) faz isso de uma maneira quase completa (mais detalhes serão vistos à frente), partindo de dois pressupostos explícitos:

1. o princípio da relatividade (as leis naturais são as mesmas para dois observadores a moverem-se a uma velocidade uniforme relativamente um ao outro);
2. a velocidade da luz no vácuo é constante e é a mesma para todos os observadores;

e dois implícitos:

1. isotropia do espaço;
2. homogeneidade do espaço-tempo.

De facto, quase desde o início da Relatividade que foi despendido esforço para provar que, mesmo sem se supor que a velocidade da luz no vácuo é constante e é a mesma para todos os observadores, se tem necessariamente (1) ou (2), para alguma velocidade c , podendo então o valor de c ser determinado experimentalmente; veja-se [1] e a bibliografia aí incluída.

Repare-se que (2) exprime (x', t') como uma função linear de (x, t) ; por outras palavras, $(x', t') = f_v(x, t)$, para alguma aplicação linear f_v , dependente de v . Um ponto de partida para a demonstração de que se tem de facto (2) consiste então em começar por demonstrar que f_v é uma aplicação linear; isso reduz a determinação da relação entre (x, t) e (x', t') à determinação de apenas quatro números. Einstein provou que f_v preserva a adição, o que quase basta para concluir que se trata de uma aplicação linear. Com efeito, qualquer função mensurável (segundo Lebesgue) de \mathbb{R}^2 em \mathbb{R}^2 que preserve a adição é linear e supor que f_v é mensurável é uma hipótese extra muito fraca, tantos mais que há modelos da teoria dos conjuntos para os quais todas as funções são mensuráveis (veja-se [5]). Há outras demonstrações da linearidade de f_v supondo outras hipóteses mais fortes (mais uma vez, consulte-se a bibliografia de [1]), tal como, por exemplo, f_v ser de classe C^2 . O objectivo deste artigo consiste em demonstrar a linearidade de f_v sem recorrer a hipóteses adicionais.

Antes de se prosseguir, convém observar que f_v é necessariamente uma bijecção. Com efeito, está implícito que, a cada evento espaço-temporal E ,

corresponde um e um só par de coordenadas espaço-temporais $\psi(E)$, que são as coordenadas de E relativamente ao observador O . E, analogamente, a E corresponde um e um só par de coordenadas espaço-temporais $\psi^*(E)$, que são as coordenadas de E relativamente ao observador O' . Mas então ψ e ψ^* são bijecções e, como $f_v = \psi^* \circ \psi^{-1}$, f_v é uma bijecção.

A fim de se provar a linearidade de f_v , considere-se um objecto sobre o qual não actua nenhuma força. Como os observadores O e O' estão em referenciais inerciais, ambos descrevem o conjunto de todas as sucessivas coordenadas espaço-temporais do objecto como um segmento de recta. Posto de outro modo, a função f_v envia segmentos de recta em segmentos de recta. Mas qualquer bijecção de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^n é uma aplicação afim (veja-se [3]) e, como se está a supor que $f_v(0, 0) = (0, 0)$, resulta daqui que f_v é linear.

Referências

- [1] S. Cacciatori, V. Gorini and A. Kamenshchik, “Special relativity in the 21st century”, *Ann. Phys. (Berlin)*, Vol. 17, No. 9–10 (2008), pp. 728–768.
- [2] J. J. Callahan, *The geometry of spacetime: An introduction to special and general relativity*, Springer-Verlag, New York, 2000.
- [3] J. Jeffers, “Lost theorems of Geometry”, *Am. Math. Mon.*, Vol. 107, No. 9, pp. 800–812.
- [4] A. I. Miller, *Albert Einstein’s Special Theory of Relativity: Emergence (1905) and early interpretation (1905–1911)*, Springer-Verlag, New York, 1997.
- [5] R. M. Solovay, “A model of Set-Theory in which every set of reals is Lebesgue measurable”, *Ann. of Math. (2) (Princeton)*, Vol. 92, No. 1 (1970), pp. 1–56

MODELOS MATEMÁTICOS PARA O DESENVOLVIMENTO DE GLIOMAS

J. R. Branco

Instituto Superior de Engenharia de Coimbra & CMUC
e-mail: jrbranco@isec.pt

Resumo: Gliomas são tumores cerebrais altamente difusivos e invasivos. Os tratamentos e protocolos actuais raramente impedem o seu reaparecimento, pelo que é importante o estudo de estratégias terapêuticas alternativas, que permitam aumentar o tempo e a qualidade de vida dos doentes.

O uso de modelos matemáticos, cuidadosamente concebidos e validados, pode ser útil no desenvolvimento de hipóteses a serem testadas em futuros ensaios clínicos. O objectivo deste trabalho é apresentar um breve resumo dos modelos matemáticos para o crescimento de gliomas.

Abstract Gliomas are diffusive and highly invasive brain tumors. Even when treated gliomas almost always recur, with fatal consequences. Due to their highly invasive and recurrent behaviour, effective therapeutic strategies for gliomas are extremely important to improve survival time of the patients.

Mathematical models, carefully devised and validated, might be useful for developing hypotheses to be tested in future clinical trials. In this paper we present an overview on mathematical models for glioma's growth.

palavras-chave: Crescimento de tumores, glioma, modelos matemáticos.

keywords: Tumor growth, glioma, mathematical modeling.

1 Introdução

O cancro é uma doença complexa que se traduz pelo crescimento descontrolado de células tumorais, destruição de tecido são e invasão de órgãos vitais. O desenvolvimento do tumor passa por diferentes fases de diferentes durações, começando por mudanças genéticas a nível celular e terminando com metastases e invasão. Os processos de proliferação e transporte são os principais responsáveis pela disseminação maligna [7].

É extensa a investigação já feita ao nível da modelação de tumores, especialmente no que respeita a tumores sólidos. Porém, os modelos para gliomas estão muito menos desenvolvidos, pois embora os gliomas proliferem como tumores sólidos, apresentam um carácter difusivo muito mais elevado, que se traduz em dificuldades acrescidas no que respeita à modelação.

Os gliomas correspondem a 50% de todos os tumores cerebrais e a comunidade científica acredita que a razão para a ineficácia dos tratamentos actuais resulta da elevada mobilidade das células tumorais.

2 Modelos matemáticos

Os modelos matemáticos são ferramentas poderosas que permitem aos investigadores desenvolver e testar hipóteses que conduzem a um melhor entendimento dos processos envolvidos nos fenómenos em estudo.

A comparação dos resultados do modelo com os resultados reais permite corrigir o modelo por forma a que o mesmo passe a descrever o fenómeno de modo mais preciso. Este processo deve ser realizado de modo iterativo até que o modelo produza resultados que descrevam de forma eficaz o processo real. Nessa altura, os modelos matemáticos podem ser úteis para o desenvolvimento de hipóteses a serem testadas em futuros ensaios clínicos e para otimizar a concepção de estudos futuros.

A primeira proposta para modelação da forma como os gliomas se desenvolvem deve-se a Murray [5], que formulou o problema como uma lei de conservação em que a taxa de variação da população de células tumorais é definida pela soma da sua mobilidade (difusão) e pela taxa de proliferação. Matematicamente esta lei, para gliomas não tratados, é descrita pela equação de derivadas parciais

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot J = f(c), \quad (1)$$

onde $c(t, x)$ denota a densidade de células tumorais na posição x e no instante t , $f(c)$ denota a taxa de proliferação das células tumorais e ∇ define o operador gradiente espacial. Nas hipóteses da lei de Fick para a difusão,

$$J = -D \nabla \cdot c, \quad (2)$$

onde D é o coeficiente de difusão, o modelo pode então ser escrito na forma

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla \cdot c) + f(c). \quad (3)$$

Nos primeiros modelos foi assumido o tecido cerebral homogéneo e o crescimento tumoral exponencial, $f(c) = \rho c$. Este último continua a revelar-se eficaz nos intervalos de tempo considerados para os gliomas. Porém, na modelação do cérebro era necessária uma descrição mais rigorosa da sua geometria e estrutura. Swanson *et al.* [6] introduziram a complexa geometria cerebral e consideraram o coeficiente de difusão como sendo uma

função espacial, de modo a reflectir a observação de que as células do glioma exibem uma mobilidade mais elevada na massa branca do que na cinzenta. Essa descrição está disponível na base de dados BrainWeb [3].

Uma vez que a migração de células tumorais é o aspecto mais crítico dos tumores cerebrais, o processo de transporte tem que ser convenientemente entendido. Fedotov e Iomin [4] propuseram uma aproximação para a dicotomia migração-proliferação, que conduziu ao sistema diferencial

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \int_0^t \alpha(t-s) \nabla \cdot (D \nabla \cdot u(s)) ds - \beta_1 u + \beta_2 v \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \rho v + \beta_1 u - \beta_2 v, \end{cases} \quad (4)$$

onde $u(t, x)$ e $v(t, x)$ representam as densidades de células migratórias e proliferatórias, respectivamente, D é o coeficiente de difusão, ρ denota a taxa de proliferação, β_1 é a taxa de transição do estado migratório para o proliferatório, β_2 é a taxa de transição do estado proliferatório para o migratório e o núcleo $\alpha(t)$ é determinado pela função densidade ψ relativa aos tempos de espera entre saltos das células (no estado migratório).

Revela-se impossível obter uma expressão explícita para o núcleo $\alpha(t)$ em termos de uma função densidade $\psi(t)$ arbitrária. Considerem-se, no entanto, os tempos de espera definidos por $\psi(t) = \frac{\lambda^m t^{m-1} e^{-\lambda t}}{\Gamma(m)}$, onde $\Gamma(m)$ é a distribuição Gamma.

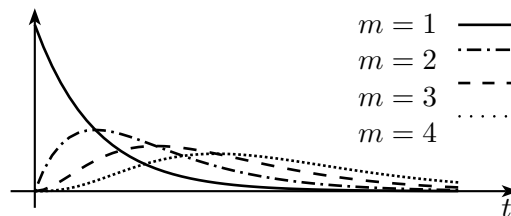


Figura 1: Função densidade $\psi(t)$ relativa aos tempos de espera.

Quando $m = 1$ tem-se $\psi(t) = \lambda e^{-\lambda t}$ e consequentemente $\alpha(t) = \lambda \delta(t)$, pelo que o sistema (4) assume a forma

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \nabla \cdot (D \nabla \cdot u) - \beta_1 u + \beta_2 v \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \rho v + \beta_1 u - \beta_2 v. \end{cases} \quad (5)$$

Se $m = 2$ vem que $\alpha(t) = \lambda^2 e^{-(2\lambda+\beta_1)t}$, e como tal (4) é dado por

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda^2 \int_0^t e^{-(2\lambda+\beta_1)(t-s)} \nabla \cdot (D \nabla \cdot u(s)) ds - \beta_1 u + \beta_2 v \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \rho v + \beta_1 u - \beta_2 v. \end{cases} \quad (6)$$

A primeira equação de (6) pode ser deduzida considerando a lei de Fick modificada,

$$J(x, t + \tau) = -\hat{D} \nabla \cdot u(x, t), \quad (7)$$

que estabelece que o fluxo no instante t está relacionado com o gradiente da concentração u num instante anterior. Isto significa que o sistema (6) incorpora um certo efeito de memória.

Observamos que em [1] e [2] os autores demonstraram que nem a lei de Fick clássica, como utilizado em (3), nem a lei de Fick generalizada, como utilizado em (6), conduzem a descrições eficazes para a evolução do tumor. De facto, a descrição mais precisa é obtida quando se considera uma ponderação dos dois modelos de difusão, conforme apresentado em [1].

Referências

- [1] A. Araújo, J.R. Branco, J.A. Ferreira, *On the stability of a class of splitting methods for integro-differential equations*, Applied Numerical Mathematics, 59 (2009), 436–453.
- [2] J. R. Branco, J.A. Ferreira, P. de Oliveira, *Numerical methods for the generalized Fisher-Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov equation*, Applied Numerical Mathematics, 57 (2007), 89–102.
- [3] C.A. Cocosco, V. Kollokian, R. K. S. Kwan, A. C. Evans, *Brainweb: online interface to a 3D MRI simulated brain database*, Neuroimage, 5 (1997), S425.
- [4] S. Fedotov, A. Iomin, *Migration and proliferation dichotomy in tumor-cell invasion*, Physical Review Letters, 98 (2007), 118110(1)–(4).
- [5] J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer, 2002.
- [6] K.R. Swanson, E.C. Alvord Jr, J.D. Murray, *A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter*, Cell Proliferation, 33 (2000), 317–330.
- [7] K.R. Swanson, C. Bridge, J.D. Murray, E.C. Alvord Jr, *Virtual and real brain tumors: using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion*, Journal of the Neurological Sciences, 216 (2003), 1–10.

SYMMETRIC COORDINATES FOR AN A_2B_2 MOLECULE

Daniela Coelho e João Brandão

CIQA, Dept. Química, Bioquímica e Farmácia - FCT
Universidade do Algarve - Campus de Gambelas
8005-139 FARO, Portugal
e-mail: dcoelho@ualg.pt

Resumo: Neste trabalho, é explicado, e aplicado a um sistema molecular do tipo A_2B_2 , um método para a construção de Superfícies de Energia Potencial invariantes para a troca de átomos idênticos.

Abstract A method to build potential energy surfaces with the correct permutational symmetry is explained and applied to an A_2B_2 molecular system.

palavras-chave: Grupo de simetria permutacional; função polinomial invariante; base de integridade.

keywords: Permutation symmetry group; invariant polynomial function; integrity basis.

1 Introduction

Due to the invariance of the electronic Hamiltonian, the Potential Energy Surface (PES) for a molecular system should be invariant to the permutation of identical atoms. Despite the development of the theory of invariant functions by Molien in 1897 [1] its application to physical science was not immediate. However, the construction of invariant functions of finite transformation groups has long been applied to crystal point groups [2], since the thermodynamic potentials of any symmetric system need to be invariant to the group of its symmetry.

One of the first applications of Molien's theorem to build a PES that include the correct permutation symmetry of identical atoms was proposed by Schmelzer and Murrell [3]. In this work the analytic form of an invariant potential function obtained was applied to tetra-atomic homonuclear molecules, a X_4 system.

Nowadays, where potential energy surfaces for systems with four or more atoms became feasible, the importance of including the correct permutation symmetry of identical atoms turns out to be a crucial task. In this work we illustrate the construction of a symmetric polynomial for an A_2B_2 system.

2 The Nuclear Permutation Group

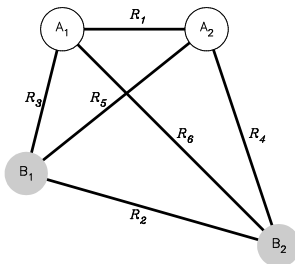


Figure 1: Bonds used in the present work for an A_2B_2 system

In Fig. 1 we plot an A_2B_2 system labelling the atoms and interatomic bonds. Using these labels, the exchange of the two A atoms can be described as:

$$(A_1 A_2) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 5 & 6 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where, for simplicity, we use the number i to represent the interatomic distance R_i . The other permutations of this system include the identity E , the exchange of two B atoms, $(B_1 B_2)$ and the simultaneous exchange of atoms A and B $(A_1 A_2)(B_1 B_2)$. The successive application of these permutations constitutes the Complete Nuclear Permutation (CNP) group of this molecule. Since we have two sets of identical atoms, the CNP group of this system will be given by the direct product of the groups $S_2^{(A)}$ and $S_2^{(B)}$ and it can be written as $S_2^{(A)} \otimes S_2^{(B)}$, which is isomorphic to the D_2 Point group.

Using the 6 internal coordinates, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 and R_6 , we can construct a 6-dimensional matrix representation of this D_2 Point group, with traces 6, 2, 2, and 2. This representation spans the $3 \times A, B_1, B_2$ and B_3 irreducible representations of this group.

3 Invariant polynomial

To build a polynomial invariant to the group operations, from a given set of coordinates, three questions must be answered; how many terms of each degree should we use; what is the smallest number of terms, called integrity basis, that can be used to build that polynomial; how can we define this integrity basis.

Molien [1] has shown that by using a set of independent coordinates, ξ_i , any invariant polynomial of a finite group can be generated by the expression

$$\phi_G(\lambda) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \frac{1}{\det[\mathbf{I} - \lambda \mathbf{M}(g)]}, \quad (2)$$

where \mathbf{I} is the identity matrix, λ is a dummy variable, g is an operation of the group G , $|G|$ is the order of the group and $\mathbf{M}(g)$ corresponds to the matrices of the representation in the ξ_i basis. Applying this expression to the above referred matrix representation, we obtain

$$\phi_G(\lambda) = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{(1-\lambda)^6} + \frac{3}{(1-\lambda)^2(1-\lambda^2)^2} \right], \quad (3)$$

which, as showed by Molien, can be rearranged to

$$\phi_G(\lambda) = \frac{1 + \lambda^3}{(1-\lambda)^3(1-\lambda^2)^3}, \quad (4)$$

with positive coefficients in the numerator. When Eq. 4 is expanded in terms of the dummy variable λ , we obtain

$$\phi_G(\lambda) = 1 + 3\lambda + 9\lambda^2 + 20\lambda^3 + 42\lambda^4 + 78\lambda^5 + \dots . \quad (5)$$

Eq. 5 shows how many terms of each degree we need to build an invariant polynomial. In the case of an A_2B_2 system, we will have an invariant of degree 0; 3 invariants of degree 1; 9 of degree 2; 20 of degree 3 and so on.

3.1 The integrity basis

It is known that any invariant polynomial function of a finite group can be developed in terms of a finite number of invariant polynomials, called integrity basis.

Having in mind that

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \dots, \quad (6)$$

we may expand the denominator of Eq. 4 in polynomials and see that the expansion in Eq. 5 is a product of seven polynomials: one is $1 + \lambda^3$; three others are complete expansions of a first degree term and the other three result from the expansion of second degree terms. This shows that the invariant polynomial of Eq. 5 can be built from six algebraically independent primary invariants, three of the first degree and three of the second degree and an auxiliary secondary invariant of the third degree, which can only be used once in each monomial.

We now refer to the definition of these primary and secondary invariants. As the two diatomic distances R_1 and R_2 do not exchange in any of these permutations, they belong to the totally symmetric representation of this group, A . Using the projection operator, we can construct combinations of the R_3 , R_4 , R_5 and R_6 coordinates that behave as the different irreducible representations of the D_2 group:

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \frac{1}{2}(R_3 + R_4 + R_5 + R_6) && \in A \\ \rho_2 &= \frac{1}{2}(R_3 + R_4 - R_5 - R_6) && \in B_1 \\ \rho_3 &= \frac{1}{2}(R_3 - R_4 + R_5 - R_6) && \in B_2 \\ \rho_4 &= \frac{1}{2}(R_3 - R_4 - R_5 + R_6) && \in B_3.\end{aligned}\tag{7}$$

Since the invariants must belong to the A representation, we can use the direct product multiplication table of the D_2 group to build totally symmetric terms from the ρ_2 , ρ_3 and ρ_4 coordinates. It can be easily shown that ρ_2^2 , ρ_3^2 and ρ_4^2 constitute the three independent primary invariants of second degree and that $\rho_2\rho_3\rho_4$ is the third degree secondary invariant.

4 Conclusion

We have shown that a PES invariant to the permutation of identical atoms of an A_2B_2 system can be constructed as combinations of the seven integrity basis terms: R_1 , R_2 , ρ_1 , ρ_2^2 , ρ_3^2 , ρ_4^2 , and $\rho_2\rho_3\rho_4$. This last term can only appear once in each monomial.

References

- [1] T. Molien, “Über die Invarianten der linearen Substitutionsgruppe”, *Sitz. Königl. Preuss. Akad. Wiss.*, (1897), pp. 1152–1156.
- [2] A.G. McLellan, “The derivation of generalised integrity bases for finite orthogonal groups and counting rules for numerator invariants and co-variants”, *J. Phys. C.: Solid St. Phys.*, Vol.12, No.5 (1979), pp. 753–760.
- [3] A. Schmelzer and J.N. Murrell, “The general analytic expression for S_4 -symmetry-invariant potential functions of tetra-atomic homonuclear molecules”, *Int. J. Quantum Chem.*, Vol.28, No.2 (1985), pp. 287–295.