

BUTLLETÍ

DE LA SOCIETAT CATALANA
DE MATEMÀTIQUES
Institut d'Estudis Catalans

— í n d e x —

- ☐ *Joaquim Bruna*
Aproximació no lineal i mostratge comprimit 109
- ☐ *Pilar Guerrero i Tomás Alarcón*
Models estocàstics d'escala múltiples per la dinàmica
de poblacions cel·lulars: mètodes asimptòtics i numèrics 125
- ☐ *Timothy G. Myers i Sarah L. Mitchell*
Una anàlisi matemàtica del moviment d'una pilota
de futbol durant el vol 169
- ☐ *Joaquim Ortega-Cerdà*
Sèries de potències (aleatòries) 195
- ☐ English summaries 209



Volum 30 • Número 2 • Any 2015



Institut
d'Estudis
Catalans

BUTLLETÍ

DE LA SOCIETAT CATALANA
DE MATEMÀTIQUES

Institut d'Estudis Catalans

Volum 30 • Número 2 • Desembre 2015

BARCELONA
2015

© dels autors dels articles

Editat per la Societat Catalana de Matemàtiques
filial de l'Institut d'Estudis Catalans
Carrer del Carme, 47
08001 Barcelona

Text revisat lingüísticament
per la Unitat de Correcció del Servei Editorial de l'IEC.

Imprès a Limpergraf, SL

ISSN: 0214-316-X
Dipòsit Legal: B. 19272-1987

Són rigorosament prohibides, sense l'autorització escrita dels titulars del *copyright*, la reproducció total o parcial d'aquesta obra per qualsevol procediment i suport, incloent-hi la reprografia i el tractament informàtic, la distribució d'exemplars mitjançant lloguer o préstec comercial, la inclusió total o parcial en bases de dades i la consulta a través de xarxa telemàtica o d'Internet. Les infraccions d'aquests drets estan sotmeses a les sancions establertes per les lleis.

Índex

JOAQUIM BRUNA
Aproximació no lineal i mostratge comprimit 109

PILAR GUERRERO I TOMÁS ALARCÓN
Models estocàstics multiescala de la dinàmica de poblacions cel·lulars:
mètodes asimptòtics i numèrics 125

TIMOTHY G. MYERS I SARAH L. MITCHELL
Una anàlisi matemàtica del moviment d'una pilota de futbol durant el vol..... 167

JOAQUIM ORTEGA-CERDÀ
Sèries de potències (aleatòries)..... 193

English summaries..... 207

Aproximació no lineal i mostratge comprimit

JOAQUIM BRUNA

Resum: En aquest article donem una pinzellada a un camp relativament nou de la matemàtica, el *mostratge comprimit*, un terme que correspon a l'expressió *compressed sensing* o *compressive sampling*. És una branca del tractament del senyal que d'alguna manera ha aparegut de forma natural associada a un altre gran camp ben modern i present, l'anomenat *big data analysis*. El mostratge compressiu no tracta pas de la manipulació de grans bases de dades per extreure'n informació útil, sinó justament de no generar informació inútil, innecessària. Per a l'exposició, ens referirem breument a una altra teoria que té entitat per si sola, la *teoria de l'aproximació no lineal*.

Paraules clau: discretització, aproximació lineal, aproximació no lineal, bases hilbertianes, mostratge comprimit, vectors rars, descodificadors, matrius aleatòries, bases incoherents.

Classificació MSC2010: 94A12, 68P30, 41A46.

1 Analògic vs. digital

Les matemàtiques sovint utilitzen en els seus models per descriure el món funcions analògiques $f(t)$, $f(x)$, $t, x \in I$, on I designa aquí un interval, acotat o no. Els models teòrics suposen que x o t és una variable independent que pot prendre tots els valors de I , un continu de valors, i podem veure f com un vector que té un continu de components. Com que les matemàtiques pretenen quantificar magnituds, se suposa en els models que aquestes funcions són quantificables en algun sentit. El més comú és imposar que tenen energia finita,

$$\|f\| = \left(\int_I |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} < \infty$$

i hom diu llavors que $f \in L^2(I)$. Hem de veure aquesta expressió com la versió contínua de la norma euclidiana que ens és familiar, ja que no fem altra cosa

Aquest article és una versió desenvolupada de la lliçó inaugural de Matemàtiques del curs 2013–2014 a la Universitat Autònoma de Barcelona, i es nodreix de les referències [7], [8] i [10].

que sumar el quadrat de totes les components (infinites) del vector f . Així, $L^2(I)$ és l'espai euclidià d'un continu de dimensions, i la norma ens serveix per quantificar com són de properes dues funcions,

$$\|f - g\| = \left(\int_I |f(x) - g(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Quan parlem d'una *digitalització o discretització* de f , ens referim d'una forma imprecisa a quelcom que representa o aproxima f però que no depèn d'un continu de dimensions, sinó d'un nombre finit o, com a molt, numerable de dimensions. Sovint això es formula per a funcions d'un determinat subespai E de $L^2(I)$. Per precisar, aquí direm que una digitalització (ideal) de $f \in E \subset L^2(I)$ consisteix senzillament a expressar el vector f en una base ortonormal numerable (base hilbertiana) (ψ_n) de E . Això és

$$f = \sum_n \langle f, \psi_n \rangle \psi_n,$$

on els coeficients són les correlacions

$$\langle f, \psi_n \rangle = \int_I f(x) \overline{\psi_n(x)} dx.$$

Les correlacions $\langle f, \psi_n \rangle$ constitueixen una *digitalització* de f .

El concepte de *base ortonormal* és, per tant, el mateix que el de *base cartesiana de l'espai euclidià*. Els vectors ψ_n són unitaris i perpendiculars dos a dos, $\langle \psi_n, \psi_m \rangle = 0$, si $n \neq m$, i hom té el teorema de Pitàgores

$$\|f\|^2 = \sum_n |\langle f, \psi_n \rangle|^2,$$

que en aquest context s'anomena *teorema de Parseval*.

L'exemple històricament més important és la base de Fourier de sinus i cosinus o, si es vol, d'exponencials complexes. Si $I = [-a, a]$ és un interval acotat, la base de Fourier de $L^2(I)$ consisteix en les exponencials complexes

$$\frac{1}{\sqrt{2a}} e^{\frac{\pi}{a} i n t}, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

El desenvolupament en sèrie de Fourier pren la forma

$$f(t) = \sum_n c_n e^{\frac{\pi}{a} i n t},$$

amb coeficients

$$c_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a f(t) e^{-\frac{\pi}{a} i n t} dt,$$

que s'anomenen *coeficients de Fourier*. Evidentment, tota funció $f \in L^2(I)$ s'identifica amb una funció $2a$ -periòdica, de manera que el desenvolupament anterior ve a dir que tota funció $2a$ -periòdica és una superposició, és a dir, una suma, de les funcions $2a$ -periòdiques més elementals, que són $\cos(\frac{\pi}{a} n t)$, $\sin(\frac{\pi}{a} n t)$, $n \in \mathbb{N}$.

Un altre exemple paradigmàtic és el conegut teorema de Shannon-Whittaker-Kotelnikov. Sigui E la classe de funcions $f \in L^2(\mathbb{R})$ que s'obtenen com a superposició de sinus i cosinus de freqüències ω , amb $\omega \leq a$,

$$f(x) = \int_{|\omega| \leq a} g(\omega) e^{2\pi i \omega x} d\omega, \quad \text{amb } g \in L^2(\mathbb{R}).$$

Aquestes són les funcions de *banda limitada*, amb amplada de banda a . Llavors

$$f(x) = \sum_n f\left(\frac{n}{2a}\right) \psi_n(x), \quad \text{on } \psi_n(x) = \frac{\sin \pi(2ax - n)}{\pi(2ax - n)}.$$

Les funcions ψ_n , que són traslladades i reescalades de la funció sinus cardinal $\frac{\sin \pi x}{\pi x}$, formen una base ortonormal de E ; en aquest cas, les correlacions $\langle f, \psi_n \rangle$ coincideixen amb els valors $f(\frac{n}{2a})$ i $\frac{1}{2a}$ s'anomena *el pas de Nyquist*. Matemàticament, aquest resultat és equivalent al que hem comentat, en el sentit que tota funció de $L^2(I)$ es pot escriure com la suma d'una sèrie de Fourier.

Si, a més, f tingui suport en $[-T, T]$, això significaria que depèn d'aproximadament $4Ta$ paràmetres. Llevat del cas que $f = 0$, no hi ha funcions de banda limitada amb suport compacte, perquè tota funció de banda limitada té una extensió entera; tanmateix, el treball de Landau i Pollack mostra que l'espai dels senyals que aproximadament tenen suport temporal de mida T i aproximadament amplada de banda a té dimensió aproximadament $4Ta$, on, és clar, cal precisar el significat en cada cas del terme *aproximadament*.

Un altre exemple molt important de bases i de digitalització són les *bases d'ondetes*. Ens limitarem aquí a un cas especial. Una *ondeta amb suport compacte* és una funció ψ amb suport compacte dins l'interval $(-1/2, 1/2)$, normalitzada, amb la meravellosa propietat que les versions reescalades i dilatades

$$\psi_{k,m}(x) = 2^{\frac{k}{2}} \psi(2^k x - m), \quad k, m \in \mathbb{Z}$$

formen una base hilbertiana de $L^2(\mathbb{R})$, és a dir,

$$f = \sum_{k,m} \langle f, \psi_{k,m} \rangle \psi_{k,m}, \quad \text{per a } f \in L^2(\mathbb{R}).$$

Aquí hi ha un doble índex (k, m) i les correlacions $\langle f, \psi_{k,m} \rangle$ són mitjanes ponderades de f en l'interval diàdic de mida 2^{-k} centrat en $\frac{m}{2^k}$.

Veiem que en les ondetes hi ha dos paràmetres, un paràmetre de posició m i un paràmetre d'escala k . L'exemple més senzill és l'ondeta de Haar, que és la funció que val -1 en $[-\frac{1}{2}, 0]$ i 1 en $[0, \frac{1}{2}]$. L'existència d'ondetes d'aquest tipus, que, a més, són regulars, és un fet molt important, degut a Daubechies.

Un tercer exemple ben clàssic de bases el donen les diverses famílies de polinomis (p_n) , p_n de grau n , que formen una base hilbertiana de $L^2(0, 1)$, o de $L^2(0, 1)$ amb un pes. Exemples en són els polinomis de Hermite, Laguerre, Jacobi, Gegenbauer, Chebyshev, Legendre, etc. Cada problema de Sturm-Liouville porta de forma natural a una base d'aquestes característiques.

2 Aproximació lineal i no lineal

Suposem que volem aproximar f amb una informació de mida N utilitzant una base (ψ_n)

$$f = \sum_n c_n \psi_n.$$

Una forma de fer-ho és, senzillament, mitjançant els N primers coeficients

$$f^N = \sum_{n=1}^N c_n \psi_n, \quad \|f - f^N\| = \left(\sum_{n>N} |c_n|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty.$$

Notem que aquesta definició pressuposa que la base (ψ_n) està ordenada o jerarquitzada d'alguna forma. Per exemple, en termes de la freqüència en la base de Fourier, la grandària dels paràmetres de posició i freqüència, etc. Òbviament, en aquest cas, hom té $(f + g)^N = f^N + g^N$, és a dir, l'aproximació és lineal.

Ara bé, això no és el millor que podem fer. Si prenem els coeficients c_n que corresponen a un subconjunt A dels números naturals i formem

$$f^A = \sum_{n \in A} c_n \psi_n,$$

tindrem

$$\|f - f^A\| = \left(\sum_{n \notin A} |c_n|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

i, per tant, la millor aproximació de f utilitzant N coeficients l'obtindrem ordenant de més gran a més petit en valor absolut els coeficients c_n (que tendeixen a zero quan $n \rightarrow \infty$) i quedant-nos amb els N coeficients més grans, els més significatius. Així, definim

$$f_N = \sum_{k=1}^N c_{n_k} \psi_{n_k}, \quad |c_{n_1}| \geq |c_{n_2}| \geq |c_{n_3}| \dots$$

Aquesta és ara una aproximació adaptativa però no lineal: $(f + g)_N \neq f_N + g_N$.

És natural preguntar-se com són de bones aquestes aproximacions. Quantitativament: com de gran hem de prendre N per tal que l'error sigui més petit que una quantitat ε prefixada? Aquesta qüestió s'estudia de la manera següent: si E és una determinada classe de funcions, com decau $\|f - f_N\|$ si $f \in E$? Típicament, voldríem, per exemple, que fos

$$\|f - f_N\| \leq C \|f\| \frac{1}{N^\alpha},$$

amb un valor de α com més gran millor. Aquest exponent α depèn de la classe E i de la base utilitzada (ψ_n) .

Les bases d'ondetes són molt importants en les aplicacions. El fet matemàtic que ho explica és que, per a moltes classes E de funcions (particularment, les que modelitzen imatges), les bases d'ondetes donen el millor exponent α , de manera que, amb N no gaire gran, l'aproximació de f per f_N ja és prou bona. Dit d'una altra manera, les bases d'ondetes tenen la propietat de representar acuradament funcions d'interès pràctic amb molt pocs coeficients significatius, perquè la seva expressió exacta té una expressió rara, *sparse*, amb molts coeficients molt petits, en les bases d'ondetes. Això les fa especialment útils, per exemple, a l'hora de comprimir imatges en les nostres càmeres digitals. En termes generals, si una imatge es representa en una base d'ondetes de Daubechies (més precisament, en la seva versió bidimensional), hi ha aproximadament 10^6 coeficients; si ens quedem amb el cinc per cent dels coeficients més significatius, fent zero els altres, i fem la reconstrucció a partir d'aquests coeficients, veurem una imatge pràcticament idèntica.

3 Un nou pas: el mostratge comprimit (*compressed sensing o compressive sampling*)

En la secció anterior, hem vist la utilitat de l'aproximació no lineal en bases d'ondetes. Representades en bases d'ondetes, moltes funcions d'interès pràctic s'aproximen acuradament de forma no lineal.

Però reflexionem una mica. Hom fa l'esforç d'obtenir un milió de coeficients per després negligir-los pràcticament tots. No és gens eficient això!

És en aquest punt on apareix la pregunta natural, clau, i que ens portarà a un nou paradigma, el del *mostratge comprimit*: és possible dissenyar algun algorisme que ens permeti obtenir directament f_N només amb (aproximadament) N observacions?

La resposta, sorprenent, és sí, i la dóna la teoria del mostratge comprimit. L'objectiu d'aquesta secció és explicar en quin sentit això és cert i, sobretot, de quina manera. Veurem com, en la resposta a aquesta pregunta, es combinen nocions d'àlgebra lineal —potser no exactament de l'àlgebra lineal estàndard— amb nocions estocàstiques molt actuals, com ara les matrius aleatòries.

Començarem formulant el problema en el marc de l'àlgebra lineal.

Tenim un vector $f \in \mathbb{R}^D$, on D és enorme, per exemple, el nombre de píxels d'una imatge. Podem pensar també que f és una funció definida a $\{1, 2, \dots, D\}$. Tenim una expressió de f en una base ortonormal

$$f = \sum_n x_n \psi_n, \quad f = \Psi X, \quad \text{on } \Psi = (\psi_1, \dots, \psi_D) \text{ i } X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix}.$$

Suposem que f és N -rar en la base Ψ , és a dir, que $f = f_N$ (que vol dir que f tan sols té N coeficients no nuls), o bé que és *compressible*, en el sentit

que $\|f - f_N\| = \|X - X_N\|$ tendeix a zero molt ràpidament. Una observació fonamental a tenir en compte per entendre la situació és la següent: sabem que f és N -rar en la base de les ψ_n (per exemple, perquè f és una imatge i la base és una base d'ondetes), però no sabem quins són els N -coeficients no nuls (si ho sabéssim, la situació fóra trivial, la resoldríem amb l'àlgebra lineal estàndard).

Modelitzem ara el mostreig de f , la informació que en tenim, mitjançant unes correlacions amb altres funcions ϕ_k linealment independents:

$$y_k = \langle f, \phi_k \rangle, \quad k = 1, \dots, M,$$

on el nombre de mostres és M , que hem de pensar com un nombre molt més petit que D . Llavors la pregunta és: podem recuperar f a partir dels y_k ? Com que $f = f_N$, si f és N -rar, depèn de N coeficients, el millor que podem esperar és que $M = N$.

4 L'àlgebra lineal dels vectors rars

Representem-ho tot en termes matricials

$$Y = \Phi f = \Phi \Psi X = AX, \quad \text{on } A: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^M \text{ i } M \ll D.$$

La matriu $A = \Phi \Psi$, d'ordre $M \times D$, s'anomena *de mostratge (sensing matrix)*, i té rang M . Llavors pretenem recuperar X de $Y = AX$ sabent que X és N -rar o bé compressible. Posem Σ_N per designar la classe dels vectors N -rars de $\mathbb{R}^D$. Tenim moltes menys equacions, M , que incògnites, D , però sabem que només N incògnites no són zero, sense saber, però, quines.

En general, un *descodificador* és una aplicació

$$\Delta: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^D$$

tal que $\Delta AX = X$ si $X \in \Sigma_N$. Un descodificador tria per a cada $Y \in \mathbb{R}^M$ un vector $\Delta(Y)$ de la varietat lineal $B(Y) = \{Z : AZ = Y\}$.

Un descodificador no és necessàriament lineal, si bé aquí suposarem per simplificar que $\Delta 0 = 0$. Es vol, per tant, que un descodificador sigui un invers per l'esquerra de A sobre els vectors rars. Per definició, són inversos per la dreta de A , $A\Delta Y = Y$. Notem que triant en $B(Y)$ el vector Z de norma mínima s'obté un invers per la dreta, lineal, que pren valors en l'ortogonal del nucli de A .

Volem que AX determini X per a $X \in \Sigma_N$, és a dir: $X, X' \in \Sigma_N$, amb $AX = AX'$ ha d'impliar $X = X'$, o bé, si $X - X' \in \ker(A)$, llavors $X = X'$. Volem, per tant, que $\ker(A) \cap \Sigma_{2N} = 0$. De fet, en aquest cas, podem definir un descodificador. Definim senzillament $\Delta(Y)$ triant entre tots els vectors Z tals que $AZ = Y$ un que tingui suport mínim, és a dir, amb el màxim nombre de components nul·les. Llavors, si X és N -rar, ΔAX és un vector Z tal que $AZ = AX$ que té suport mínim, i, per tant, també és N -rar. En conseqüència, $X - Z \in \ker(A) \cap \Sigma_{2N}$ i $Z = X$.

DEFINICIÓ 1. Associem a cada matriu A d'ordre $M \times D$ el número $s(A)$ definit com el més petit nombre de columnes de A que són linealment dependents. És a dir, qualssevol $s(A) - 1$ columnes de A són sempre linealment independents.

A diferència de la noció de *rang habitual*, el número $s(A)$ depèn de A i no només del subespai engendrat per les columnes de A . Evidentment, hom té que $s(A) \leq \text{rang}(A) + 1$.

La igualtat $\ker(A) \cap \Sigma_{2N} = 0$ significa que no poden haver-hi mai $2N$ columnes linealment dependents, és a dir, que qualssevol $2N$ columnes de A han de ser linealment independents, això és, $2N \leq s(A) - 1$. Així, hom té que $Y = AX$ determina $X \in \Sigma_N$, si i només si $s(A) > 2N$. Ens interessen, doncs, matrius que compleixin aquesta condició, que, tal com hem vist, és equivalent a l'existència d'un descodificador Δ que recuperi $X \in \Sigma_N$ de $Y = AX$.

Naturalment, aquesta condició implica que $2N \leq \text{rang}(A)$ i, per tant, que $2N \leq M$. Fixats N, D, M amb $M \geq 2N$, sempre hi ha matrius d'ordre $M \times D$ tals que qualssevol $2N$ columnes siguin linealment independents. És suficient trobar D vectors a $\mathbb{R}^{2N}$ tals que qualssevol $2N$ d'ells siguin linealment independents. Si $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_D$ són arbitraris, la matriu que té entrada t_j^{i-1} a la fila i , columna j , té tots els menors d'ordre $2N \times 2N$ que són matrius de Vandermonde i, per tant, invertibles. Aquestes matrius són, però, mal condicionades i, per tant, no adequades per al càlcul numèric.

Ara bé, per tal que un descodificador Δ tingui interès pràctic, ha de ser robust, en el sentit que si $X \notin \Sigma_N$ però $\|X - X_N\|$ és petit, voldríem que també ΔAX fos proper a X d'una forma controlada. El més natural és imposar que existeixi una constant $C > 0$ tal que

$$\|\Delta AX - X\| \leq C\|X - X_N\|, \quad (1)$$

que, naturalment, quantifica el fet que $\Delta AX = X$, si X és N -rar.

Òbviament, això implica

$$\|X\| \leq C\|X - X_N\|, \quad X \in \ker(A),$$

per a una certa constant C . De fet, implica aquesta mateixa desigualtat, però amb $2N$ en lloc de N (vegeu [8]):

$$\|X\| \leq C\|X - X_{2N}\|, \quad X \in \ker(A). \quad (2)$$

En efecte: donat $X \in \ker(A)$, considerem una descomposició de X_{2N} en dos vectors N -rars, $X_{2N} = X_1 + X_2$, i sigui $X_3 = X - X_{2N}$. Com que $-X_1 \in \Sigma_N$, tindrem que $-X_1 = \Delta A(-X_1)$; com que $X \in \ker(A)$, tindrem que $A(-X_1) = A(X_2 + X_3)$; per tant, $-X_1 = \Delta A(X_2 + X_3)$. Aleshores, per (1),

$$\|X\| = \|X_2 + X_3 - \Delta A(X_2 + X_3)\| \leq C\|(X_2 + X_3) - (X_2 + X_3)_N\|.$$

Ara bé, com que X_2 és N -rar, és clar que la darrera expressió és menor o igual que $\|X_3\| = \|X - X_{2N}\|$.

Quan es compleix (2), hom diu que A té la propietat NSP (*null space property*) d'ordre $2N$ respecte de la norma euclidiana.

A la pràctica, els descodificadors han de ser també robusts respecte dels errors, perquè les mostres poden contenir soroll. No mesurarem $Y = AX$ exactament, sinó

$$Y = AX + Z,$$

on Z és un error, estocàstic o determinista. Si Δ és un descodificador, diem que és *robust* si

$$\|\Delta(AX + Z) - X\| \leq C\|Z\|, \quad X \in \Sigma_N, \quad Z \in \mathbb{R}^D. \quad (3)$$

Anàlogament a les altres propietats, aquesta condició natural —l'existència d'un descodificador robust— implica una propietat de la matriu A , concretament

$$\|A(X)\| \geq \frac{1}{C}\|X\|, \quad X \in \Sigma_{2N}. \quad (4)$$

Per veure-ho, siguin $X, Y \in \Sigma_N$ i definim $Z = \frac{1}{2}A(X - Y)$, de manera que

$$AX - Z = AY + Z = \frac{1}{2}A(X + Y).$$

Si $W = \Delta(AX - Z) = \Delta(AY + Z)$, (3) implica

$$\|X - Y\| \leq \|X - W\| + \|W - Y\| \leq 2C\|Z\| = C\|AX - AY\|.$$

Fixem-nos que (4) implica que $X \in \Sigma_N$ es pot recuperar de AX .

La definició següent fou introduïda a [6] i [2].

DEFINICIÓ 2. La matriu A satisfà la propietat RIP (*restricted isometry property*) d'ordre N , si hi ha δ_N petit tal que

$$(1 - \delta_N)\|X\|^2 \leq \|AX\|^2 \leq (1 + \delta_N)\|X\|^2, \quad X \in \Sigma_N.$$

Significa que qualssevol N columnes de A són gairebé ortogonals. Per tant, si A satisfà la propietat RIP d'ordre $2N$, A preserva aproximadament la distància entre dos vectors N -rars.

La propietat RIP implica una versió de la propietat NSP, però amb la norma L^1 . La norma L^1 d'un vector X es defineix com a

$$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^D |x_i|.$$

Per a un vector $X \in \Sigma_N$, la desigualtat de Schwarz implica que

$$\|X\|_1 \leq \sqrt{N}\|X\|.$$

El resultat precís, que no demostrarem, és que si A té la propietat RIP d'ordre N amb una constant $\delta_N < \sqrt{2} - 1$, llavors

$$\|X\| \leq C \frac{\|X - X_{2N}\|_1}{\sqrt{N}}, \quad X \in \ker(A),$$

$$\text{amb } C = \frac{2}{1 - (1 + \sqrt{2})\delta_N}.$$

5 El descodificador basat en la norma L^1

Reprenem la situació anterior. Tenim $Y = AX$, on A és una matriu de mostratge $M \times D$ amb $M \ll D$. Tanmateix, pretenem recuperar $X \in \mathbb{R}^D$ de $Y = AX \in \mathbb{R}^M$ utilitzant la informació que X és N -rar o N -compressible. A la secció anterior, hem vist condicions sobre la matriu A que són necessàries per tal que pugui existir un descodificador Δ que permeti obtenir X de AX quan $X \in \Sigma_N$ d'una forma estable i robusta. En aquesta secció, descriurem la situació pel que fa a la suficiència d'aquestes condicions, és a dir, a la construcció de descodificadors concrets. Recordem que definir un descodificador vol dir simplement definir un criteri per tal de seleccionar per a cada Y un vector de la varietat lineal $B(Y)$.

Atès que el nostre propòsit principal és recuperar vectors rars, el més natural, allò que sembla més intuïtiu, és triar el més rar dels vectors de $B(Y)$, és a dir, podem considerar el descodificador $\Delta_0(Y) = Z$, on Z és el vector $Z \in B(Y)$ que minimitzi el nombre $\|Z\|_0$ de components no nul·les. Si la matriu A és injectiva sobre els vectors N -rars, és a dir, $s(A) > 2N$, ja hem vist que $\Delta AX = X$, si $X \in \Sigma_N$. Ara bé, el problema amb aquest descodificador és que $\|Z\|_0$ no és convex i la implementació pràctica no és factible. De fet, s'ha demostrat que implementar Δ_0 en un ordinador és *NP-hard*, és a dir, d'una gran complexitat de càlcul.

Hem vist que la propietat NSP d'ordre $2N$, equivalent a l'equació (2), és necessària per a l'existència d'un descodificador que compleixi (1). Ara veurem que també és suficient; vegeu [8]. En efecte, en aquest cas, triem entre tots els vectors Z tals que $AZ = Y$ aquell per al qual $\|Z - Z_N\|$ és mínim, és a dir, el que millor s'aproxima per vectors N -rars.

Com que $X - Z$ està en el nucli d' A , (2) implica

$$\|X - Z\| \leq C \|X - Z - (X - Z)_{2N}\|.$$

En aquest punt, recordem que X_{2N} és la millor aproximació de X amb $2N$ coeficients; per tant, hom té, en general, $\|(U+V) - (U+V)_{2N}\| \leq \|U - U_N\| + \|V - V_N\|$. Amb això, l'expressió anterior és menor o igual que

$$C(\|X - X_N\| + \|Z - Z_N\|).$$

Per definició, $\|Z - Z_N\| \leq \|X - X_N\|$ i, per tant,

$$\|X - Z\| \leq 2C \|X - X_N\|.$$

Així, hem vist que la propietat NSP d'ordre $2N$ és equivalent a l'existència d'un descodificador Δ que compleixi (1). Com que X_N és, per definició, la millor aproximació de X amb N coeficients, la propietat NSP d'ordre $2N$ és equivalent a la condició

$$\|X\| \leq C\|X - X_\Gamma\|, \quad X \in \text{Ker}(A), \quad \text{cardinal}(\Gamma) \leq N. \quad (5)$$

Aquí $\Gamma \subset \{1, 2, \dots, N\}$ i el vector X_Γ és el que s'obté de X conservant les components que corresponen a Γ i fent zero les altres.

Ara bé, veurem tot seguit que això implica que $M \geq C^{-2}D$ (c.f. [8]). Per al cas que el cardinal de Γ sigui 1, (5) significa que per a tot $j = 1, \dots, D$ hom té

$$\sum_{i=1}^D x_i^2 \leq C^2 \sum_{i \neq j} x_i^2,$$

que implica

$$x_j^2 \leq (C^2 - 1) \sum_{i \neq j} x_i^2 = (C^2 - 1)(\|X\|^2 - x_j^2),$$

i, per tant,

$$x_j^2 \leq \left(1 - \frac{1}{C^2}\right) \|X\|^2.$$

Això hauria de ser cert per a tot X en el nucli de A . Sigui $e_1, \dots, e_D$ la base canònica de $\mathbb{R}^D$ i sigui $v_1, \dots, v_{D-M}$ una base ortonormal del nucli de A . Sigui P la projecció ortogonal sobre el nucli de A . Llavors, per a $X = P(e_j)$ obtenim

$$\langle P(e_j), e_j \rangle^2 \leq \left(1 - \frac{1}{C^2}\right),$$

que és el mateix que

$$\sum_{i=1}^{D-M} \langle e_j, v_i \rangle^2 \leq \left(1 - \frac{1}{C^2}\right), \quad j = 1, \dots, D.$$

Sumant respecte de j obtenim

$$D - M = \sum_{i=1}^{D-M} \|v_i\|^2 \leq D \left(1 - \frac{1}{C^2}\right),$$

és a dir, $M \geq C^{-2}D$.

Aquest és un resultat *negatiu*, ja que ens indica que M ha de ser de l'ordre de D i no de N , que és el que esperàvem.

Una tercera possibilitat és minimitzar una norma diferent de l'euclidiana: per exemple, la norma L^1 . Aquesta norma, en un cert sentit, està més ben adaptada a la raresa dels vectors. Genèricament, el vector d'una varietat lineal que minimitza la norma L^1 tendeix a ser rar, com es veu a la figura 1.

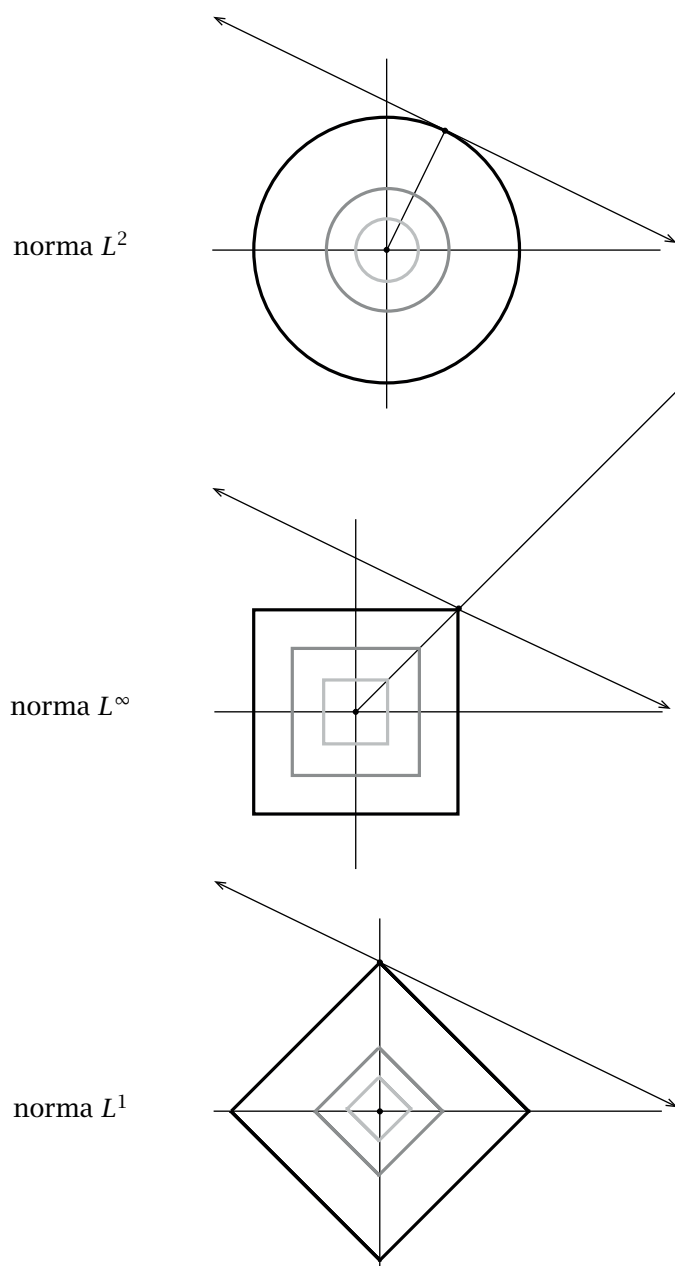


FIGURA 1: Els gràfics mostren la selecció, en una varietat lineal (en aquest cas una recta), del vector que minimitza una certa norma. Equivalentment, mostren com una bola associada a la norma va creixent fins que toca a la varietat lineal. Observi's que tan sols per a la norma L^1 el punt de contacte és un vector rar (en els eixos de coordenades).

En conseqüència, sembla raonable fer la recuperació dels vectors rars minimitzant la norma L^1 . Tornant al nostre problema, definim $\Delta(Y)$ com el vector $Z \in B(Y)$ que minimitzi $\|Z\|_1$. És a dir, per recuperar X , estudiem $\hat{X} = \Delta AX = Z$ tal que $AZ = AX$ minimitzi $\|Z\|_1$. Entre tots els vectors que són coherents amb les observacions, prenem el que minimitza la norma L^1 .

Aquest és un problema de programació lineal que es pot tractar computacionalment d'una forma molt eficient.

El teorema següent confirma les expectatives.

TEOREMA 3. *Suposem que la matriu A compleix la propietat RIP d'ordre $2N$ amb $\delta_{2N} < \sqrt{2} - 1$. Aleshores, la solució $\hat{X}$ definida anteriorment compleix*

- $\|\hat{X} - X\| \leq C \frac{\|X - X_N\|_1}{\sqrt{N}}$.
- $\|\hat{X} - X\|_1 \leq C \|X - X_N\|_1$.
- $\|\hat{X} - X_N\| \leq 2C \|X - X_N\|_1$.

A més, aquesta reconstrucció és robusta: si donat $\varepsilon > 0$ posem $B(Y) = \{Z \in \mathbb{R}^D \text{ amb } \|AZ - Y\| \leq \varepsilon\}$, la solució $\hat{X}$ compleix

$$\|\hat{X} - X\| \leq C \frac{\|X - X_N\|_1}{\sqrt{N}} + C\varepsilon.$$

Aquest teorema, demostrat a [5], és un resultat bastant notable. En destaquem els punts següents:

1. Si X és N -rar, aleshores $X = X_N$ i tenim reconstrucció exacta. Si no, ens diu que la qualitat de $\hat{X}$, mesurada per l'error $\|\hat{X} - X\|_1$, és tan bona com si coneguéssim d'antuvi les N coordenades més grans de X . I, a més, és robust.
2. L'algorisme Δ és independent de N , de les posicions dels coeficients i de les seves magnituds. Si la matriu A té la propietat RIP d'ordre $2N$, tindrem reconstrucció exacta.

6 I com trobem matrius $M \times D$ de mostratge A que tinguin la propietat RIP d'ordre N ?

El teorema anterior és prou satisfactori sempre que siguem capaços de trobar matrius de mostratge que compleixin la hipòtesi. De fet, ens interessa també que ho compleixin amb M —el nombre de mostres— el més petit possible, idealment de l'ordre de N . O podem pensar-ho al revés: amb M fixat, ens interessa que N sigui el més gran possible. Hi ha construccions deterministes de matrius A que compleixen la hipòtesi, però amb M massa gran. Com sovint passa, però, les construccions aleatòries gairebé sempre funcionen.

Per exemple, hom pot provar que si es prenen les entrades de A independents i idènticament distribuïdes segons una llei contínua, es complirà $s(A) = m + 1$ amb probabilitat 1. El resultat que ens interessa és, però, el següent:

TEOREMA 4. *Considerem les matrius aleatòries de mida $M \times D$ obtingudes d'alguna de les maneres següents:*

1. *Triant D vectors columna a l'atzar (amb distribució uniforme) a l'esfera unitat de $\mathbb{R}^M$.*
2. *Prenent com a entrades de A variables $N(0, \frac{1}{M})$ independents.*
3. *Prenent com a entrades de A variables independents amb valors $\pm \frac{1}{\sqrt{M}}$ de probabilitat $\frac{1}{2}$.*

Llavors, si $M \geq CN \log \frac{D}{N}$, A compleix la propietat RIP d'ordre $2N$ amb constant $< \sqrt{2} - 1$, amb una probabilitat $\geq 1 - e^{-cM}$, on c és una constant que depèn de C .

Aquest resultat no és difícil de provar: és conseqüència dels anomenats *fenòmens de concentració de mesura*; vegeu [1]. El que és significatiu en el resultat és el fet que $M \geq CN \log \frac{D}{N}$, és a dir, que M no és pas gaire més gran que N . Aquesta cota inferior de M és òptima en el teorema, perquè hom pot provar que tota matriu $M \times D$ que compleixi la propietat RIP d'ordre $2N$ amb constant $\delta < \frac{1}{2}$ ha de satisfer l'acotació inferior anterior per a M .

En definitiva, hem vist que una estratègia efectiva és agafar matrius de mostratge aleatòries i utilitzar la minimització en norma L^1 .

El cas gaussià té un valor afegit rellevant. Tornem al començament, quan la matriu de mostratge era $A = \Phi\Psi$. Teníem $f = \Psi X$, i fem un mostratge de f amb Φ , $Y = \Phi f$, $Y = y_1, y_2, \dots, y_M$). Considerem $f^* = \Psi X^*$, on X^* és el vector de norma L^1 mínima tal que

$$\langle \Psi X^*, \phi_k \rangle = y_k, \quad k = 1, \dots, M.$$

Si f és rar en la base Ψ i A compleix les hipòtesis del teorema 3, tindrem reconstrucció exacta, $f^* = f$. Ara bé, si Φ és gaussiana en el sentit del teorema 4, A també és gaussiana per a tota Ψ i servirà com a matriu aleatòria.

Això significa que l'algorisme funcionarà per a totes les bases Ψ , Φ , és a dir, és universal. Dit d'una altra manera, no necessitem saber en quina base f és rara, només que ho és en alguna!

7 La coherència entre dues bases ortonormals

Hi ha altres maneres d'aproximar-se al concepte de *bona matriu de mostratge*. Una d'elles està basada en la noció de *coherència* entre dues bases. Suposarem que les funcions ϕ_k amb les que prenem mostres formen part d'una base ortonormal. Dit d'una altra forma, la matriu Φ , de mida $M \times D$, és una matriu obtinguda triant M files d'una matriu ortonormal Γ .

DEFINICIÓ 5. La coherència entre dues matrius (bases) ortonormals Ψ, Γ d'ordre $D \times D$ és

$$\mu(\Psi, \Gamma) = \sqrt{D} \max_{i,j} \|\langle y_i, \psi_j \rangle\|, \quad \text{on } \Gamma = (y_1, \dots, y_D), \Psi = (\psi_1, \dots, \psi_D).$$

Es tracta, doncs, d'una mesura del grau de correlació existent entre ambdues bases, que, per definició, és un nombre entre 1 i $\sqrt{D}$. El coeficient de normalització $\sqrt{D}$ està posat en relació amb l'exemple següent, que és l'exemple principal d'un parell de bases incoherents. Prenem com a Ψ la base de Fourier, $\psi_j(k) = D^{-\frac{1}{2}} e^{i2\pi jk/D}$, i com a Γ la base canònica $y_j(k) = \delta(j - k)$. Òbviament, $\mu(\Psi, \Gamma) = 1$ i tenim màxima incoherència.

El teorema següent és del mateix esperit que el teorema 3 quan l'apliquem a una matriu aleatòria. Aquí, A és la matriu aleatòria $\Phi\Psi$, on Φ consisteix a prendre M columnes a l'atzar de Γ .

TEOREMA 6 ([3]). *Suposem que f és N -rar en la base Ψ . Triem M mesures a l'atzar entre les correlacions de f respecte de la base $\Gamma, \langle f, y_i \rangle$. Si*

$$M \geq \mu^2(\Psi, \Gamma) N \log D,$$

llavors la solució del problema $f^ = \Psi X^*$, on X^* és el vector de norma L^1 mínima tal que*

$$y_i = \langle y_i, \Psi X^* \rangle,$$

és exacta amb probabilitat molt propera a 1.

El teorema ens diu que, per aconseguir minimitzar el nombre de mostres i aconseguir reconstrucció exacta amb probabilitat 1, com més incoherents siguin les bases, millor. En el cas de l'exemple de Fourier de màxima incoherència, què ens diu aquest teorema? Ens diu que si un senyal de mida D és N -rar en freqüència,

$$f(t) = \sum_{j=0}^{D-1} x_j e^{2\pi i j t/D}, \quad X \in \Sigma_N \quad (6)$$

llavors és possible reconstruir f a partir dels seus valors en $M = N \log D$ enters presos a l'atzar entre 1 i D , i gairebé totes les tries van bé. Insistim un cop més que això funciona sense cap coneixement previ de quines són les N -freqüències actives ni les seves amplituds. Dualment, si f és N -rar a R^D , es pot recuperar f a partir de $N \log D$ coeficients de Fourier presos a l'atzar, i gairebé totes les tries van bé. Aquest resultat, demostrat a [4], va precedir el teorema general i fou un dels primers en la teoria. És interessant contrastar-lo amb el teorema determinista següent: si f és com a (6), és possible reconstruir f exactament a partir dels seus valors en $1, 2, \dots, 2N$ o, més generalment, en $2N$ enters consecutius qualssevol. Aquí, $N \log D$ és substituït per la millor cota $2N$, però la diferència està en el fet que, en el resultat que acabem d'esmentar, gairebé totes les tries de $M = N \log D$ enters funcionen. També és rellevant el fet que, si hom vol que gairebé totes les M tries d'enters vagin bé, llavors cal que $M \geq N \log D$, és a dir, el resultat és òptim.

D'altra banda, no pot haver-hi un teorema d'aquest estil sense la component aleatòria, és a dir, de forma que la reconstrucció sigui possible per a *totes* les tries de M enters. Això és perquè hi ha senyals f , N -rars de mida D , que tenen $D - N$ coeficients de Fourier tots nuls.

Altres exemples de bases altament incoherents s'obtenen prenent com a Ψ les bases d'ondetes de Daubechies i com a Φ les anomenades *bases de noiselets*; vegeu [9].

Referències

- [1] BARANIUK, R.; DAVENPORT, M.; DEVORE, R.; WAKIN, M. «A simple proof of the restricted isometry property for random matrices». *Constr. Approx.*, 28 (3) (2008), 253–263.
- [2] CANDÈS, E. J. «The restricted isometry property and its implications for compressed sensing». *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 346 (9–10) (2008), 589–592.
- [3] CANDÈS, E.; ROMBERG, J. «Sparsity and incoherence in compressive sampling». *Inverse Problems*, 23 (3) (2007), 969–985.
- [4] CANDÈS, E. J.; ROMBERG, J.; TAO, T. «Robust uncertainty principles: exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information». *IEEE Trans. Inform. Theory*, 52 (2) (2006), 489–509.
- [5] CANDÈS, E. J.; ROMBERG, J. K.; TAO, T. «Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements». *Comm. Pure Appl. Math.*, 59 (8) (2006), 1207–1223.
- [6] CANDÈS, E. J.; TAO, T. «Decoding by linear programming». *IEEE Trans. Inform. Theory*, 51 (12) (2005), 4203–4215.
- [7] CANDÈS, E. J.; WAKIN, M. B. «An introduction to compressive sampling». *Signal Processing Magazine, IEEE*, 25 (2) (2008), 21–30.
- [8] COHEN, A.; DAHMEN, W.; DEVORE, R. «Compressed sensing and best k -term approximation». *J. Amer. Math. Soc.*, 22 (1) (2009), 211–231.
- [9] COIFMAN, R.; GESHWIND, F.; MEYER, Y. «Noiselets». *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, 10 (1) (2001), 27–44.
- [10] ELDAR, Y. C.; KUTYNIOK, G. (ed.). *Compressed sensing. Theory and applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.

Models estocàstics multiescala de la dinàmica de poblacions cel·lulars: mètodes asimptòtics i numèrics

PILAR GUERRERO I TOMÁS ALARCÓN

Resum: En aquest article, presentem una nova metodologia que permet formular i analitzar models estocàstics multiescala de la dinàmica de poblacions cel·lulars. Seguint la idea de models híbrids multiescala existents, creem el nostre model de forma jeràrquica d'acord amb les escales temporals característiques involucrades, on la dinàmica estocàstica de la població està governada per les taxes de naixement i de mortalitat segons el que prescriuen les corresponents vies intracel·lulars (per exemple, el model estocàstic del cycle cel·lular). El mecanisme de retroalimentació es tanca amb l'acoblament entre la dinàmica de la població i la dinàmica intracel·lular a través de la concentració d'oxigen: les cèl·lules consumeixen oxigen, el qual, al seu torn, regula la taxa amb la qual les cèl·lules evolucionen al llarg del seu cycle cel·lular. L'acoblament entre la dinàmica intracel·lular i la poblacional es duu a terme a través d'un mètode innovador, que permet obtenir la taxa de naixement a partir del model estocàstic del cycle cel·lular, basat en un enfocament de temps mitjà de primer pas. Se suposa que la proliferació cel·lular és activada quan una o més de les proteïnes involucrades en la via de regulació del cycle cel·lular arriba a un valor llindar. Aquest punt de vista permet calcular la taxa de divisió com a funció de l'edat de la cèl·lula i l'oxigen extracel·lular en termes del temps corresponent de primer pas. Aleshores, podem procedir a formular la dinàmica estocàstica de les poblacions cel·lulars en termes d'una equació mestra estructurada per l'edat. A més a més, també hem desenvolupat generalitzacions de mètodes asimptòtics del tipus WKB per a l'equació mestra estructurada per l'edat, així com un mètode de salt τ per simular l'evolució de la població estructurada per l'edat. Finalment, il·lustrem aquesta metodologia general amb un exemple d'una població cel·lular, on la progressió en el cycle cel·lular està regulada per la disponibilitat d'oxigen.

Paraules clau: modelització multiescala, modelització estocàstica, càncer, cycle cel·lular.

Classificació MSC2010: 92B05.

1 Introducció

En els darrers anys, la modelització multiescala de sistemes biològics ha esdevingut un camp de recerca molt actiu, i ha fet contribucions significatives en diverses àrees, que van des de la cardiologia [25, 31, 36, 51] fins a la biologia del desenvolupament [26, 40, 49, 50, 62] i el creixement tumoral [2, 11, 14, 15, 27, 33, 34, 41, 42, 43, 44, 45, 47, 48, 55, 56, 57].

L'interès que mou l'increment d'esforç dedicat al desenvolupament de models i tècniques multiescala està motivat per la constatació que el mètode de la *bala màgica* [54] per al tractament de malalties complexes, i, més precisament, en el cas del càncer, pot ser que no sigui tan efectiu com inicialment s'havia pensat. Pel que fa al tractament del càncer, aquest concepte va ser presentat per Paul Ehrlich [54] i consisteix en una teràpia dirigida que actua específicament en cèl·lules cancerígenes, i que deixa sense danyar les cèl·lules normals. Amb l'arribada de la recerca genòmica, s'esperava que aquest mètode fos impulsat considerablement. De fet, durant més de trenta anys, la recerca en oncologia ha estat dominada per una aproximació genocèntrica, on les teràpies dirigides, és a dir, medicaments desenvolupats amb l'objectiu d'interferir amb productes específics de gens cancerígens, han estat el centre i l'objectiu fonamental de la biologia del càncer [39]. Els avenços en genòmica i altres *òmiques* (proteòmica, epigenòmica, etc.) han promogut encara més aquest enfocament. No obstant això, l'èxit d'aquesta aproximació en termes de desenvolupament de nous medicaments eficients per al càncer s'ha quedat lluny de les expectatives [39].

Hi ha diverses raons per les quals el mètode de la *bala màgica* ha tingut un èxit limitat. El comportament i les característiques globals de les cèl·lules en resposta als estímuls, és a dir, el fenotip, emergeixen a partir d'una complexa xarxa d'interaccions entre els gens i els seus productes, la qual, finalment, acaba regulant l'expressió dels gens (vegeu, per exemple, el treball recent de Lignet *et al.* pel que fa a la xarxa de senyalització VEGF [32]). Aquestes xarxes de regulació dels gens constitueixen una dinàmica no lineal, de dimensió molt gran, l'estructura de les quals ha anat prenent forma per l'evolució deguda a la selecció natural i, per tant, posseeixen propietats com ara robustesa (és a dir, resistència del fenotip en contra d'alteracions genètiques) i canalització (és a dir, l'habilitat dels fenotips d'incrementar la seva robustesa a mesura que el temps avança). Aquestes propietats són explotades pels tumors per tal d'incrementar el seu potencial de proliferació i per resistir a les teràpies [29]. A part de les complexes interaccions no lineals entre cèl·lules, existeixen intríccades interaccions entre diferents components dels sistemes biològics a tots els nivells: des de complexes vies de senyalització i xarxes de regulació gèniques fins a complexos efectes no locals, on les pertorbacions a tot el teixit indueixen canvis a nivell dels camins intracel·lulars de les cèl·lules [2, 14, 34, 41, 44, 48]. Aquests i altres factors porten cap a una complicada dinàmica en teixits biològics. En particular, a causa de totes les capes de complexitat que hi intervenen, és molt difícil d'avaluar el principal dogma del mètode de la *bala màgica*, és a dir, saber si un agent terapèutic serà efectiu en contra del tumor i inofensiu per al teixit sa que hi ha al voltant.

Per tal d'abordar i respondre a aquestes qüestions, s'ha intensificat la recerca en el desenvolupament i l'anàlisi de models multiescala. Aquests models són capaços d'incorporar en un sol model diferents submodels corresponents a diversos nivells d'organització biològica (intracel·lular, interacció entre cèl·lules, nivell del teixit complet, etc.), els quals, normalment, estan caracteritzats per diferents escales temporals i de longitud, així com l'acoblament entre aquests submodels, de forma que el comportament global de tot el teixit pot ser analitzat com una propietat emergent dels elements acoblats [11, 14, 33, 41, 47, 56].

Els models multiescala poden ser formulats de diverses maneres. Una d'aquestes metodologies és l'anomenada *modelització híbrida* [2, 28, 34, 41, 47, 48]. Els models multiescala híbrids estan formats per diferents submodels per a diferents nivells d'organització biològica (processos intracel·lulars, interacció entre cèl·lules, secreció i transport de senyals, etc.), i cada un és modelat en termes de descripcions matemàtiques diferents (equacions diferencials ordinàries, EDO; autòmats cel·lulars; equacions en derivades parcials, EDP; etc.). Els models híbrids estan caracteritzats normalment per l'ús de models basats en els individus per descriure la dinàmica de, com a mínim, un dels compartiments cel·lulars considerats al model [42, 43]. Altres fases (per exemple, poblacions cel·lulars no modelades com a individus i fases fluïdes com la sang o el fluid intersticial) són modelades mitjançant EDP com a fases contínues [28, 34]. Els models basats en els individus són complementats normalment amb models per al comportament de cèl·lules en resposta a senyals com la manca de nutrients o a molècules de senyalització [2]. La concentració de nutrients o de molècules de senyalització és modelada normalment com un camp continu mitjançant EDP del tipus reacció-difusió. Els models híbrids han estat proposats per estudiar diferents aspectes del creixement tumoral, com ara la resposta a la teràpia [2, 48], l'angiogènesi induïda pel tumor [34, 42, 43] i la dinàmica evolutiva del creixement tumoral [47].

Una altra forma possible d'estudiar la modelització multiescala és usant els models de fases múltiples [10, 33, 45, 57]. En aquests models, cada tipus cel·lular és modelat com una fase diferent. Els models de fluids de fases múltiples han estat utilitzats per analitzar aspectes diferents del creixement tumoral, on cada tipus de cèl·lula correspon a un fluid diferent [10, 33, 45]. Els models de camp de fase s'han utilitzat recentment per modelar l'angiogènesi induïda per un tumor [57].

Malgrat el considerable esforç fet en el camp dels models multiescala per al creixement tumoral, hi ha aspectes diversos de la dinàmica dels teixits biològics que, en aquest context de modelització, encara són poc coneguts. Un d'ells és l'efecte del soroll. Els efectes aleatoris han estat inclosos en diversos models multiescala o bé híbrids. Per exemple, els models d'angiogènesi induïda tumoralment de McDougall *et al.* [37, 38, 53], basats en un estudi previ sobre un model híbrid continu-discret d'Anderson i Chaplain [5], o els models multiescala per a l'angiogènesi formulats a [42, 43] tenen un element estocàstic que, en aquest cas, correspon a considerar que la formació de vasos és representada en

termes d'un model esbiaixat de passeig aleatori per al moviment de les cèl·lules endotelials més externes. Malgrat tot, una metodologia general que ens permeti incorporar i analitzar específicament els efectes del soroll a diferents escales encara no existeix. Com a primer pas per omplir aquest forat, proposem en aquest treball una metodologia per formular models estocàstics multiescala de la dinàmica de les poblacions cel·lulars, així com el desenvolupament de mètodes numèrics i asimptòtics per a la seva anàlisi.

En aquest article, ens proposem formular models estocàstics multiescala de la dinàmica de poblacions cel·lulars, els quals tinguin en consideració fluctuacions a dos nivells: tant a nivell de vies de senyalització intracel·lulars, a causa del baix nombre de proteïnes, com a nivell de població cel·lular, com a conseqüència de tenir una població de mida finita. D'ara endavant, ens referirem a aquestes dues fonts de soroll com a *soroll molecular* i *soroll cel·lular*, respectivament. L'objectiu d'aquesta publicació és abordar el problema del soroll en sistemes multiescala d'una forma sistemàtica. Amb aquesta finalitat, creem un context de treball que ens permet formular i analitzar models estocàstics multiescala.

Pel que fa a la creació del nostre model, farem la mateixa suposició bàsica que es va fer a [2], és a dir, dividirem el problema en les tres capes que considerem, que identifiquem amb processos caracteritzats per escales temporals extensament diverses (vegeu la figura 1 per a una representació esquemàtica del nostre model i les escales temporals característiques involucrades). Considerem un model on acoblem la dinàmica de la concentració de nutrient disponible (per exemple, oxigen), determinada per la seva taxa de subministrament i consum per part de les cèl·lules; una capa intracel·lular, on considerem un model que descriu la manera com la concentració d'oxigen regula la taxa de progressió al llarg del cicle cel·lular [1, 7] i, per tant, també la taxa de divisió, i, finalment, una capa cel·lular, on considerem la dinàmica estocàstica de les poblacions de cèl·lules. Les capes intracel·lular i cel·lular estan acoblades mitjançant un model per a la taxa de divisió que depèn de l'oxigen, formulat en termes d'un problema de temps mitjà de primer pas.

L'article està organitzat com s'explica tot seguit. A la secció 2, descrivim la formulació del model. Hi discutim el model estocàstic per a la progressió del cicle cel·lular regulat per l'oxigen, i plantegem la formulació d'un model per a la taxa de divisió que depèn de l'oxigen i l'edat com un problema de temps mitjà de primer pas associat a la dinàmica estocàstica del cicle cel·lular. Després procedim a formular un procés estocàstic de naixement-mort que depèn de l'edat per a la dinàmica de les poblacions cel·lulars. A la secció 3, presentem un mètode asimptòtic WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) per trobar solucions aproximades per a l'equació mestra (EM) corresponent que depèn de l'edat. La secció 4 està dedicada a la formulació d'un mètode de salt τ que depèn de l'edat que ens permet fer simulacions del model estocàstic multiescala. Finalment, a la secció 5, s'hi discuteixen els nostres resultats, les limitacions d'aquest enfocament i les direccions per a una recerca futura.

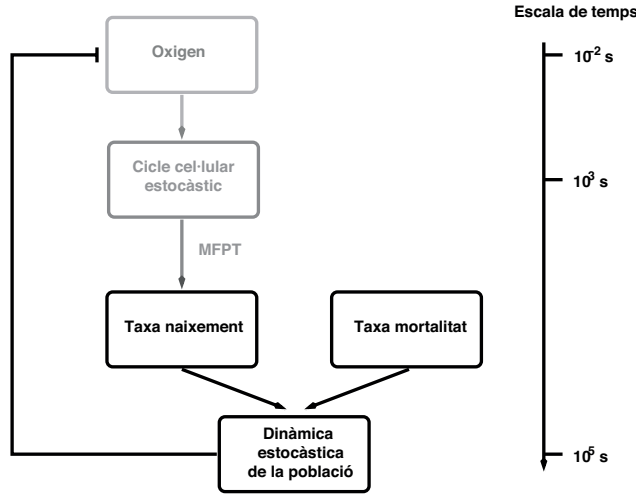


FIGURA 1: Representació esquemàtica del model multiescala: l'oxigen modula la progressió de les cèl·lules al llarg del cicle cel·lular o, equivalentment, la seva taxa de divisió. La taxa de divisió que depèn de l'oxigen és modelada en termes d'un problema de temps mitjà de primer pas i, després, és usada a l'equació mestra que determina la dinàmica estocàstica de la població cel·lular. Les cèl·lules consumeixen oxigen i, en conseqüència, la seva dinàmica regula la concentració d'oxigen, de manera que tanca el mecanisme de retroalimentació. També mostrem les escales temporals característiques corresponents: desenes de mil·lisegons per a l'oxigen, minuts o hores per als processos intracel·lulars i dies per a les cèl·lules.

2 Formulació del model

2.1 Estructura general del model estocàstic multiescala

Abans de passar a fer una discussió detallada dels diferents elements involucrats en la formulació del model estocàstic multiescala, procedim a una descripció detallada de l'estructura general del model, la qual està altament relacionada amb la del model proposat a [2].

El model que presentem en aquest article integra fenòmens caracteritzats per escales temporals diferents, com es pot veure esquemàticament a la figura 1, on s'inclouen el lliurament de l'oxigen a la població cel·lular i el consum d'aquest per part de les cèl·lules, la dinàmica de la població cel·lular sota la restricció d'un subministrament d'oxigen a una taxa finita i la proliferació i l'apoptosi de la divisió cel·lular. La seva estructura és, per tant, força complexa i, per aquesta raó, abans de presentar els submodels involucrats en la descripció de cada un d'aquests processos, explicarem l'estructura global del context de la modelització.

El punt de vista que nosaltres utilitzem és una generalització natural del procés de Markov estàndard de naixement-mort a temps continu i la seva descripció via una equació mestra [17]. Com veurem, el caràcter multiescala del sistema, és a dir, la inclusió de l'estructura fisiològica associada a les variables del cycle cel·lular, introdueix una estructura d'edat a la població: la taxa de divisió depèn de l'edat de la cèl·lula (*i. e.*, el temps que ha transcorregut des de l'última divisió), que determina, a través del model de cycle cel·lular corresponent, l'estatus dins del cycle cel·lular de les cèl·lules respectives.

Pel que fa a les particularitats de cada submodel involucrat, el model per al lliurament d'oxigen és una equació diferencial estocàstica, on l'oxigen és proporcionat a una taxa constant F i consumit per part de les cèl·lules (vegeu la figura 1). El caràcter estocàstic de l'equació que governa l'evolució de la concentració d'oxigen sorgeix del fet que el nombre de cèl·lules a un temps determinat és una variable estocàstica.

El segon submodel (és a dir, el model intracel·lular) considerat en el nostre context multiescala és un model estocàstic per a la progressió a través del cycle cel·lular regulada per l'oxigen (vegeu la figura 1). Aquest submodel és formulat usant les tècniques estàndard de modelització de cinètica química [20], de forma que el límit de camp mitjà del model estocàstic correspon al model determinista per al cycle cel·lular formulat a [1]. Aquest model proporciona l'estatus del cycle cel·lular, és a dir, el nombre de molècules de cada proteïna involucrades en el model, d'on nosaltres podem deduir si la transició G_1/S ha tingut lloc per a una cèl·lula d'una determinada edat a . L'estatus del cycle cel·lular d'una cèl·lula d'edat a està determinat en termes de si l'abundància de certes proteïnes que activen el cycle cel·lular (ciclins) ha arribat a un cert valor llindar. En el nostre cas concret, si a una edat a els nivells de ciclins estan per sota del valor llindar corresponent, la cèl·lula encara està a G_1 . Si, en canvi, el valor llindar ja s'ha assolit, aleshores la cèl·lula ha passat a S i, per tant, està preparada per dividir-se. Això implica que la probabilitat que una cèl·lula hagi creuat el nivell llindar de ciclins a una edat a pot ser formulada en termes d'un problema de temps mitjà de primer pas (MFTP), en el qual hom analitza la probabilitat d'un procés Markov d'arribar a una certa frontera [17]. La taxa a la qual el nostre model per al cycle cel·lular arriba al valor llindar d'activació de la ciclina, dit d'una altra forma, la taxa a la qual les cèl·lules passen a través del punt de restricció del cycle cel·lular, es pren de forma que sigui proporcional a la taxa de divisió. La taxa de divisió és funció de l'edat de la cèl·lula, així com de la concentració d'oxigen, ja que l'abundància d'oxigen regula la taxa de progressió al llarg del cycle cel·lular.

El tercer i últim submodel (és a dir, el model cel·lular) correspon a la dinàmica de les poblacions cel·lulars i està governat per l'equació mestra per a la funció de densitat de probabilitat del nombre de cèl·lules [17]. El procés estocàstic que descriu la dinàmica de les poblacions cel·lulars és un procés naixement-mort que depèn de l'edat, on la taxa de naixement depèn de l'edat i és determinada pel model intracel·lular. La taxa de mort és, per simplicitat, considerada constant. Com a conseqüència del fet que la taxa de naixement depengui de l'edat,

la nostra equació mestra multiescala no té la forma estàndard per a poblacions no estructurades. És, en canvi, una equació mestra que depèn de l'edat.

La descripció detallada dels processos involucrats en cada un dels submodels que han estat resumits en les línies anteriors és l'objecte d'estudi de la part restant de la secció 2.

2.2 Escala intracel·lular: model estocàstic per a la progressió del cycle cel·lular que depèn de l'oxigen

2.2.1 Informació prèvia sobre la modelització del cycle cel·lular. El cycle cel·lular és la seqüència d'esdeveniments mitjançant els quals una cèl·lula que està creixent duplica tots els seus components i es divideix en dues cèl·lules filles, cada una de les quals, al seu torn, té la maquinària i la informació suficients per poder repetir el procés [4]. El cycle cel·lular està dividit, normalment, en quatre fases: G_1 , S , G_2 i la mitosi M . Durant la fase G_1 (G = fase buida), la cèl·lula no es divideix i els cromosomes no es repliquen. La replicació de l'ADN nuclear ocorre durant la fase S , mentre que la mitosi es completa al final de la fase M . L'interval entre la replicació de l'ADN i la divisió s'anomena *fase* G_2 . Les fases buides G_1 i G_2 donen a la cèl·lula temps addicional per créixer. La cèl·lula també passa per dues transicions irreversibles. La primera d'aquestes transicions ocorre al final de G_1 i s'anomena *Inici*. Durant la fase G_1 , la cèl·lula controla el seu entorn i la seva mida. Quan les condicions externes i la mida de la cèl·lula són les adients, la cèl·lula es dedica a sintetitzar ADN i a la seva divisió. Aquesta transició és irreversible: un cop la cèl·lula entra a la fase S i la replicació de l'ADN comença, la divisió s'ha d'acabar. La segona transició, *Acabament*, ocorre quan la replicació de l'ADN ja s'ha completat. Un cop la cèl·lula ha comprovat que l'alineació de l'ADN i les cromàtides ha ocorregut, la transició *Acabament* és activada i la cèl·lula, finalment, es divideix en dues cèl·lules filles. Un cinquè estat, l'anomenat *estat* G_0 , és definit per referir-se a les cèl·lules que han abandonat la progressió normal del cycle cel·lular i han esdevingut quiescents. En aquest estat, la majoria (tot i que no totes) de les funcions cel·lulars estan suspeses, d'entre les quals la més notable és la proliferació.

Els esdeveniments del cycle cel·lular són controlats per una xarxa de senyals moleculars que tenen per components centrals les proteïnes-cinases que depenen de ciclines (CDK). A l'estat G_1 , l'activitat de les CDK és baixa, ja que les seves parelles obligades, les ciclines, no hi són. Això es deu al fet que la síntesi per part de l'ARNm de les ciclines és inhibida i la proteïna ciclina es degrada ràpidament. A l'*Inici*, s'indueix la síntesi de ciclines i s'inhibeix la degradació de ciclines, la qual cosa causa un increment increïble en l'activitat de les CDK, que es manté durant S , G_2 i M . L'activitat alta de les CDK és necessària per a la replicació de l'ADN, la condensació dels cromosomes i la formació del fus. A l'*Acabament*, un grup de proteïnes que formaran el complex promotor de l'anafase (APC) és activat [63]. L'APC enganxa una «etiqueta de construcció» a unes proteïnes diana específiques, que a continuació són degradades per la maquinària de proteòlisi de la cèl·lula. L'APC està format per un nucli complex

constituït per una dotzena de polipèptids aproximadament i dues proteïnes auxiliars, Cdc20 i Cdh1, que sembla que tenen el paper (quan estan actives) de reconèixer unes proteïnes diana específiques i presentar-les al complex del nucli perquè les etiquetin [61, 63]. L'activació de la Cdc20 a l'*Acabament* és necessària per a la degradació de cohesines a l'anafase i per a l'activació de la Cdh1. De forma conjunta, Cdc20 i Cdh1 etiqueten ciclines per degradar a la telofase, la qual cosa permet al sistema de control retornar a G_1 . Cal que distingim aquestes dues proteïnes auxiliars, ja que la Cdc20 i la Cdh1 són controlades de forma diferent per la ciclina-CDK, la qual activa la Cdc20 i inhibeix la Cdh1.

A [58], Tyson i Novak descriuen un model per a les transicions irreversibles *Inici* i *Acabament*, les quals regulen la progressió del cycle cel·lular. El model que presentem suposa que aquestes transicions ocorren per mitjà de bifurcacions del sistema regulador, la qual cosa porta a la creació i destrucció d'estats estacionaris estables del sistema regulador molecular del procés de divisió cel·lular.

La dinàmica del cycle cel·lular pot estar afectada per condicions ambientals, en particular, pel nivell d'oxigen extracel·lular: és ben sabut que concentracions d'oxigen baixes (hipòxia) alteren la progressió del cycle de divisió cel·lular [18] i de la transició G_1/S , en particular. A la referència [1], se suposava que la resposta d'aquesta transició a la hipòxia era mediada per la proteïna p27, un element de la xarxa CDK, la producció de la qual augmenta sota condicions d'hipòxia [16, 18], encara que estudis recents posen alguns dubtes sobre el rol de la p27 com a mediadora dels efectes d'hipòxia en la progressió del cycle cel·lular [9, 23]. En el nostre model, suposem que la p27 intervé en l'aturada de la transició G_1/S induïda per la hipòxia, de manera que inhibeix la formació del complex ciclina-CDK i, per tant, inhibeix la síntesi de l'ADN.

A [1] es proposa una modificació del model de Tyson i Novak [58], en la qual es consideren els efectes de la hipòxia en el cycle cel·lular a través dels nivells de la proteïna p27. La p27 inhibeix la formació del complex ciclina-CDK. A més, els nivells de p27 s'incrementen en presència d'hipòxia. Així, el conjunt d'equacions diferencials ordinàries (EDO) introduït a [1] per modelar l'efecte de la hipòxia a la fase de transició *Inici* és el següent:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{(1 + b_3 u)(1 - x)}{J_3 + 1 - x} - \frac{b_4 m x y}{J_4 + x}, \\ \frac{dy}{dt} &= a_4 - (a_1 + a_2 x + a_3 z) y, \\ \frac{dm}{dt} &= \eta m \left(1 - \frac{m}{m_*}\right), \\ \frac{dz}{dt} &= c_{z_1} \left(1 - \frac{m}{m_*}\right) - c_{z_2} \frac{O_2}{B + O_2} z,\end{aligned}$$

on x i y són les concentracions de Cdh1/APC actives i la concentració dels complexos ciclina-CDK, respectivament; z és la concentració de p27; O_2 , la concentració d'oxigen; u , un activador genèric; η , la taxa de creixement de la cèl·lula; m , la massa de la cèl·lula, i m_* és la massa d'una cèl·lula adulta. Els a_i ($i = 1, 2, 3, 4$), c_{z_i} ($i = 1, 2$), b_i ($i = 3, 4$) són taxes constants, i J_3 i J_4 són les constants de Michaelis-Menten. Tyson i Novak [58] trien una escala per a les seves equacions tal que la concentració total de Cdh1 (activa i inactiva) està normalitzada a 1 i les constants de Michaelis-Menten, J_3 i J_4 , són tals que $J_3 \ll 1$ i $J_4 \ll 1$. Tot i que en el model proposat a [1] es considera que la ciclina involucrada en la transició G_1/S és CycB i se suposa que el seu inhibidor és APC/Cdh1, estudis recents suggereixen que, en canvi, una representació més acurada de la situació portaria a considerar CycE i el seu inhibidor SCF [59]. De fet, en els mamífers, la ciclina D està involucrada en la regulació de la dinàmica lenta de la fase G_1 (inhibida per p27), mentre que la ciclina E regula la dinàmica ràpida (vegeu la referència [52] per a una descripció detallada). Una descripció molt acurada de la regulació de la transició G_1/S en cèl·lules de mamífers hauria de tenir en compte la presència d'aquestes dues ciclines, en lloc de considerar els seus efectes *grosso modo* en un sol compost.

2.2.2 Formulació estocàstica. Ara procedim a formular un model estocàstic per a la progressió del cycle cel·lular regulada per l'oxigen com un procés de Markov en termes d'una equació mestra. El model resultant serà analitzat utilitzant el mètode asimptòtic WKB per a sistemes de mida gran [3, 30, 35]. Aquest (sub)model expressa la taxa de proliferació de les cèl·lules com a funció de l'oxigen extracel·lular. Aquesta informació serà usada després a l'escala cel·lular del model poblacional com a paràmetre, és a dir, utilitzarem la taxa de divisió que depèn de l'oxigen i de l'edat dins de l'equació mestra que descriu la dinàmica de la fase cel·lular.

El model que nosaltres proposem aquí està basat en els mateixos principis bàsics [58] que el que es va formular a [1]. Tyson i Novak [58] van proposar un model per a la transició G_1/S , en el qual l'element central del model és la inhibició mútua entre la forma activa de Cdh1/APC, un inhibidor de la progressió del cycle cel·lular, i CycB-CDK, l'activitat del qual és necessària per tal que el cycle cel·lular pugui sotmetre's a la transició abans mencionada. Aquesta inhibició mútua dona lloc a un sistema biestable amb dos estats estacionaris estables: el punt fix anomenat G_1 , on l'activitat de Cdh1 és propera al seu màxim i l'activitat de CycB és virtualment inexistent, i el punt fix $S-G_2-M$, on passa el contrari. A més a més, Tyson i Novak [58] suposen que la inhibició de Cdh1 per part de CycB està modulada per la mida cel·lular: la inhibició és inicialment pobra, quan les cèl·lules s'han acabat de dividir i encara no han arribat a la mida crítica necessària per a entrar a la fase S , però augmenta a mesura que les cèl·lules creixen i s'apropen a la mida crítica. Matemàticament, aquestes regulacions segons la mida cel·lular induïxen una bifurcació sella-node, on el punt fix G_1 es destrueix quan la mida cel·lular (massa) arriba a un

valor crític, la qual cosa força el sistema a incrementar l'activitat de CycB i a entrar a la fase S. A [1] es va proposar una modificació d'aquest model simple, segon la qual un inhibidor addicional de l'activitat de les ciclines, p27, va ser introduït. Se sap que l'activitat de p27 augmenta quan falta oxigen (hipòxia), la qual cosa retarda l'inici de la transició G_1/S . Aquest model ens permet acoblar la taxa de progressió del cycle cel·lular amb l'abundància d'oxigen i, per tant, analitzar els efectes de les fluctuacions en l'aportació d'oxigen en el creixement tumoral [2].

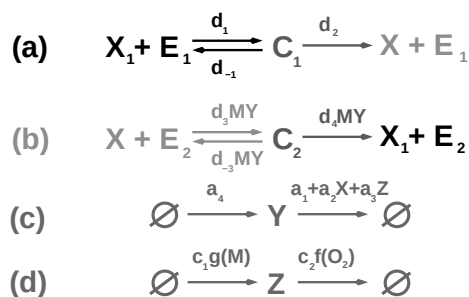


FIGURA 2: Representació esquemàtica de les reaccions involucrades en el model estocàstic de la progressió del cycle cel·lular regulada per l'oxigen. M és la massa de la cèl·lula, X (X_1) és el nombre de molècules Cdh1 actives (inactives), E_1 (E_2) és el nombre d'enzims activadors de Cdh1 (inactivadors), C_1 (C_2) és el nombre de complexos X_1E_1 (XE_2), Y és el nombre de complexos ciclina-CDK i Z és el nombre de molècules p27. Les reaccions (a) i (b) corresponen a l'activació i inactivació catalitzada per enzims de Cdh1, respectivament. Es fa notar que la reacció d'inactivació és incentivada per CycB (Y) i modulada per la mida cel·lular (M). Les reaccions (c) i (d) determinen la dinàmica del nombre de molècules actives CycB i p27. CycB és sintetitzada a una taxa constant i degradada a una taxa que depèn de la Cdh1 activa, així com de la p27. p27 és sintetitzada a una taxa que depèn de la mida i degradada a una taxa que depèn de l'oxigen. D'acord amb [1], $g(M) = 1 - M/m_*$ i $f(O_2) = O_2/(B + O_2)$. Les taxes constants es poden veure a la taula 2.

Les reaccions involucrades en el nostre model estocàstic de la progressió del cycle cel·lular regulada per l'oxigen es poden veure esquemàticament a la figura 2: M denota la massa de la cèl·lula; X (X_1) és el nombre de molècules Cdh1 actives (inactives); E_1 (E_2), el nombre d'enzims activadors (inactivadors) de Cdh1, i C_1 (C_2), el nombre de complexos X_1E_1 (XE_2). A més, Y i Z es refereixen al nombre de complexos ciclina-CDK i al nombre de molècules p27, respectivament.

Les reaccions de la figura 2 (a) i (b) corresponen a les reaccions catalitzades per enzims d'activació i inactivació de Cdh1, respectivament. Fem notar que, com a [58], la inactivació de Cdh1 és incentivada per CycB activa (Y) i està

modulada pel creixement cel·lular (M). La reacció de la figura 2 (c) explica la dinàmica del nombre de molècules actives CycB, Y : CycB és sintetitzada a una taxa constant i és degradada a una taxa que depèn tant de l'activa Cdh1 (X) (la qual cosa tanca, per tant, el mecanisme de retroalimentació negatiu d'inhibició mútua entre Cdh1 i CycB) com del nombre de molècules p27 (Z), la qual cosa implementa en el model el rol de p27 com a inhibidor de l'activitat de les ciclines. Finalment, la reacció de la figura 2 (d) determina la dinàmica del nombre de molècules p27, Z : p27 és sintetitzada a una taxa que depèn de la mida cel·lular i degradada a una taxa que depèn de l'oxigen, de forma que, quan l'oxigen és escàs, la degradació de p27 es redueix. Aquest efecte porta a una acumulació de p27 que retarda la progressió del cicle cel·lular, la qual cosa incrementa la inhibició de l'activitat de les ciclines. El lector pot consultar a [1] tots els detalls sobre el raonament biològic d'aquest model.

El model estocàstic s'especifica, per tant, en termes del vector d'estat, $\vec{X}(a)$:

$$\vec{X}(a) = (M(a), Z(a), X_1(a), E_1(a), C_1(a), X(a), E_2(a), C_2(a), Y(a)),$$

on a representa l'edat, que es pren com el temps que ha passat des de la darrera divisió cel·lular. La dinàmica del model es descriu mitjançant la densitat de probabilitat que el sistema estigui a l'estat $\vec{X}$ a l'edat a , $\Psi(\vec{X}, a)$, la dinàmica de la qual està determinada per l'equació mestra (EM):

$$\frac{\partial \Psi(\vec{X}, a)}{\partial a} = \sum_i (W_i(\vec{X} - r_i, a) \Psi(\vec{X} - r_i, a) - W_i(\vec{X}, a) \Psi(\vec{X}, a)), \quad (2.1)$$

on $W_i(\vec{X}, a)$ són les taxes de transició corresponents a cada una de les reaccions elementals involucrades en el model mostrades a la figura 2, i r_i és un vector que té per entrades l'increment en el nombre de molècules de cada espècie molecular quan la reacció i ocorre, és a dir,

$$P(\vec{X}(a + \Delta a) = x(a) + r_i \mid x(a)) = W_i(\vec{X}, a) \Delta a.$$

Les taxes de transició corresponents a les reaccions enzimàtiques de la figura 2 es poden veure a la taula 1. Per modelar la cinètica de les reaccions químiques de la figura 2, hem utilitzat la llei d'acció de la massa (LMA) [20], incloses les reaccions enzimàtiques, tal com s'indica a la figura 2 (a) i (b). Hem triat la cinètica LMA per modelar aquestes reaccions en lloc d'utilitzar la cinètica Michaelis-Menten per raons tècniques, que estan relacionades amb l'anàlisi asimptòtica de l'equació (2.1) que fem a la secció següent: el mètode asimptòtic WKB demana que les taxes de transició W_i satisfacin certes lleis d'escalament (vegeu l'equació (2.3) més endavant). Aquesta relació d'escalament no se satisfà amb les taxes Michaelis-Menten, i hem, per tant, de recórrer a la cinètica LMA. No obstant això, aquest fet també implica que cal anar amb molta cautela quan es parametrítzi el model, ja

que els valors dels paràmetres donats a [58], on es va utilitzar la cinètica Michaelis-Menten per a modelar l'activació i inactivació de Cdh1 catalitzada per enzims, no són directament aplicables al nostre model. A l'apèndix A, tractem aquest problema i trobem la relació entre els paràmetres usats a [58] i els nostres.

Probabilitat de la reacció p.u.t.	$\vec{r}_i$
$W_1 = \frac{\eta}{m_*\Omega} \frac{M(M-1)}{2}$	$(-1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_2 = \eta M$	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_3 = c_{z_1}\Omega$	$(0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_4 = c_{z_1} \frac{M}{m_*} + c_{z_2} \frac{O_2}{B+O_2} Z$	$(0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_5 = \frac{d_1}{\Omega} X_1 E_1$	$(0, 0, -1, -1, 1, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_6 = d_{-1} C_1$	$(0, 0, 1, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 0)$
$W_7 = \frac{d_4}{\Omega^2} Y M C_2$	$(0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0)$
$W_8 = d_2 C_1$	$(0, 0, 0, 1, -1, 1, 0, 0, 0, 0)$
$W_9 = \frac{d_3}{\Omega^3} X Y M E_2$	$(0, 0, 0, 0, 0, -1, -1, 1, 0, 0)$
$W_{10} = \frac{d_{-3}}{\Omega^2} Y M C_2$	$(0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, 0, 0)$
$W_{11} = a_4 \Omega$	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1)$
$W_{12} = \left(a_1 + \frac{a_2}{\Omega} X + \frac{a_3}{\Omega} Z\right) Y$	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1)$

TAULA 1: Probabilitat de la reacció per unitat de temps, $W_i \equiv W(\vec{X}, \vec{r}_i, a)$, amb $\vec{r}_i = (r_{im}, r_{iz}, r_{ix_1}, r_{ie_1}, r_{ic_1}, r_{ix}, r_{ie_2}, r_{ic_2}, r_{iy})$, $i = 1, \dots, 12$.

2.2.3 Anàlisi del model: aproximació WKB. La metodologia que usem per analitzar el nostre model està basada en l'aproximació WKB i va ser proposada per primera vegada per Kubo *et al.* [30], els quals proven que, sota la hipòtesi adequada d'escalament, la solució que depèn del temps de l'EM, equació (2.1), pot ser aproximada per una funció del mateix tipus que la de la solució a l'equilibri, és a dir, l'exponencial d'una funció homogènia de $\vec{X}$, que anomenarem S ,

$$\Psi(\vec{X}, a) = C \exp(-S(\vec{X}, a)) = C \exp(-\Omega s(\vec{x}, a)), \quad (2.2)$$

on Ω és alguna mesura de la mida del sistema i $\vec{x} = \vec{X}/\Omega$; vegeu [6]. També mostren que les taxes de transició $W(\vec{X}, r, a)$ han de ser funcions homogènies de $\vec{X}$ per tal d'obtenir una solució de l'EM del tipus de l'equació (2.2),

$$W_i(\vec{X}, a) = \Omega w_i(\vec{x}, a), \quad \vec{x} = \frac{\vec{X}}{\Omega}. \quad (2.3)$$

En conseqüència, la probabilitat que passi una determinada reacció en un interval de temps infinitesimal és proporcional a la mida del sistema, Ω , i

està determinada només per l'estat del sistema, representat pel conjunt de les variables intensives $\vec{x}$. La definició

$$\psi(\vec{x}, a) = \Omega \Psi(\vec{X}, a),$$

juntament amb l'equació (2.3), ens permet escriure l'EM (2.1) en la forma WKB:

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \psi(\vec{x}, a)}{\partial a} = \sum_i (e^{-((r_i/\Omega) \cdot (\partial/\partial x))} - 1) w_i(\vec{x}, a) \psi(\vec{x}, a),$$

on hem usat que $e^{-r \cdot (\partial/\partial x)}$ és el generador de les translacions en l'espai d'estats del sistema.

Per continuar, considerem la funció característica de $\psi(\vec{x}, a)$,

$$Q(u, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{x}, a) e^{iu \cdot \vec{x}} d\vec{x}, \quad (2.4)$$

i la seva funció generatriu de cumulants associada, $q(u, a) \equiv \log(Q(u, a))$ [3, 30]. Els cumulants $q_n(a)$ de $\psi(\vec{x}, a)$ poden ser obtinguts a partir del desenvolupament:

$$q(u, a) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n}{n!} u^n \cdot q_n(a),$$

on u^n representa el producte n -àdic definit per $(u^n)_{j_1, j_2, \dots, j_n} \equiv \prod_{i=1}^n u_{j_i}$ i el punt volat denota la contracció total sobre tots els índexs n . Es pot veure a [3] que de l'equació (2.4) es dedueix:

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial Q(u, t)}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_i (e^{-iu \cdot y_i} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} w_i(v, a) Q(u - v, t) dv, \quad (2.5)$$

on $w_i(v, a)$ és la transformada de Fourier de $w_i(\vec{x}, a)$ i d és el nombre d'espècies químiques en el nostre model de cicle cel·lular. Kubo *et al.* a [30] mostren que l'equació (2.5) és el punt d'inici per a un desenvolupament asimptòtic del tipus WKB, on s'obté una jerarquia tancada d'equacions diferencials ordinàries per als cumulants $(q_n(a))$ del procés.

Kubo *et al.* [30] proven que, per a n arbitrària, els cumulants de la distribució de probabilitat (*e. g.*, $(q_1)_i = \langle x_i \rangle$; $(q_2)_{ij} = \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \dots$) satisfan la relació d'escalament següent: $q_n(a) = \epsilon^{n-1} q_{n1}(a) + \epsilon^n q_{n2}(a) + O(\epsilon^{n+1})$, on $\epsilon = \Omega^{-1}$. Aquest escalament, al seu torn, dona lloc a un desenvolupament asimptòtic consistent que porta a un sistema d'equacions diferencials ordinàries per als cumulants $q_n(a)$ en termes de tots els cumulants d'ordre inferior, $q_1(a), \dots, q_{n-1}(a)$.

L'escalament mencionat per als cumulants d'ordre n implica que es pot obtenir una aproximació gaussiana del procés tal que $X(t) = \Omega \mathcal{N}(q_{11}, \Omega^{-1/2} q_{21})$, on $q_{11}(a)$ és l'aproximació d'ordre més baix per al primer cumulant (és a dir, el primer moment, q_1), que satisfà les equacions de camp mitjà [3, 30]:

$$\dot{q}_{11} = \sum_i r_i w_i(q_{11}(a), a), \quad (2.6)$$

i $q_{21}(a)$ és l'aproximació d'ordre més baix per al segon cumulant (és a dir, la matriu de covariància, $q_2(a)$), els components del qual satisfan el conjunt d'EDO:

$$\dot{Q}_{ij}(a) = \sum_k \left(Q_{ik} \frac{\partial c_j(q_{11}, a)}{\partial q_{11k}} + \frac{\partial c_i(q_{11}, a)}{\partial q_{11k}} Q_{kj} \right) + \sum_r r_i r_j w(q_{11}, r, a), \quad (2.7)$$

on $Q_{ij} \equiv (q_{21})_{ij}$. Per a més detalls sobre el mètode WKB, inclosa l'obtenció detallada de l'equació (2.6), vegeu [3, 30].

Usem les equacions (2.6) i (2.7) per formular els sistemes d'EDO per a les contribucions d'ordre dominant per al primer i el segon cumulants (*i. e.*, el primer i el segon moment, respectivament). Substituint els valors corresponents de $w(\vec{x}, r, a)$ i r de la taula 1 a l'equació (2.6), on $q_{11} = \langle \vec{x} \rangle = \bar{x}$ és el vector mitjana, obtenim l'equació següent per a cada element del vector mitjana, on, fent un abús de notació, posem $\bar{x}_i = x_i$:

$$\begin{aligned} \frac{dm}{da} &= \eta m \left(1 - \frac{m}{m_*} \right), \\ \frac{dz}{da} &= c_{z1} \left(1 - \frac{m}{m_*} \right) - c_{z2} \frac{O_2}{B + O_2} z, \\ \frac{dx_1}{da} &= -d_1 x_1 e_1 + d_{-1} c_1 + d_4 y m c_2, \\ \frac{de_1}{da} &= -d_1 x_1 e_1 + (d_{-1} + d_2) c_1, \\ \frac{dc_1}{da} &= d_1 x_1 e_1 - (d_{-1} + d_2) c_1, \\ \frac{dx}{da} &= -d_3 x y m e_2 + d_{-3} y m c_2 + d_2 c_1, \\ \frac{de_2}{da} &= -d_3 x y m e_2 + (d_{-3} + d_4) y m c_2, \\ \frac{dc_2}{da} &= d_3 x y m e_2 - (d_{-3} + d_4) y m c_2, \\ \frac{dy}{da} &= a_4 - (a_1 + a_2 x + a_3 z) y. \end{aligned} \quad (2.8)$$

De manera similar, utilitzant l'equació (2.7), obtenim el conjunt d'EDO corresponent, el qual, acoblat amb les equacions (2.8), ens permet obtenir les entrades de la matriu de covariància, $\sigma(a) = (Q_{ij}(a))$.

La figura 3 mostra la comparació entre la solució numèrica de l'equació (2.8) i la simulació directa del sistema estocàstic usant l'algorisme de Gillespie [20].

Paràmetre	Valor	Font
a_1	0.04	Tyson i Novak (2001) [58]
a_2	1	Tyson i Novak (2001) [58]
a_3	0.25	Alarcón <i>et al.</i> (2004) [1]
a_4	0.04	Tyson i Novak (2001) [58]
b_3	10	Tyson i Novak (2001) [58]
b_4	35	Tyson i Novak (2001) [58]
η	0.01	Tyson i Novak (2001) [58]
m_*	10	Tyson i Novak (2001) [58]
J_3, J_4	0.04	Tyson i Novak (2001) [58]
u	1	Tyson i Novak (2001) [58]
c_{z_1}	0.1	Alarcón <i>et al.</i> (2004) [1]
c_{z_2}	0.01	Alarcón <i>et al.</i> (2004) [1]
B	0.01	Alarcón <i>et al.</i> (2004) [1]
d_1	$(0.1 + d_2)/(J_3 s_0)$	
d_3	$(0.01 + d_4)/(J_4 s_0)$	
ν	10^{-4}	
k	0.067	
κ	$1.57 \cdot 10^{-4}$	

TAULA 2: Valors dels paràmetres.

Finalment, aplicant els resultats previs relacionats amb el mètode asimp-tòtic WKB a l'EM, obtenim una aproximació gaussiana a la solució de l'equació (2.1):

$$\Psi(\vec{X}, a) = \left(\frac{\Omega}{2\pi} \right)^{d/2} \frac{1}{|\sigma(a)|^{1/2}} e^{-\frac{\Omega}{2} (\vec{X}(a) - \bar{X}(a))^t \sigma(a)^{-1} (\vec{X}(a) - \bar{X}(a))}, \quad (2.9)$$

on d és el nombre d'espècies químiques en el nostre model de cicle cel·lular; $|\cdot|$ denota el determinant; $()^{-1}$, la inversa; $\bar{X}(a)$ és q_{11} , i $\sigma(a)$ és la matriu de covariància (simètrica), amb Q_{ij} les seves components.

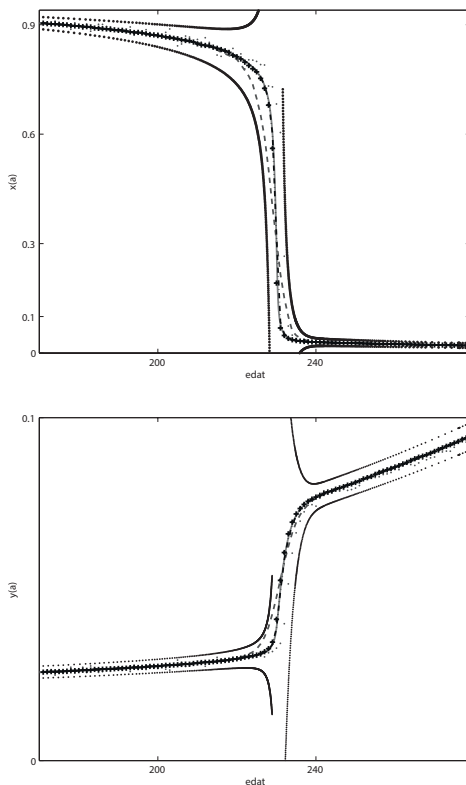


FIGURA 3: Comparació de les trajectòries de $x(a)$ i $y(a)$ obtingudes a partir de l'equació (2.8) (línies grises clares) i les obtingudes amb diferents simulacions de Gillespie. Aquestes simulacions, per a $\Omega = 10^5$, es representen en gris (100 realitzacions, línia de guions, i una sola realització, línia de punts); per a $\Omega = 10^7$, es representen en gris més fosc (100 realitzacions, línia de punts i guions, i una realització, línia de senyals). Finalment, les línies de punts negres més exteriors representen l'error $(\pm \sigma(a))$ que dóna l'equació (2.7). S'ha pres $O_2 = 1.0$ i la condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

2.3 Modelització de la taxa de divisió que depèn de l'edat

L'activació de diverses vies de regulació, en particular, el cicle cel·lular, depèn de si un cert component del sistema de regulació arriba a un valor crític d'activació. En el cas del nostre sistema estocàstic per a la progressió en el cicle cel·lular, les cèl·lules passen per la transició G_1/S quan el nivell d'activitat de CycB arriba a un valor llindar. Suposem que, després que la cèl·lula passi aquesta transició, completa el cicle cel·lular i, finalment, es divideix després que un temps mitjà τ_p hagi transcorregut. Per tant, ateses certes condicions externes (en el nostre

cas, aquestes condicions estan determinades per la concentració d'oxigen), la probabilitat d'una cèl·lula de dividir-se després d'una certa edat és igual a la probabilitat que la corresponent proteïna hagi arribat al seu valor crític. Això pot ser formulat en termes d'un problema de temps de primer pas (vegeu [46]), la solució del qual dóna aquesta probabilitat de forma precisa i la seva derivada respecte a l'edat ens dóna la taxa de divisió a edat a . Un cop hem obtingut la taxa de divisió corresponent seguint aquesta metodologia, podem utilitzar-la per parametritzar una equació mestra per a l'evolució estocàstica de la població cel·lular.

Per calcular la taxa de divisió (és a dir, la probabilitat de divisió per cèl·lula i per unitat de temps) en termes d'un problema de temps de primer pas, considerem que la transició G_1/S ocorre quan l'activació de la ciclina arriba al valor llindar i, per tant, podem definir la taxa de divisió com una funció del temps, és a dir, $b(a) = \partial_a(1 - G(a)) = -\int_R \partial_a \Psi(\vec{X}(a)) d\vec{X}$, amb $R = \{\gamma < k, (m, z, x_1, e_1, c_1, x, e_2, c_2) \in \mathbb{R}^{d-1}\}$, on $1 - G(a)$ és la probabilitat que la ciclina-CDK estigui per sobre del seu valor llindar a l'edat a . $G(a) = \int_R \Psi(\vec{X}(a)) d\vec{X}$ és l'anomenada *probabilitat de supervivència*, i.e., la probabilitat que $\vec{X}(a) \in R$. Si Ψ és aproximada per l'equació (2.9), podem obtenir una equació tancada per a G , en termes de G , $\bar{x}$ i Q_{ij} .

Estem interessats en la regió on γ és més gran que una constant, k , amb totes les altres variables variant sobre tots els seus rangs. Per tant, en aquest cas, l'expressió de G es redueix a:

$$\begin{aligned} G(a) &= \int_{\gamma < k} \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \frac{\Omega^{1/2}}{(2\pi)^{1/2} \sigma_y^{1/2}} e^{-\frac{\Omega}{2}(\gamma - \overline{\gamma(a)})^2 \sigma_y^{-1}} \times \\ &\quad \times \left(\frac{\Omega}{2\pi} \right)^{(d-1)/2} \frac{1}{A^{1/2}} e^{-\frac{\Omega}{2}(\overline{X}_{|y} - b)^t A^{-1} (\overline{X}_{|y} - b)} d\overline{X}_{|y} d\gamma = \quad (2.10) \\ &= \int_{\gamma < k} \frac{\Omega^{1/2}}{(2\pi)^{1/2} \sigma_y^{1/2}} e^{-\frac{\Omega}{2}(\gamma - \overline{\gamma(a)})^2 \sigma_y^{-1}} d\gamma, \end{aligned}$$

on $\overline{X}_{|y} = (m, z, x_1, e_1, c_1, x, e_2, c_2)$, $A = |\sigma(a)|/\sigma_y$, $b = \overline{X}_{|y}(a) + \frac{\Sigma_{ij}}{\sigma_y} (\gamma - \overline{\gamma(a)})$ i $\Sigma_{ij} = \sigma_{jj} - \sigma_{ij}^T \sigma_{ii}^{-1} \sigma_{ij}$ (matriu de covariància condicionada).

Per tant, $G(a)$ pot ser reescrita usant la funció error, tal com segueix:

$$G(a) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\Omega}(k - \overline{\gamma(a)})}{\sqrt{2\sigma_y}} \right) \right). \quad (2.11)$$

Així, doncs, l'equació per a la taxa de divisió s'obté derivant l'equació de G a (2.10):

$$\begin{aligned} \frac{dG(a)}{da} = & -\frac{1}{2} \frac{\frac{d}{da}\sigma_y(a)}{\sigma_y(a)} G(a) + \Omega \int_{y < k} \frac{d\phi(y)}{dy} \frac{dy(a)}{da} \Psi(y(a)) dy + \\ & + \Omega \frac{\frac{d}{da}\sigma_y(a)}{\sigma_y(a)} \int_{y < k} \phi(y) \Psi(y(a)) dy, \end{aligned} \quad (2.12)$$

on $\phi(y) = \frac{1}{2} (y - \bar{y}(a))^2 \sigma_y(a)^{-1}$.

Utilitzant el teorema de la divergència i desenvolupant per Taylor, la primera integral de l'equació (2.12) queda:

$$\begin{aligned} I_1 &= \left(\frac{\Omega}{2\pi\sigma_y} \right)^{1/2} \frac{dy(a)}{da} e^{-\Omega\phi(y)} \sum_i \frac{1}{i!} \Omega^i \phi(y)^i \Big|_{-\infty}^k = \\ &= \left(\frac{\Omega}{2\pi\sigma_y} \right)^{1/2} \frac{dy(a)}{da} (1 - e^{-\Omega\phi(y)}) \Big|_{-\infty}^k, \end{aligned}$$

mentre que la segona integral de l'equació (2.12) pot ser aproximada estenent el domini d'integració a $\pm\infty$:

$$\begin{aligned} I_2 &= \Omega \frac{\frac{d}{da}\sigma_y(a)}{\sigma_y(a)} \frac{1}{\sigma_y^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(y) \left(\frac{\Omega}{2\pi} \right)^{1/2} e^{-\frac{\Omega}{2} (y - \bar{y}(a))^2 \sigma_y^{-1}} dy = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\frac{d}{da}\sigma_y(a)}{\sigma_y(a)}. \end{aligned}$$

Hem comprovat mitjançant integració numèrica que l'error introduït en canviar el domini d'integració ($y < k$) per $\mathbb{R}$ a I_2 és negligible.

Finalment, podem concloure que l'EDO que $G(a)$ ha de satisfer és:

$$\frac{dG(a)}{da} = -\frac{1}{2} \frac{\frac{d}{da}\sigma_y(a)}{\sigma_y(a)} (G(a) - 1) - \left(\frac{\Omega}{2\pi\sigma_y} \right)^{1/2} \frac{dy(a)}{da} e^{-\Omega\phi(k)}. \quad (2.13)$$

L'equació (2.13), resolta conjuntament amb les equacions (2.8) i (2.7), dona la taxa de divisió com a funció de l'edat i de la concentració d'oxigen.

La figura 4 mostra la probabilitat que la ciclina-CDK excedeixi el seu valor llimdar, $1 - G(a)$, usant l'equació (2.11) acoblada amb les equacions (2.8) i (2.7), i compara el resultat amb l'algorisme de simulació estocàstica de Gillespie [20].

A la figura 5 hem representat la taxa de divisió per a diferents concentracions d'oxigen. Com podem veure, el màxim valor de $b(a)$ ocorre a temps més avançats per a concentracions d'oxigen menors. Això confirma que la falta d'oxigen retarda que ocorri la transició G_1/S . A la figura 6 s'observa que la probabilitat de divisió té més variància si incrementem el soroll en el procés.

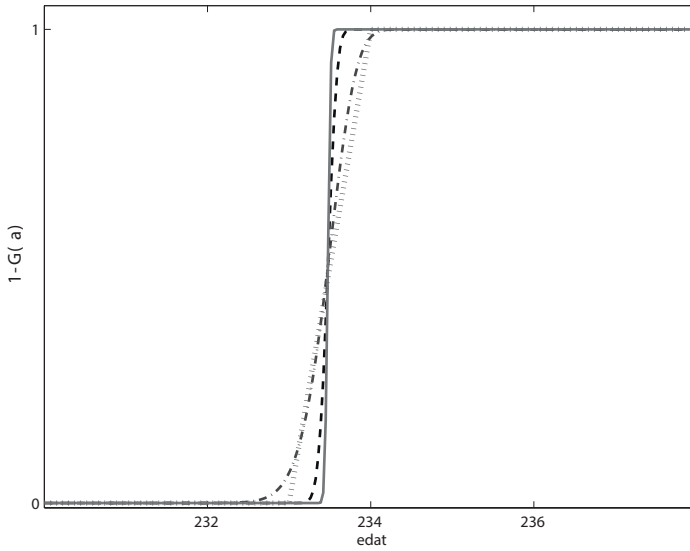


FIGURA 4: Comparació de diferents solucions de l'equació (2.11) i 100 realitzacions de l'algorisme de Gillespie amb $\Omega = 10^7$ (línia negra de guions verticals). Les solucions de l'equació (2.11) es donen per a $\Omega = 10^7$ (línia de punts i guions), 10^8 (línia de guions), 10^9 (línia contínua). S'ha pres $O_2 = 1.0$ i la condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

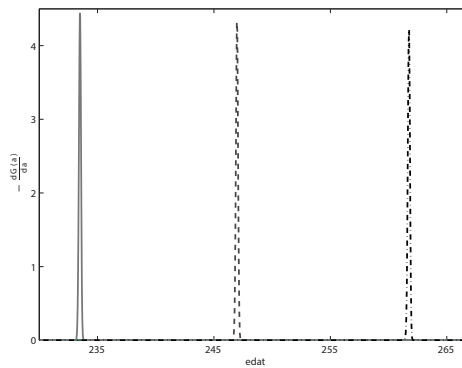


FIGURA 5: Equació (2.13): taxa de naixement per a diferents concentracions d'oxigen, amb $O_2 = 0.05$ (línia de punts i guions, a la dreta), $O_2 = 0.1$ (línia de guions, al centre), $O_2 = 1$ (línia contínua). Per a $\Omega = 10^7$ i condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

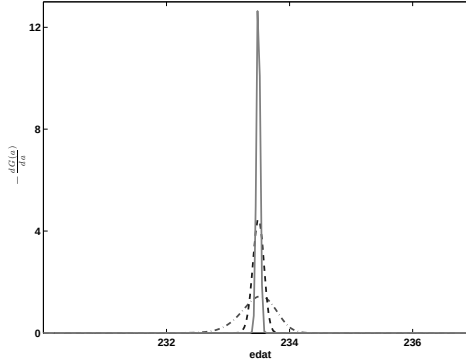


FIGURA 6: Comparació de les solucions de l'equació (2.13) per a diferents valors: $\Omega = 10^7$ (línia de punts i guions, més plana), 10^8 (línia de guions), 10^9 (línia contínua). S'ha pres $O_2 = 1.0$ i condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

3 Equació mestra estructurada per l'edat i aproximació WKB

3.1 Formulació de l'equació mestra estructurada per l'edat

Ara ja estem en disposició de formular el nostre model per a la dinàmica poblacional. Utilitzant el context anterior, calculem la taxa de naixement com a funció de l'edat cel·lular. Formulem un procés de naixement-mort que depèn de l'edat. Els paràmetres com la taxa de divisió que depèn de l'oxigen i de l'edat es determinen en termes dels models analitzats a l'escala intracel·lular, descrits a la secció anterior. Per obtenir l'equació mestra que depèn de l'edat, considerem la identitat següent:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\bar{n}(a), a + \delta a, t + \delta t) &= W(\bar{n}(a) + 1, a, t) \delta t \mathbf{P}(\bar{n}(a) + 1, a, t) + \\ &+ (1 - W(\bar{n}(a), a, t) \delta t) \mathbf{P}(\bar{n}(a), a, t), \end{aligned} \quad (3.1)$$

on $\bar{n}(a, t)$ denota la població d'edat a al temps t i on $W(\bar{n}(a), a, t) = (v + b(a))\bar{n}(a)$, amb la taxa de divisió donada per $b(a) = -\frac{dG(a)}{da}$ i v és la taxa de mortalitat, suposada constant.

Per claredat, discretitzem la variable edat a en I_t grups, de manera que les p_{0j} divisions a edat a_j estan determinades per una variable aleatòria de Poisson amb mitjana (i variància) $\lambda_j = b(a_j)n(a_j)\delta t$, distribució que denotarem per P_{λ_j} . La probabilitat de p_0 divisions en l'interval de temps $(t, t + \delta t)$ pot ser expressada com una suma de les divisions a temps t en els diferents grups d'edat a_j , és a dir, tots els possibles p_{0j} tals que $p_0 = \sum_{j \in I_t} p_{0j}$. Per tant,

$$\text{Prob}(p_0) = \mathbf{P}(\bar{n}(0) = 2p_0, t) = \sum_{\{p_{0j}\}_{j \in I_t}} \left(\prod_{j \in I_t} P_{\lambda_j}(p_{0j}) \right) \delta_{\sum_j p_{0j}, p_0}, \quad (3.2)$$

on $P_{p_{\lambda_j}}(p_{0j}) = e^{-\lambda_j} \frac{\lambda_j^{p_{0j}}}{p_{0j}!}$ denota la probabilitat que la variable de Poisson de paràmetre $\lambda_j = b(a_j)n(a_j)\delta t$ valgui p_{0j} . Quan l'esdeveniment d'una divisió ocorre, el nombre de cèl·lules amb edat $a = 0$ s'incrementa en $2p_0$, mentre que el nombre de cèl·lules amb edat $a = a_j$ disminueix en p_{0j} .

Reordenant l'equació (3.1) i prenent el límit quan $\delta t \rightarrow 0$, obtenim:

$$\frac{\partial \mathbf{P}(\bar{n}, a, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}(\bar{n}, a, t)}{\partial a} = W(\bar{n}(a) + 1, a, t)\mathbf{P}(\bar{n}(a) + 1, a, t) - W(\bar{n}(a), a, t)\mathbf{P}(\bar{n}(a), a, t). \quad (3.3)$$

Per tal de trobar una solució aproximada de l'equació (3.3), apliquem el mètode WKB proposat per Kubo *et al.* a [30], on es mostra que les taxes de transició $W(\bar{n}, a, t)$ han de ser funcions homogènies de $\bar{n}$ per tal d'obtenir una solució de l'EM de la forma $P(\bar{n}(a), a, t) = C \exp(-\Omega s(n(a), a, t))$, amb $n(a) = \bar{n}(a)/\Omega$:

$$W(\bar{n}(a), a, t) = \Omega w(n(a), a, t). \quad (3.4)$$

D'acord amb això, la probabilitat que passi una certa reacció en un interval infinitesimal de temps és proporcional a la mida del sistema i només és determinada per l'estat del sistema, representat pel conjunt de les variables intensives $n(a)$. La definició

$$P(n(a), a, t) = \Omega \mathbf{P}(\bar{n}(a), a, t),$$

juntament amb l'equació (3.4), fa que l'equació (3.3) tingui l'expressió següent:

$$\frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial P(n, a, t)}{\partial t} + \frac{\partial P(n, a, t)}{\partial a} \right) = (\nu + b(a))(n(a) + 1)P(n(a) + 1, a, t) - (\nu + b(a))n(a)P(n(a), a, t),$$

la qual cosa ens permet escriure l'EM (3.3) en forma WKB:

$$\frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial P(n, a, t)}{\partial t} + \frac{\partial P(n, a, t)}{\partial a} \right) = \left(e^{1/\Omega(\partial/\partial n(a))} - 1 \right) w(n(a), a, t)P(n(a), a, t), \quad (3.5)$$

on hem utilitzat que $e^{-(\partial/\partial n(a))}$ és el generador de les translacions a l'espai d'estats del sistema.

Considerem ara la funció generatriu de cumulants, definida com $q(u, a, t) = \log(Q(u, a, t))$, on $Q(u, a, t)$ és la funció característica de $P(n, a, t)$, definida com la seva transformada de Fourier:

$$Q(u, a, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iun} P(n, a, t) dn.$$

Els cumulants, $q_k(a, t)$, es poden obtenir a partir de $q(u, a, t)$, com els coeficients del desenvolupament:

$$q(u, a, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^k}{k!} u^k q_k(a, t). \quad (3.6)$$

El procediment que seguim a continuació, que està basat en la feina de Kubo *et al.* a [30], és escriure una equació per a $Q(u, a, t)$ i construir desenvolupaments asimptòtics per a $Q(u, a, t)$, $q(u, a, t)$ i $q_k(a, t)$. Aquestes aproximacions donaran lloc a sistemes d'EDO per als cumulants i per als moments de la solució de l'EM. Estem interessats en el sistema d'equacions per al primer moment ($q_1(a, t)$) i per als elements de la matriu de covariància ($q_2(a, t)$), que ens permetran estudiar el comportament mitjà del sistema i les fluctuacions gaussianes al seu voltant.

Per obtenir l'equació per a $Q(u, a, t)$, prenem la transformada de Fourier de l'EM, equació (3.5):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial Q(u, a, t)}{\partial t} + \frac{\partial Q(u, a, t)}{\partial a} \right) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iun} \left(e^{1/\Omega(\partial/\partial n(a))} - 1 \right) \mathbf{w}(n(a), a, t) P(n(a), a, t) dn. \end{aligned} \quad (3.7)$$

La integral del costat dret de l'equació (3.7) és:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iun} \left(e^{1/\Omega(\partial/\partial n(a))} - 1 \right) \mathbf{w}(n(a), a, t) P(n(a), a, t) dn = \\ = \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iun} \left(\frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial n} \right)^k \mathbf{w}(n, a, t) P(n, a, t) dn = \\ = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(i \frac{u}{\Omega} \right)^k \int_{-\infty}^{\infty} e^{iun} \mathbf{w}(n, a, t) P(n, a, t) dn. \end{aligned} \quad (3.8)$$

A més, substituint l'equació (3.8) a l'equació (3.7), reordenant termes i recordant que la transformada de Fourier del producte de dues funcions és igual a la convolució de les transformades de Fourier corresponents, obtenim finalment:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial Q(u, a, t)}{\partial t} + \frac{\partial Q(u, a, t)}{\partial a} \right) = \\ = \frac{1}{2\pi} (e^{i\frac{u}{\Omega}} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} Q(u - v, a, t) \omega(v, a, t) dv, \end{aligned} \quad (3.9)$$

on $\omega(v, a, t)$ és una transformada de Fourier de $\mathbf{w}(n, a, t)$.

L'equació (3.9) necessita ser complementada amb condicions de frontera per a $P(n, a = 0, t)$, és a dir, per la probabilitat que el nombre de divisions en l'interval de temps $(t, t + \delta t)$ sigui $p_0 = n/2$. Tal com l'hem expressat a (3.2), el nombre de divisions en aquest interval de temps pot ser escrit com una suma de les p_{0j} divisions a temps t en els grups d'edat a_j , és a dir,

$$P(n = 2p_0, a = 0, t) = \sum_{\{p_{0j}\}} \left(\prod_j P_{p_{0j}}(p_{0j}) \right) \delta_{\sum_j p_{0j}, p_0},$$

on P_{λ_j} és una distribució de Poisson de paràmetre $\lambda_j = b(a_j)n(a_j)\delta t$ i $P_{P_{\lambda_j}}(p_{0j})$ denota la probabilitat que aquesta variable valgui p_{0j} :

$$P_{P_{\lambda_j}}(p_{0j}) = e^{-\lambda_j} \frac{\lambda_j^{p_{0j}}}{p_{0j}!},$$

i, en conseqüència, la corresponent funció generatriu de cumulants per la variable aleatòria p_{0j} és $Q_j(s) = e^{\lambda_j(e^{is}-1)}$. Ara, com que $P(p_0)$ és una convolució, la funció generatriu de cumulants per a $P(p_0)$, $Q(s, a = 0, t)$, està determinada per [24]:

$$Q(s, a = 0, t) = \prod_j Q_j(s) = e^{\sum_j b(a_j)n(a_j)(e^{is}-1)\delta t},$$

que, prenent el límit quan $\delta t \rightarrow 0$, dóna:

$$Q(s, a = 0, t) = e^{\int_0^\infty (e^{is}-1)b(a)n(a)da}. \quad (3.10)$$

3.2 Anàlisi WKB de l'equació mestra estructurada per l'edat

Un cop hem formulat la nostra equació mestra estructurada per l'edat, o, més aviat, el problema equivalent per a la corresponent funció generatriu, equacions (3.9) i (3.10), podem dur a terme la seva anàlisi WKB [3, 30]. Abans de continuar, recordem que $Q(s, a, t)$ està relacionada amb la funció generatriu dels cumulants, $q(s, a, t)$: $Q(s, a, t) = \exp(q(s, a, t))$, una relació que pot ser reexpressada com:

$$Q(u - v, a, t) = e^{q(u-v, a, t)} = \exp\left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} u^k q^{(k)}(-v, a, t)\right), \quad (3.11)$$

on $q(u - v, a, t)$ ha estat reemplaçada per $q(u - v, a, t) = e^{u\partial_v} q(-v, a, t)$ i $q^{(k)}(-v, a, t) \equiv (\partial_u)^k q(u, a, t)|_{u=-v}$. Usant l'equació (3.11), l'equació (3.9) es converteix en:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Omega} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^k}{k!} u^k \left(\frac{\partial q_k(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_k(a, t)}{\partial a} \right) = \\ & = \frac{1}{2\pi} \left(e^{i\frac{u}{\Omega}} - 1 \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q(u - v, a, t)}{Q(u, a, t)} \omega(v, a, t) dv = \\ & = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(e^{i\frac{u}{\Omega}} - 1 \right) \exp\left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{i^j}{j!} u^j h_j(-v, a, t)\right) e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) dv \right]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Per conveniència, hem definit la quantitat següent:

$$h_j(-v, a, t) \equiv i^j (q^{(j)}(-v, a, t) - q^{(j)}(0, a, t))$$

i hem utilitzat que $q^{(0)}(-v, a, t) = q(-v, a, t)$.

Centrem-nos ara en el primer cumulant $q_1(a, t) = \langle n(a, t) \rangle$, que està determinat pels termes $O(\epsilon)$ a l'equació (3.12). Desenvolupant les exponencials del costat dret de l'equació (3.12) i conservant només els termes de primer ordre, obtenim:

$$\epsilon \left(\frac{\partial q_1(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_1(a, t)}{\partial a} \right) = -\frac{\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) m_0(\epsilon, v, a, t) dv, \quad (3.13)$$

on $\epsilon \equiv \Omega^{-1}$ i $m_k(\epsilon, v, a, t)$ està definida per:

$$\exp \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{i^j}{j!} u^j h_j(-v, t) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} u^k m_k(\epsilon, v, a, t). \quad (3.14)$$

L'equació (3.13) ha de ser equilibrada correctament respecte del petit paràmetre ϵ . Aquest equilibri s'aconsegueix si, a l'ordre dominant, $m_0(\epsilon, v, a, t) = O(\epsilon^0)$, que, de fet, se satisfà, ja que $m_0(\epsilon, v, a, t) = 1$ (vegeu l'equació (3.14)) i $q_1(a, t) = O(\epsilon^0)$.

Repetint el mateix per al segon cumulant, $q_2(a, t)$, obtenim:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\partial q_2(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_2(a, t)}{\partial a} \right) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\epsilon m_1(\epsilon, v, a, t) + \frac{\epsilon^2}{2} m_0(\epsilon, v, a, t) \right) e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) dv. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Equilibrant l'equació (3.15), s'obté l'escalament següent a l'ordre dominant: $q_2(a, t) = O(\epsilon)$ i $m_1(\epsilon, v, a, t) = O(\epsilon)$. Es pot comprovar que aquestes relacions d'escalament són coherents amb l'equació (3.14).

En general, podem veure que la substitució d'escalament

$$\begin{aligned} q_k(a, t) &= \epsilon^{k-1} q_{k1}(a, t) + \epsilon^k q_{k2}(a, t) + O(\epsilon^{k+1}), \\ m_k(\epsilon, v, a, t) &= \epsilon^k m_{k1}(v, a, t) + \epsilon^{k+1} m_{k2}(v, a, t) + O(\epsilon^{k+2}), \end{aligned}$$

és coherent amb l'equació (3.14) i porta a equacions equilibrades per als cumulants $q_k(a, t)$.

A l'ordre dominant, l'equació per a $q_1(a, t)$ és de la forma:

$$\left(\frac{\partial q_1(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_1(a, t)}{\partial a} \right) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) dv, \quad (3.16)$$

mentre que l'equació corresponent per a $q_2(a, t)$ és:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\partial q_2(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_2(a, t)}{\partial a} \right) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\epsilon m_1(\epsilon, v, a, t) + \frac{\epsilon^2}{2} \right) e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) dv. \end{aligned} \quad (3.17)$$

L'aproximació a l'ordre dominant de l'equació (3.17) s'obté de la manera següent. De les definicions de les quantitats h_j i m_j , n'obtenim l'expressió següent per a h_j :

$$h_j(-v, a, t) = i^{-j} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^{k+j}}{k+j} (\partial_u)^j \left(u^{(k+j)} q_{(k+j)}(a, t) \right) \Big|_{u=-v}.$$

Per a $j = 1$, de l'equació (3.14), deduïm que $m_1 = h_1$. Tenint en compte la substitució d'escalament de m_k i q_k , obtenim l'aproximació d'ordre $O(\epsilon)$ següent:

$$\epsilon m_{11}(v, a, t) = \epsilon \frac{i}{2} \partial_v (v^2 q_{21}(a, t)). \quad (3.18)$$

Per tant, substituint l'equació (3.18) i quedant-nos només amb les contribucions de l'ordre dominant, l'equació per a $q_{21}(a, t)$ queda així:

$$\left(\frac{\partial q_{21}(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_{21}(a, t)}{\partial a} \right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (-iv q_{21}(a, t) + 1) e^{q(-v, a, t)} \omega(v, a, t) dv.$$

A més a més, la substitució d'escalament per a $q_k(a, t)$ i l'equació (3.6) porten a:

$$\begin{aligned} q(u, a, t) &= \frac{1}{\epsilon} \rho(\epsilon, u, a, t), \\ \rho(\epsilon, u, a, t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^j}{j!} u^j \left(\epsilon^{j+k-1} q_{jk}(a, t) \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Això pràcticament completa la nostra deducció de les equacions d'evolució per a $q_1(a, t)$ i $q_2(a, t)$. A l'ordre dominant, l'equació (3.19) pot ser reescrita com a:

$$\rho(\epsilon, u, a, t) = \epsilon \rho_1(u, a, t) + O(\epsilon^2), \quad (3.20)$$

$$\rho_1(u, a, t) = iu q_{11}(a, t). \quad (3.21)$$

Substituint les equacions (3.20) i (3.21) a l'equació (3.16), obtenim que, a l'ordre dominant, les equacions per a $q_{11}(a, t)$ i $q_{21}(a, t)$ són les següents:

$$\left(\frac{\partial q_{11}(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial q_{11}(a, t)}{\partial a} \right) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{q(-v, a, t)} \bar{\mathbf{w}}(v, a, t) dv = c(q_{11}, t),$$

on $\bar{\mathbf{w}}(v, a, t)$ és la transformada de Fourier de $\mathbf{w}(n, a, t)$ i, per tant, tenim $c(q_{11}, t) = -(v + b(a))q_{11}$.

Finalment, l'equació d'evolució per a $n(a, t) = q_{11}(a, t)$ és:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial n(a, t)}{\partial a} \right) &= -(v + b(a))n(a, t), \\ n(0, t) &= 2 \int_0^{\infty} b(a) n(a, t) da, \end{aligned} \quad (3.22)$$

mentre que l'equació per a la variància i $\sigma_n(a, t) = q_{21}(a, t)$ és:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \sigma_n(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_n(a, t)}{\partial a} \right) &= (\nu + b(a)) \sigma_n(a, t) - (\nu + b(a)), \\ \sigma_n(0, t) &= 4 \int_0^\infty b(a) n(a, t) da. \end{aligned} \quad (3.23)$$

3.3 Aproximació gaussiana per al model estocàstic multiescala

Després dels càlculs de les seccions anteriors, ara ja podem escriure l'aproximació gaussiana per al model multiescala representat esquemàticament a la figura 1. El sistema acoblat que determina aquesta aproximació és el següent:

- Concentració d'oxigen, O_2 :

$$\frac{dO_2}{dt} = S - \kappa O_2 M, \quad \text{on} \quad M(t) = \int_0^\infty n(a, t) da, \quad (3.24)$$

on O_2 és la concentració d'oxigen consumida per la població total, $M(t)$; S és la taxa de distribució d'oxigen a la població, la qual nosaltres suposem constant, i κ és la taxa de consum d'oxigen per cèl·lula, la qual suposem que és independent de l'edat.

- Taxa de divisió que depèn de l'edat i de l'oxigen (secció 3):

$$\begin{aligned} \dot{\bar{x}} &= \sum_i r_i w_i (\bar{x}(a), r, a, O_2), \\ \dot{Q}_{ij}(a) &= \sum_k \left(Q_{ik} \frac{\partial c_j(\bar{x}, a)}{\partial \bar{x}_k} + \frac{\partial c_i(\bar{x}, a)}{\partial \bar{x}_k} Q_{kj} \right) + \sum_r r_i r_j w(\bar{x}, r, a, O_2), \quad (3.25) \\ -b(a) &= \frac{dG(a)}{da} = -\frac{1}{2} \frac{\frac{d}{da} \sigma_y(a)}{\sigma_y(a)} (G(a) - 1) - \left(\frac{\Omega}{2\pi \sigma_y} \right)^{1/2} \frac{dy(a)}{da} e^{-\Omega \phi(k)}. \end{aligned}$$

- Mitjana i variància de la població estructurada per l'edat (subseccions 3.1 i 3.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial n(a, t)}{\partial a} &= -(\nu + b(a)) n(a, t), \\ n(0, t) &= 2 \int_0^\infty b(a) n(a, t) da, \quad (3.26) \\ \frac{\partial \sigma_n(a, t)}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_n(a, t)}{\partial a} &= (\nu + b(a)) \sigma_n(a, t) - (\nu + b(a)), \\ \sigma_n(0, t) &= 4 \int_0^\infty b(a) n(a, t) da. \end{aligned}$$

4 Esquema numèric: mètode de salt τ que depèn de l'edat

En aquesta secció, descrivim un mètode numèric estocàstic per comparar la solució de l'EM (3.3)–(3.2) amb les solucions de l'aproximació WKB donades pel sistema d'equacions (3.24)–(3.26).

Utilitzem una extensió del mètode de simulació de salt τ en el procés naixement-mort descrit per l'EM (3.3)–(3.2), on la probabilitat de divisió està determinada per l'equació (2.11). Utilitzant un salt τ a cada grup d'edat a_i present a la població, generem un pas de temps a cada edat, τ_i . El pas de temps global, τ , es tria de forma que sigui el mínim dels τ_i per a tot i . Arribats a aquest punt, podem calcular el nombre d'esdeveniments divisió i esdeveniments mort que ocorraran durant el lapse de temps τ a cada grup d'edat a_i , que són modelats per distribucions de Poisson $\mathcal{P}(d_{ij}\tau)$, on:

$$d_{i1} = b(a_i)n(a_i), \quad (4.1)$$

$$d_{i2} = \nu n(a_i). \quad (4.2)$$

Les igualtats (4.1) i (4.2) donen les probabilitats de divisió i de mort durant un (petit) interval de temps de durada τ per a cèl·lules d'edat a_i . Els esdeveniments amb probabilitats donades per (4.1) i (4.2) produeixen canvis associats a la població $n(a_i)$ donats per $r_{i1} = -1$ i $r_{i2} = -1$, respectivament. Addicionalment, un esdeveniment divisió (la probabilitat del qual és donada per (4.1)) té un canvi associat a les cèl·lules nounades, és a dir, a les cèl·lules amb edat $a = 0$, donat per $r_0 = 2$.

Primer, introduïrem el mètode i explicarem com generalitzar-lo al nostre problema estructurat per l'edat. Després, procedirem a descriure l'algorisme usat en les nostres simulacions.

4.1 Mètode de salt τ estructurat per l'edat

En aquesta secció, explicarem el mètode de salt τ descrit a [12, 21] i la modificació que nosaltres n'hem fet. L'algorisme de simulació estocàstica de Gillespie (SSA) [20] proporciona realitzacions exactes de la densitat de probabilitat que resolen l'equació mestra corresponent. Per aconseguir-ho, el que fa l'algorisme és dur a terme tots els esdeveniments en el camí de mostra, la qual cosa significa que aquest mètode pot ser molt lent, en particular, per a sistemes que involucrin processos tant ràpids com lents. L'algorisme de simulació estocàstica SSA també genera una gran quantitat d'informació detallada de cada camí mostrat, el coneixement de la qual pot ser innecessari en moltes aplicacions. En vista d'aquesta situació, el mètode de salt τ [21] va ser proposat amb l'objectiu d'accelerar la simulació dels processos de Markov, la qual cosa respon a la qüestió següent: amb quina freqüència es produeix cada procés en l'interval següent de temps especificat τ ? El fonament matemàtic d'aquest algorisme pot remuntar-se a l'anomenada *representació dels processos de Markov*. Més específicament, suposem un procés de Markov, $X(t)$, la densitat

de probabilitat del qual satisfà l'equació mestra:

$$\frac{d\Psi(X, t)}{dt} = \sum_i (W_i(X - r_i, t)\Psi(X - r_i, t) - W_i(X, t)\Psi(X, t)). \quad (4.3)$$

Cada reacció i , involucrada en el procés descrit per l'equació (4.3), està caracteritzada per una distribució de temps d'espera exponencial [20]:

$$P_i(t_w | X(t)) = W_i(X, t)e^{-t_w/W_i(X, t)}.$$

Per tant, sabem que el nombre de vegades que el canal i és utilitzat en l'interval de temps $(0, t)$ és $\mathcal{P}\left(\int_0^t W_i(X, s) ds\right)$, on $\mathcal{P}(\lambda)$ és un nombre aleatori amb distribució de Poisson amb paràmetre λ ; vegeu [24]. Aleshores, $X(t)$ es pot representar formalment com:

$$X(t) = X(t = 0) + \sum_i r_i \mathcal{P}\left(\int_0^t W_i(X, s) ds\right).$$

Utilitzant la propietat de Markov, $X(t + \tau)$ pot ser expressat en termes de $X(t)$ com:

$$X(t + \tau) = X(t) + \sum_i r_i \mathcal{P}\left(\int_t^{t+\tau} W_i(X, s) ds\right). \quad (4.4)$$

Així, doncs, la qüestió que el mètode de salt τ pretén respondre pot ser reformulada de la forma següent: sota quines condicions l'equació (4.4) pot ser aproximada per

$$X(t + \tau) \simeq X(t) + \sum_i r_i \mathcal{P}(W_i(X, t)\tau).$$

Dit d'una altra manera, necessitem estimar τ de forma que $\int_t^{t+\tau} W_i(X, s) ds \simeq W_i(X, t)\tau$. Aquest és un problema per al qual encara no es coneix cap solució sistemàtica. En canvi, s'han donat diverses estimacions, conegudes com a *condicions de salt*, sota certes hipòtesis [12, 21]. A grans trets, podem dir que τ necessita ser triat de forma que $|W_i(X, t + k_i) - W_i(X, t)|$ sigui acotat per una quantitat petita.

Per tal de generalitzar aquest mètode al nostre model estructurat per l'edat, considerem primer un vector d'edats, les components del qual són $n(a_i)$ amb $i \in I_t$, on I_t es mou en el conjunt de les edats presents a la població a l'instant t , és a dir, de forma que $n(a_i) > 0$ a temps t . El primer problema és triar un valor per a τ que satisfaci la condició de salt. La generalització més simple de l'algorisme de salt τ estàndard és triar un valor de salt, τ_i , per a cada edat, a_i , amb $i \in I_t$, d'acord amb el criteri establert a [12], i després triar el mínim entre tots ells.

Comencem calculant el temps, τ_i , per a cada edat, a_i , amb $i \in I_t$, utilitzant el mètode formulat per Cao *et al.* a [12], que millora els resultats previs de Gillespie i Petzold a [22], ja que s'ajusta millor a la condició de salt tot acotant

uniformement els canvis relatius en les funcions de tendència. A més a més, aquest mètode és més ràpid que el procediment suggerit a [22], ja que el nombre de passos auxiliars utilitzats per calcular el salt de temps s'incrementa linealment amb el nombre d'espècies reactants, en lloc de fer-ho de forma quadràtica amb el nombre de canals de reacció [12].

L'estratègia darrere d'aquest procediment de selecció dels τ_i és acotar els canvis relatius en el nombre d'individus de les poblacions, de forma que els canvis relatius en les funcions de tendència siguin tots aproximadament acotats per un valor específic ϵ ($0 < \epsilon < 1$). Sigui

$$\Delta_{\tau_i} n(a_i) \equiv n(a_i)(t + \tau_i) - n(a_i)(t) = - \sum_{j=1}^2 \mathcal{P}(d_{ij}\tau_i). \quad (4.5)$$

La selecció de τ l'hem de basar en la condició

$$\Delta_{\tau_i} n(a_i) \leq \max\{\epsilon d_{ij}, 1\}, \quad \text{per a } i \in J_{rs} \text{ i } j = 1, 2, \quad (4.6)$$

on J_{rs} denota el conjunt d'índexs de tota la població amb edat diferent (o sigui, $i \in J_{rs}$ si i només si d_{ij} és l'argument de com a mínim una funció de tendència).

Com que les variables aleatòries Poisson $\mathcal{P}(d_{ij}\tau_i)$ del costat dret de l'equació (4.5) són estadísticament independents i tenen mitjanes i variàncies $d_{ij}\tau_i$, la mitjana i la variància de la combinació lineal de l'equació (4.5) poden ser calculades fàcilment,

$$\langle \Delta_{\tau_i} n(a_i) \rangle = \sum_j -d_{ij}\tau_i, \quad \text{var}\{\Delta_{\tau_i} n(a_i)\} = \sum_j d_{ij}\tau_i. \quad (4.7)$$

Utilitzant el mateix raonament que es va fer servir en la derivació del procediment de Gillespie i Petzold per a la selecció de τ [22], nosaltres considerarem que la cota (4.6) de $\Delta_{\tau_i} n(a_i)$ serà satisfeta substancialment, si és satisfeta simultàniament per la mitjana absoluta i la desviació estàndard de $\Delta_{\tau_i} n(a_i)$:

$$|\langle \Delta_{\tau_i} n(a_i) \rangle| \leq \max\{\epsilon d_{ij}, 1\}, \quad \sqrt{\text{var}\{\Delta_{\tau_i} n(a_i)\}} \leq \max\{\epsilon d_{ij}, 1\}, \quad i \in J_{rs}, j = 1, 2. \quad (4.8)$$

Substituint la fórmula (4.7) a les condicions (4.8), obtenim les cotes següents per a τ

$$\tau_i \leq \frac{\max\{\epsilon d_{ij}, 1\}}{|\sum_j d_{ij}|}, \quad \tau_i \leq \frac{\max\{\epsilon d_{ij}, 1\}^2}{|\sum_j d_{ij}|}, \quad \text{per a } i \in J_{rs}, j = 1, 2,$$

i, per tant, prenem

$$\tau_i = \min_{j=1,2} \left\{ \frac{\max\{\epsilon d_{ij}, 1\}}{|\sum_j d_{ij}|}, \frac{\max\{\epsilon d_{ij}, 1\}^2}{|\sum_j d_{ij}|} \right\}.$$

Arribats a aquest punt, hem computat el salt de temps per a cada edat, τ_i . Per tal de fer avançar el sistema en temps, prenem el mínim τ_i que satisfà la condició de salt corresponent,

$$\tau = \min_{i \in J_{rs}} \{\tau_i\},$$

i calculem les quantitats $k_{ij} = P(d_{ij}\tau)$ i $\lambda_i = \sum_j k_{ij}$. Finalment, fem efectiu el salt, de manera que reemplacem t per $t + \tau$ i $n(a_i)$ per $n(a_i) - \lambda_i$. Si $k_{i1} = P(d_{i1}\tau)$ no és zero per a una certa edat i , significa que en la població d'edat a_i hi ha hagut divisions i, consegüentment, la població d'edat zero és $n(0, t + \tau) = 2 \sum_i P(d_{i1}\tau)$. Això, al seu torn, també implica que el vector numèric d'edats té ara una nova component, és a dir, $I_{t+\tau} = I_t + 1$.

Per calcular d_{i1} , necessitem saber el valor de la taxa de divisió, $b(a_i)$, al nou temps $t + \tau$. Per això, resollem el sistema (3.24)–(3.25) en l'interval de temps $(t, t + \tau)$ per a cada edat utilitzant el vector $\overline{n(a_i)}$. Per fer-ho, hem utilitzat un mètode implícit Runge-Kutta de segon ordre implementat a la GNU Scientific Library (GSL). Ara, doncs, tenim la probabilitat de divisió a temps t . Utilitzant l'equació (2.11), obtenim $1 - G(a_i)_t$ a temps t . Així, calculem la taxa de divisió per a cada edat:

$$b(a_i) = \frac{(1 - G(a_i)_t) - (1 - G(a_i)_{t+\tau})}{\tau}.$$

4.2 Descripció de l'algorisme

L'algorisme de simulació és:

1. Inicialització. Començar amb un vector d'edats inicial, $\overline{n(a, 0)}$ a $t = 0$, les components del qual, $n(a_i, 0)$, donen la població corresponent a cada grup d'edat present a la població inicial. La dimensió d'aquest vector es denota per I , i correspon al nombre de grups d'edat amb població inicial diferent de zero. A $t = 0$, $b(a_i) = 0$ per a qualsevol edat.
2. Computar les taxes de divisió i de mortalitat per a cada edat:
 $d_{i1} = b(a_i)n(a_i)$ i $d_{i2} = \nu n(a_i)$.
3. Determinar el salt de temps τ , d'acord amb la condició del salt (vegeu la subsecció 4.1).
4. Actualitzar les variables del sistema:
 $\overline{n(a, t)} \leftarrow \overline{n(a, t)} - (P(d_{i1}\tau) + P(d_{i2}\tau))_{i \in I}$, $t \leftarrow t + \tau$, $a \leftarrow a + \tau$.
5. Determinar el nombre de naixements: $n(0, t) = 2 \sum_i P(d_{i1}\tau)$. Si el nombre de naixements $n(0, t)$ és diferent de zero, hem d'afegir la nova component al vector distribució d'edats, és a dir, $I \leftarrow I + 1$.
6. Resoldre l'equació per a la concentració d'oxigen a l'interval $(t, t + \tau)$:
 $\partial_t O_2 = F - \kappa O_2 M$, on $M(t) = \sum_i n(a_i, t)$ és la població total.
7. Calcular les taxes de divisió, $b(a_i)$, usant les probabilitats de divisió a temps t : usant l'equació (2.11), obtenim $1 - G(a_i)_t$ a temps t i, aleshores, calculem la taxa de divisió, $b(a_i) = \frac{(1 - G(a_i)_{t-\tau}) - (1 - G(a_i)_t)}{\tau}$.
8. Bucle de l'ítem 2 al 7 fins que $t \geq T$.

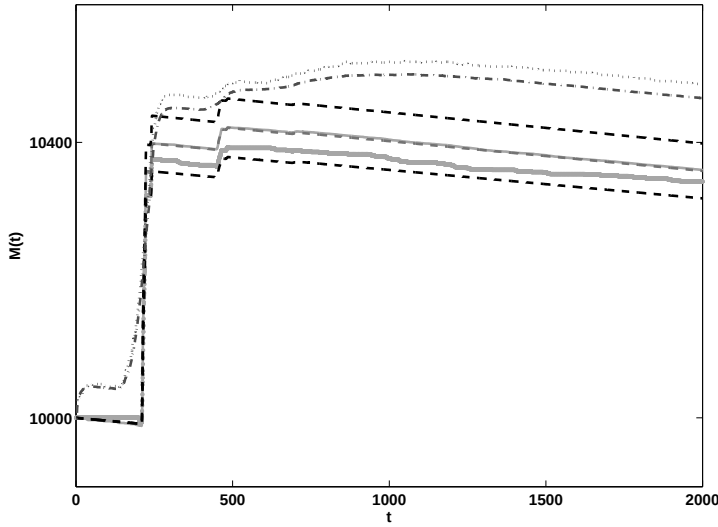


FIGURA 7: Una realització (en traç de guions verticals) i 100 realitzacions (en línia grisa de guions i punts) de l'algorisme de simulació de salt τ de l'equació (3.3)–(3.2) amb $\Omega = 10^3$, i, també, una realització en gris clar gruixut i 100 realitzacions en línia grisa clara del mateix algorisme amb $\Omega = 10^7$, comparades amb la solució de l'equació (3.22) (línia de guions grisa) amb error calculat usant l'equació (3.23) (línies de guions negres), amb $\Omega = 10^4$ i condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

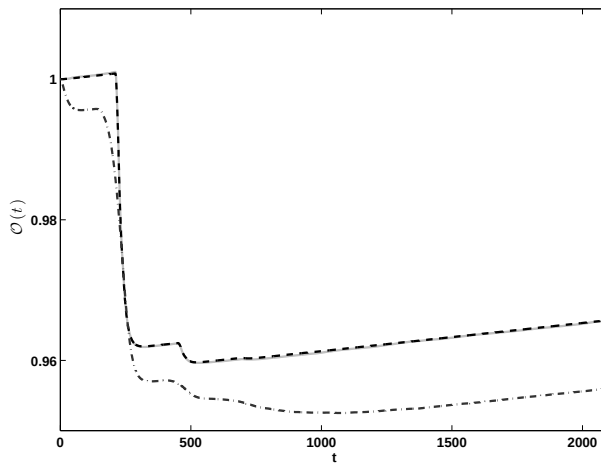


FIGURA 8: Comparació del consum d'oxigen utilitzant 100 realitzacions de l'algorisme de simulació de salt τ de l'equació (3.3)–(3.2) per a $\Omega = 10^3$ (línia de guions i punts grisa) i per a $\Omega = 10^7$ (línia grisa clara) amb el consum d'oxigen que s'obté usant l'equació (3.22) (línia de guions), amb $\Omega = 10^4$, $\nu = 0.0001$ i condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

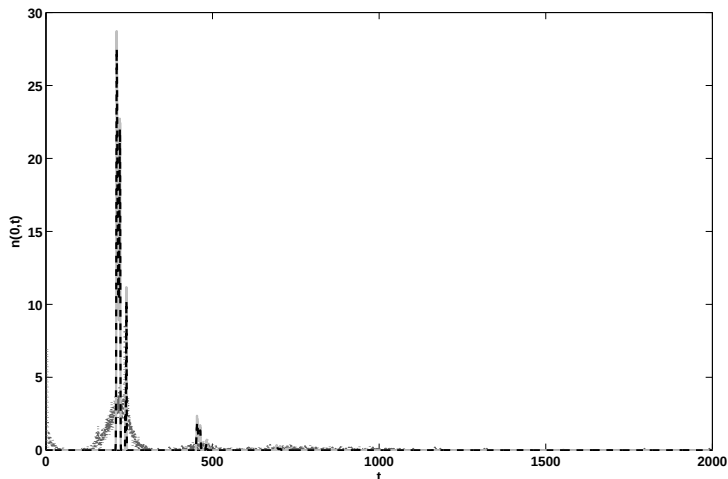


FIGURA 9: Comparació del nombre de naixements utilitzant 100 realitzacions de l'algorisme de simulació de salt τ de l'equació (3.3)–(3.2) per a $\Omega = 10^3$ (línia de guions verticals gris fosca) i per a $\Omega = 10^7$ (línia gris clara) amb els naixements que s'obtenen usant l'equació (3.22) ($n(0, t)$ és la línia de guions), amb $\Omega = 10^4$, $\nu = 0.0001$ i condició inicial $\vec{x} = (5, 1.4, 0.01, 0.01, 0, 0.99, 0.01, 0, 0.01)$.

Els resultats de les simulacions usant aquest algorisme es poden veure a les figures 7 i 9, on l'algorisme de simulació de salt τ estructurat per l'edat es compara amb la solució numèrica del sistema d'equacions (3.22), per tal de validar l'aproximació WKB-gaussiana. L'aproximació gaussiana de les equacions (3.22) implica que el 68.2% de les realitzacions hauria d'estar dins de la regió delimitada per les cotes superior i inferior donades per $n(t, a) \pm \Omega^{-\alpha_0/2} \sigma_n(t, a)$. La figura 7 mostra que les realitzacions estocàstiques generades pel nostre algorisme estan entre les cotes previstes per a l'aproximació gaussiana.

5 Conclusions i discussió

En aquest article, presentem una formulació d'un model estocàstic multiescala de la dinàmica de les poblacions cel·lulars on nivells d'organització biològica diferents, caracteritzats per escales temporals diferents (vegeu la figura 1), estan acoblats. Descrivim la dinàmica estocàstica de la població cel·lular (*escala cel·lular*, usant la mateixa terminologia que a [2]) mitjançant un procés de naixement i mort on la taxa de divisió és descrita per un model de progressió en el cicle cel·lular regulada per l'oxigen (*escala intracel·lular*, usant la terminologia de [2]), i, per tant, acoblem les escales cel·lular i intracel·lular. El sistema acoblat resultant és una població cel·lular estocàstica estructurada per l'edat. La taxa

de divisió es descriu en termes d'un nou mètode basat en un enfocament de temps mitjà de primer pas, el qual ens permet determinar la taxa de divisió com la taxa mitjana a la qual les proteïnes clau involucrades en la regulació del cicle cel·lular creuen el valor llindar d'activació en funció de l'edat cel·lular (és a dir, el temps que ha transcorregut des de la darrera divisió cel·lular). La nostra metodologia, per tant, ens permet analitzar l'acoblament entre les fluctuacions causades per soroll molecular a nivell intracel·lular i el soroll cel·lular a causa de la mida finita de la població.

Amb l'objectiu d'analitzar el comportament del nostre model, a la secció 3, hem estès un mètode asimptòtic de tipus WKB inicialment proposat per Kubo *et al.* [3, 30] per obtenir una solució aproximada de l'equació mestra (3.5) de naixement i mort estructurada per l'edat. Duent a terme aquesta aproximació a un ordre menor, obtenim una aproximació gaussiana per a la densitat de probabilitat (estructurada per l'edat), on la mitjana corresponent, $n(a, t)$, i la variància $\sigma_n(a, t)$ són les solucions de dues EDP semilineals acoblades (vegeu les equacions (3.24)–(3.26)).

Les EDP semilineals per a $n(a, t)$ i $\sigma_n(a, t)$ estan acoblades a escala intracel·lular a través de la seva dependència de la taxa de divisió (que depèn de l'edat), $b(a, t)$. Aquesta quantitat s'obté en termes del temps mitjà de primer pas per al model del cicle cel·lular que depèn de l'oxigen (els detalls es donen a la secció 2): considerem que la cèl·lula entra en la fase de proliferació del cicle cel·lular quan la concentració de CycB està per sobre d'un valor llindar determinat. La taxa de divisió, per tant, és donada per la taxa a la qual el sistema creua el valor llindar esmentat anteriorment. Per tal de resoldre aquest problema, duem a terme una aproximació WKB [3, 30] de l'equació mestra corresponent (vegeu l'equació (2.1) i la taula 1) per obtenir una aproximació gaussiana, la qual està determinada per la solució del sistema d'EDO per a la mitjana, (2.6), i per a la variància, (2.7). Això, al seu torn, ens permet trobar una aproximació a la solució del problema de temps mitjà de primer pas i, per tant, a la taxa de divisió que depèn de l'edat.

La nostra formulació per a la progressió del cicle cel·lular regulada per l'oxigen és descrita pel temps mitjà d'activació de primer pas. L'aproximació per a la divisió es calcula usant la probabilitat que la ciclina-CDK estigui per sota d'un valor llindar, que correspon a la probabilitat d'extinció, equació (2.10), de forma que el procés de reproducció ocorre amb probabilitat complementària d'aquella. Per calcular el procés d'activació, hem usat el mètode WKB per obtenir una solució aproximada a l'EM del cicle cel·lular. Aquest resultat és una sèrie de sistemes d'EDO per als cumulants d'ordre n ; hem usat ordre 2 per obtenir una solució de l'EM, (2.9). D'acord amb la comparació entre els resultats del nostre model reduït i les simulacions de Gillespie, podem afirmar que el nostre enfocament és una bona aproximació només per a soroll intracel·lular petit i mida gran del sistema, d'ordre $\Omega = 10^7$ o superior (vegeu la figura 3). Per obtenir una aproximació millor, hem d'utilitzar un ordre més gran que 2 en

l'aproximació WKB. El sistema s'acobla a través d'un mecanisme de retroalimentació negatiu, on la població consumeix oxigen que, al seu torn, regula la progressió del cicle cel·lular i, per tant, la taxa de divisió.

Per tal de validar el nostre enfocament asimptòtic en el model estocàstic multiescala, hem introduït una extensió estructurada per l'edat del mètode de simulació de salt τ en el procés naixement-mort associat a les equacions (3.3)–(3.2), amb la taxa de divisió calculada amb l'equació (2.11). Comparem els resultats de les simulacions estocàstiques amb l'aproximació WKB de la dinàmica de la població cel·lular estructurada per l'edat a la figura 7, on es poden veure realitzacions del procés generades utilitzant el nostre model de salt τ estructurat per l'edat amb l'aproximació asimptòtica gaussiana. A la figura 8 hi representem l'evolució temporal de la concentració d'oxigen, i a la figura 9 hi mostrem el nombre de naixements per l'aproximació asimptòtica i les simulacions estocàstiques. Aquesta comparació ens permet avaluar tant la precisió com el rang d'aplicabilitat del nostre mètode asimptòtic. Els nostres resultats confirmen que, per al model intracel·lular considerat en aquest article, l'aproximació asimptòtica és precisa només si considerem que l'escala per al nombre de proteïnes al model del cicle cel·lular intracel·lular, Ω , sigui prou gran. En aquest cas, com es pot veure a les figures 7, 8 i 9, trobem que la concordància entre els resultats numèrics i asimptòtics és bona. Aquesta limitació pel que fa al nombre de proteïnes prové del fet que, en el model del cicle cel·lular considerat en aquest treball, la transició que anuncia l'inici de la proliferació (és a dir, quan CycB arriba al valor llindar) està precedida d'una bifurcació sella-node. A prop d'aquesta transició de fase dinàmica, s'espera que l'aproximació gaussiana sigui incapaç de capturar les estadístiques de les fluctuacions [8]. Així, doncs, per tal de capturar la dinàmica del sistema amb precisió, ens mourem només en el règim de les fluctuacions petites (*i. e.*, Ω gran). Això significa, però, que el nostre model seria capaç de capturar el comportament de sistemes que no exhibissin aquest tipus de bifurcacions en un règim molt més ampli.

Una alternativa al mètode WKB usat en aquest article seria fer servir el desenvolupament de la mida del sistema de Van Kampen [60], també coneguda com *aproximació del soroll lineal* (LNA), que està molt relacionada amb l'aproximació WKB de Kubo *et al.* [30]. Malgrat les similituds entre ambdues metodologies, aquestes no són ben bé equivalents. L'aproximació del soroll lineal (LNA) suposa que la variable aleatòria pot ser escrita com a $X(t) = \phi(t) + \Omega^{1/2}\xi(t)$, on $\phi(t)$ és la solució de les equacions de camp mitjà i $\xi(t)$ és una variable aleatòria que satisfà una equació de Fokker-Planck lineal, d'on poden ser deduïdes equacions diferencials ordinàries (lineals) per al primer i el segon moment de $\xi(t)$. L'aproximació WKB està basada en un Ansatz sobre la forma de la solució de l'EM, la qual cosa significa que, pel que sabem a partir dels nostres resultats, les equacions per a la variància de $X(t)$ no són, en general, les mateixes, tot i que s'obté en ambdós casos la mateixa aproximació de camp mitjà.

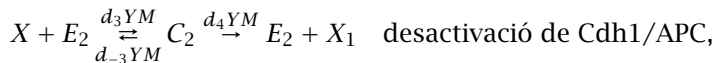
La metodologia presentada en aquest article es pot generalitzar de diverses formes, i es pot aplicar a una àmplia varietat de situacions. Una d'aquestes situacions que seria interessant d'analitzar, en relació amb l'evolució del càncer i la seva teràpia, és la introducció de quiescència induïda per la hipòxia. Les cèl·lules cancerígenes tenen l'habilitat de tornar-se quiescents sota condicions d'hipòxia; vegeu [1, 7]. Per tant, seria interessant introduir aquesta capacitat en el nostre model, especialment, en el context de models de competència entre cèl·lules que no manifesten quiescència induïda per hipòxia (*cèl·lules normals*) i cèl·lules que sí que passen a ser quiescents (*cèl·lules cancerígenes*) [2]; en particular, quan es tracta de predir el resultat de teràpies específiques del cicle cel·lular, on les cèl·lules es maten quan entren en fases determinades del cicle cel·lular [44]. Aquesta anàlisi es posposa per a un treball futur.

Un problema relacionat que seria interessant d'explorar usant la metodologia descrita en aquesta publicació és el problema del metabolisme de les cèl·lules cancerígenes (és a dir, l'efecte Warburg). D'entre els diversos canvis fenotípics induïts per l'efecte Warburg, un dels més remarcables, juntament amb l'increment de la taxa d'acidificació extracel·lular, és la reducció de la taxa de consum d'oxigen (OCR) [13]. Seria interessant d'analitzar l'efecte de considerar tipus de cèl·lules diferents caracteritzades per estats metabòlics diferents, és a dir, taxes de consum d'oxigen diferents i, més especialment, la seva relació amb els efectes de la hipòxia. Aquest tema serà estudiat més profundament en una recerca futura.

Ens proposem també estendre el nostre context estocàstic multiescala per tal d'incloure graus de llibertat en l'espai i l'acoblament a un model d'angiogènesi induïda per tumors. Per tal de fer-ho, necessitem recórrer a mètodes de simulació estocàstica més eficients, com, per exemple, el mètode de la reacció següent [19].

A Apèndix

Aquest apèndix està dedicat a establir la relació entre els paràmetres del nostre model estocàstic, d_1 , d_{-1} , d_2 , d_3 , d_{-3} , d_4 , i els valors dels paràmetres *macroscòpics* donats a [1]. Per tal d'aconseguir-ho, apliquem l'aproximació de l'estat quasi estacionari (QSSA) a l'esquema de reacció següent:



on els paràmetres d_1 , d_{-1} , d_2 , d_3 , d_{-3} , d_4 estan relacionats amb aquells que apareixen a [1] a través de la QSSA proposada per Briggs i Haldane.

Aquestes equacions de camp mitjà per a aquest mecanisme de reacció estan donades per un sistema d'EDO, equació (A.1), per a les taxes de canvi de cada

una de les espècies involucrades:

$$\begin{aligned}
 \frac{dx_1}{da} &= -d_1x_1e_1 + d_{-1}c_1 + d_4ymc_2, \\
 \frac{de_1}{da} &= -d_1x_1e_1 + (d_{-1} + d_2)c_1, \\
 \frac{dc_1}{da} &= d_1x_1e_1 - (d_{-1} + d_2)c_1, \\
 \frac{dx}{da} &= -d_3xyme_2 + d_{-3}ymc_2 + d_2c_1, \\
 \frac{de_2}{da} &= -d_3xyme_2 + (d_{-3} + d_4)ymc_2, \\
 \frac{dc_2}{da} &= d_3xyme_2 - (d_{-3} + d_4)ymc_2, \\
 \frac{dy}{da} &= a_4 - (a_1 + a_2x + a_3z)y,
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

on $x_1 = [X_1]$, $x = [X]$, $c_i = [C_i]$ i $e_i = [E_i]$. A més, hem usat les lleis de conservació: $\frac{de_i}{da} + \frac{dc_i}{da} = 0$, d'on podem concloure que la concentració total de l'enzim és constant: $c_i + e_i = e_0$ ($i = 1, 2$), i $\frac{dx_1}{da} + \frac{dc_1}{da} + \frac{dx}{da} + \frac{dc_2}{da} = 0$, de manera que la concentració total de Cdh1 es conserva: $x_1 + c_1 + x + c_2 = s_0$.

Per tal de continuar, introduïm, fent un canvi d'escala, les variables següents:

$$\bar{x}_1 = \frac{x_1}{s_0}, \quad \bar{x} = \frac{x}{s_0}, \quad \bar{c}_i = \frac{c_i}{e_0}, \quad (i = 1, 2), \quad \tau = d_3e_0y_0a, \quad \epsilon = \frac{e_0}{s_0}, \quad \bar{y} = \frac{y}{y_0},$$

d'acord amb les quals obtenim el sistema següent:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\bar{x}_1}{d\tau} &= -\frac{d_1}{d_3y_0}\bar{x}_1(1 - \bar{c}_1) + \frac{d_{-1}}{d_3y_0s_0}\bar{c}_1 + \frac{d_4}{d_3s_0}\bar{y}m\bar{c}_2, \\
 \epsilon \frac{d\bar{c}_1}{d\tau} &= \frac{d_1}{d_3y_0}\bar{x}_1(1 - \bar{c}_1) - \frac{(d_{-1} + d_2)}{d_3y_0s_0}\bar{c}_1, \\
 \frac{d\bar{x}}{d\tau} &= -\bar{x}\bar{y}m(1 - \bar{c}_2) + \frac{d_{-3}}{d_3s_0}\bar{y}m\bar{c}_2 + \frac{d_2}{d_3y_0s_0}\bar{c}_1, \\
 \epsilon \frac{d\bar{c}_2}{d\tau} &= \bar{x}\bar{y}m(1 - \bar{c}_2) - \frac{(d_{-3} + d_4)}{d_3s_0}\bar{y}m\bar{c}_2.
 \end{aligned}$$

Ara, prenem l'aproximació de l'estat quasi estacionari, $\epsilon \frac{d\bar{c}_i}{d\tau} = 0$ ($i = 1, 2$), que ens porta a:

$$\begin{aligned}\bar{c}_1 &= \frac{d_1 \bar{x}_1}{\frac{d_{-1}+d_2}{s_0} + d_1 \bar{x}_1}, \\ \bar{c}_2 &= \frac{\bar{x}_2}{\bar{x}_2 + \frac{d_{-3}+d_4}{d_3 s_0}}, \\ \frac{d\bar{x}}{d\tau} &= -\frac{\bar{y} m \bar{x} \left(\frac{d_4}{d_3 s_0} \right)}{\bar{x} + \frac{d_{-3}+d_4}{d_3 s_0}} + \frac{d_2}{d_3 \gamma_0 s_0} \frac{d_1 \bar{x}_1}{d_1 \bar{x}_1 + \frac{d_{-1}+d_2}{s_0}}.\end{aligned}\quad (\text{A.2})$$

Un cop arribats a aquest punt, utilitzem la llei de conservació $\frac{d\bar{x}_1}{d\tau} + \epsilon \frac{d\bar{c}_1}{d\tau} + \frac{d\bar{x}}{d\tau} + \epsilon \frac{d\bar{c}_2}{d\tau} = 0$, és a dir, $\bar{x}_1 + \bar{x} = 1$, de manera que l'equació (A.2) pot ser reescrita com:

$$\frac{d\bar{x}}{d\tau} = -\frac{\bar{y} m \bar{x} \left(\frac{d_4}{d_3 s_0} \right)}{\bar{x} + \frac{d_{-3}+d_4}{d_3 s_0}} + \frac{d_2}{d_3 \gamma_0 s_0} \frac{(1 - \bar{x})}{1 - \bar{x} + \frac{d_{-1}+d_2}{d_1 s_0}},$$

la qual cosa dóna lloc a la relació següent entre els paràmetres del nostre model estocàstic i aquells que apareixien a l'aproximació de camp mitjà de la referència [58]: $d_2 = (1 + b_3 u) s_0 / e_0$, $d_4 = b_4 s_0 / (\gamma_0 e_0)$, $d_{-1} = J_3 s_0 d_1 - d_2$, $d_{-3} = J_4 s_0 d_3 - d_4$, on b_i i J_i ($i = 3, 4$) són, respectivament, taxes constants (b_3 i b_4) i les constants de Michaelis-Menten (J_3 i J_4). Aquesta equivalència ens permet donar valors als paràmetres del nostre model estocàstic, de manera que el comportament de camp mitjà és el mateix que en els models d'Alarcón *et al.* a [1] i Tyson i Novak a [58].

Agraïments

Els autors agraeixen al Ministeri de Ciència i Innovació espanyol (MICINN) el seu finançament, sota les beques MTM2011-29342; a la Generalitat de Catalunya, el finançament sota la beca 2009SGR345, i a la Wellcome Trust (098325).

Referències

- [1] ALARCÓN, T.; BYRNE, H. M.; MAINI, P. K. «A mathematical model of the effects of hypoxia on the cell-cycle of normal and cancer cells». *J. Theoret. Biol.*, 229 (3) (2004), 395-411.
- [2] ALARCÓN, T.; BYRNE, H. M.; MAINI, P. K. «A multiple scale model for tumor growth». *Multiscale Model. Simul.*, 3 (2) (2005), 440-475.
- [3] ALARCÓN, T.; PAGE, K. M. «Mathematical models of the VEGF receptor and its role on cancer therapy». *J. R. Soc. Interface*, 4 (13) (2007), 283-304.

- [4] ALBERTS, B.; BRAY, D.; LEWIS, J.; RAFF, M.; ROBERTS, K.; WALSON, J. D. *Molecular biology of the cell*. 3a ed. Nova York: Garland Publishing, 1994.
- [5] ANDERSON, A. R. A.; CHAPLAIN, M. A. J. «Continuous and discrete mathematical models of tumor-induced angiogenesis». *Bull. Math. Biol.*, 60 (5) (1998), 857–899.
- [6] BALL, K.; KURTZ, T. G.; POPOVIC, L.; REMPALA, G. «Asymptotic analysis of multiscale approximations to reaction networks». *Ann. Appl. Probab.*, 16 (4) (2006), 1925–1961.
- [7] BEDESSEM, B.; STÉPHANOU, A. «A mathematical model of HiF-1 α -mediated response to hypoxia on the G1/S transition». *Math. Biosci.*, 248 (2014), 31–39.
- [8] BINNEY, J. J.; DOWRICK, N. J.; FISHER, A. J.; NEWMAN, M. E. J. *The theory of critical phenomena: An introduction to the renormalization group*. Oxford: Oxford University Press, 1992.
- [9] BOX, A. H.; DEMETRICK, D. J. «Cell-cycle kinase inhibitor expression and hypoxia-induced cell-cycle arrest in human cell lines». *Carcinogenesis*, 25 (12) (2004), 2325–2335.
- [10] BREWARD, C. J. W.; BYRNE, H. M.; LEWIS, C. E. «The role of cell-cell interactions in a two-phase model for avascular tumour growth». *J. Math. Biol.*, 45 (2) (2002), 125–152.
- [11] BYRNE, H. M. «Dissecting cancer through mathematics: from the cell to the animal model». *Nature Reviews Cancer*, 10 (3) (2010), 221–230.
- [12] CAO, Y.; GILLESPIE, D. T.; PETZOLD, L. R. «Efficient step size selection for the tau-leaping simulation method». *J. Chem. Phys.*, 124 (2006), 044109.
- [13] CHEN, Y.; CAIRNS, R.; PAPANDREOU, I.; KOONG, A.; DENKO, N. C. «Oxygen consumption can regulate the growth of tumors, a new perspective on the Warburg effect». *PLoS ONE*, 4 (9) (2009), e7033.
- [14] DEISBOECK, T. S.; WANG, Z.; MACKLIN, P.; CRISTINI, V. «Multiscale cancer modeling». *Annual Review of Biomedical Engineering*, 13 (2011), 127–155.
- [15] DURRETT, R. «Cancer modeling: a personal perspective». *Notices Amer. Math. Soc.*, 60 (3) (2013), 304–309.
- [16] FUNK, J. O. «Cancer cell-cycle control». *Anticancer Res.*, 19 (1999), 4778–4780.
- [17] GARDINER, C. *Stochastic methods*. A handbook for the natural and social sciences. 4a ed. Berlin: Springer-Verlag, 2009. (Springer Series in Synergetics)
- [18] GARDNER, L. B.; LI, Q.; PARK, M. S.; FLANAGAN, W. M.; SEMENZA, G. L.; DANG, C. V. «Hypoxia inhibits G₁/S transition through regulation of p27 expression». *J. Biol. Chem.*, 276 (11) (2001), 7919–7926.

- [19] GIBSON, M. A.; BRUCK, J. «Efficient exact stochastic simulation of chemical systems with many species and many channels». *J. Phys. Chem. A*, 104 (9) (2000), 1876–1889.
- [20] GILLESPIE, D. T. «A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions». *J. Computational Phys.*, 22 (4) (1976), 403–434.
- [21] GILLESPIE, D. T. «Approximate accelerated stochastic simulation of chemically reacting systems». *J. Chem. Phys.*, 115 (2001), 1716.
- [22] GILLESPIE, D. T.; PETZOLD, L. R. «Improved leap-size selection for accelerated stochastic simulation». *J. Chem. Phys.*, 119 (2003), 8229.
- [23] GREEN, S. L.; FREIBERG, R. A.; GIACCIA, A. J. «p21^{Cip1} and p27^{Kip1} regulate cell cycle reentry after hypoxic stress but are not necessary for hypoxia-induced arrest». *Mol. Cell. Biol.*, 21 (2001), 1196–1206.
- [24] GRIMMETT, G. R.; STIRZAKER, D. R. *Probability and random processes*. 3a ed. Nova York: Oxford University Press, 2001.
- [25] HAND, P. E.; GRIFFITH, B. E. «Adaptive multiscale model for simulating cardiac conduction». *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 107 (33) (2010), 14603–14608.
- [26] HESTER, S. D.; BELMONTE, J. M.; GENS, J. S.; CLENDENON, S. G.; GLAZIER, J. A. «A multi-cell, multi-scale model of vertebrate segmentation and somite formation». *PLoS Comput. Biol.*, 7 (10) (2011), e1002155.
- [27] JIANG, Y.; PJESIVAC-GRBOVIC, J.; CANTRELL, C.; FREYER, J. P. «A multiscale model for avascular tumor growth». *Biophys. J.*, 89 (6) (2005), 3884–3894.
- [28] KIM, Y.; OTHMER, H. G. «A hybrid model of tumor-stromal interactions in breast cancer». *Bull. Math. Biol.*, 75 (8) (2013), 1304–1350.
- [29] KITANO, H. «Cancer as a robust system: implications for anticancer therapy». *Nature Reviews Cancer*, 4 (2004), 227–235.
- [30] KUBO, R.; MATSUO, K.; KITAHARA, K. «Fluctuation and relaxation of macrovariables». *J. Stat. Phys.*, 9 (1) (1973), 51–96.
- [31] LAND, S.; NIEDERER, S. A.; LOUCH, W. E.; SEJERSTED, O. M.; SMITH, N. P. «Integrating multi-scale data to create a virtual physiological mouse heart». *Interface Focus*, 3 (2013), 20120076.
- [32] LIGNET, F.; CALVEZ, V.; GRENIER, E.; RIBBA, B. «A structural model of the VEGF signalling pathway: emergence of robustness and redundancy properties». *Math. Biosci. Eng.*, 10 (1) (2013), 167–184.
- [33] LOWENGRUB, J. S.; FRIEBOES, H. B.; JIN, F.; CHUANG, Y.-L.; LI, X.; MACKLIN, P.; WISE, S. M.; CRISTINI, V. «Nonlinear modelling of cancer: bridging the gap between cells and tumours». *Nonlinearity*, 23 (1) (2010), R1–R91.
- [34] MACKLIN, P.; MCDUGALL, S.; ANDERSON, A. R. A.; CHAPLAIN, M. A. J.; CRISTINI, V.; LOWENGRUB, J. «Multiscale modelling and nonlinear simulation of vascular tumour growth». *J. Math. Biol.*, 58 (4–5) (2009), 765–798.

- [35] MAIER, R. S.; STEIN, D. L. «A scaling theory of bifurcations in the symmetric weak-noise escape problem». *J. Statist. Phys.*, 83 (3-4) (1996), 291-357.
- [36] MCCULLOCH, A. D. «Systems biology and multi-scale modelling of the heart». A: *Biomedical Science & Engineering Conference, 2009. BSEC 2009. First Annual ORNL*. Piscataway, NJ: IEEE, 2009, 1-3.
- [37] MCDUGALL, S. R.; ANDERSON, A. R. A.; CHAPLAIN, M. A. J. «Mathematical modelling of dynamic adaptive tumour-induced angiogenesis: clinical implications and therapeutic targeting strategies». *J. Theoret. Biol.*, 241 (3) (2006), 564-589.
- [38] MCDUGALL, S. R.; ANDERSON, A. R. A.; CHAPLAIN, M. A. J.; SHERRATT, J. A. «Mathematical modelling of flow through vascular networks: implications for tumour-induced angiogenesis and chemotherapy strategies». *Bull. Math. Biol.*, 64 (4) (2002), 673-702.
- [39] MENENDEZ, J.; JOVENC, J.; CUFÍ, S.; COROMINAS-FAJA, B.; OLIVERAS-FERRAROS, C.; CUYÀS, E.; MARTIN-CASTILLO, B.; LÓPEZ-BONET, E.; ALARCÓN, T.; VAZQUEZ-MARTIN, A. «The Warburg effect version 2.0: metabolic reprogramming of cancer stem cells». *Cell Cycle*, 12 (8) (2013), 1166-1179.
- [40] OATES, A. C.; GORFINKIEL, N.; GONZÁLEZ-GAITÁN, M.; HEISENBERG, C.-P. «Quantitative approaches in developmental biology». *Nature Reviews Genetics*, 10 (200), 517-530.
- [41] OSBORNE, J. M.; WALTER, A.; KERSHAW, S. K.; MIRAMS, G. R.; FLETCHER, A. G.; PATHMANATHAN, P.; GAVAGHAN, D.; JENSEN, O. E.; MAINI, P. K.; BYRNE, H. M. «A hybrid approach to multi-scale modelling of cancer». *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 368 (1930) (2010), 5013-5028.
- [42] OWEN, M. R.; ALARCÓN, T.; MAINI, P. K.; BYRNE, H. M. «Angiogenesis and vascular remodelling in normal and cancerous tissues». *J. Math. Biol.*, 58 (4-5) (2009), 689-721.
- [43] PERFAHL, H.; BYRNE, H. M.; CHEN, T.; ESTRELLA, V.; ALARCÓN, T.; LAPIN, A.; GATENBY, R. A.; GILLIES, R. J.; LLOYD, M. C.; MAINI, P. K.; REUSS, M.; OWEN, M. R. «Multiscale modelling of vascular tumour growth in 3D: the roles of domain size and boundary conditions». *PLoS ONE*, 6 (4) (2011), e14790.
- [44] POWATHIL, G. G.; ADAMSON, D. J. A.; CHAPLAIN, M. A. J. «Towards predicting the response of a solid tumour to chemotherapy and radiotherapy treatments: clinical insights from a computational model». *PLoS Comput. Biol.*, 9 (7) (2013), e1003120.
- [45] PREZIOSI, L.; TOSIN, A. «Multiphase and multiscale trends in cancer modelling». *Math. Model. Nat. Phenom.*, 4 (3) (2009), 1-11.
- [46] REDNER, S. *A guide to first-passage processes*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
- [47] REJNIAK, K. A.; ANDERSON, A. R. A. «Hybrid models of tumor growth». *WIREs Syst. Biol. Med.*, 3 (1) (2011), 115-125.

- [48] RIBBA, B.; COLIN, T.; SCHNELL, S. «A multiscale mathematical model of cancer, and its use in analyzing irradiation therapies». *Theoretical Biology and Medical Modelling*, 3 (2006), 7.
- [49] SCHNELL, S.; MAINI, P. K.; NEWMAN, S. A.; NEWMAN, T. J. (ed.). *Multi-scale Modeling of Developmental Systems*. Oxford: Academic Press, 2008.
- [50] SETTY, Y. «Multi-scale computational modeling of developmental biology». *Bioinformatics*, 28 (15) (2012), 2022–2028.
- [51] SMITH, N. P.; NICKERSON, D. P.; CRAMPIN, E. J.; HUNTER, P. J. «Multiscale computational modelling of the heart». *Acta Numer.*, 13 (2004), 371–431.
- [52] STACEY, D. W. «Cyclin D1 serves as a cell cycle regulatory switch in actively proliferating cells». *Current Opinion in Cell Biology*, 15 (2) (2003), 158–163.
- [53] STÉPHANOU, A.; MCDUGALL, S. R.; ANDERSON, A. R. A.; CHAPLAIN, M. A. J. «Mathematical modelling of flow in 2D and 3D vascular networks: applications to anti-angiogenic and chemotherapeutic drug strategies». *Math. Comput. Modelling*, 41 (10) (2005), 1137–1156.
- [54] STREBHARDT, K.; ULLRICH, A. «Paul Ehrlich's magic bullet concept: 100 years of progress». *Nature Reviews Cancer*, 8 (2008), 473–480.
- [55] SZABO, A.; MERKS, R. M. H. «Cellular Potts modeling of tumor growth, tumor invasion, and tumor evolution». *Front. Oncol.*, 3 (2013), 87.
- [56] TRACQUI, P. «Biophysical models of tumour growth». *Rep. Progr. Phys.*, 72 (2009), 056701.
- [57] TRAVASSO, R. D. M.; CORVERA POIRÉ, E.; CASTRO, M.; RODRÍGUEZ-MANZANEQUE, J. C.; HERNÁNDEZ-MACHADO, A. «Tumor angiogenesis and vascular patterning: a mathematical model». *PLoS ONE*, 6 (5) (2011), e19989.
- [58] TYSON, J. J.; NOVAK, B. «Regulation of the eukaryotic cell cycle: molecular antagonism, hysteresis, and irreversible transitions». *J. Theoret. Biol.*, 210 (2) (2001), 249–263.
- [59] VAN DROGEN, F.; SANGFELT, O.; MALYUKOVA, A.; MATSKOVA, L.; YEH, E.; MEANS, A. R.; REED, S. I. «Ubiquitylation of cyclin E requires the sequential function of SCF complexes containing distinct hCdc4 isoforms». *Molecular Cell*, 23 (1) (2006), 37–48.
- [60] VAN KAMPEN, N. G. *Stochastic processes in Physics and Chemistry*. Amsterdam: Elsevier, 2007.
- [61] VISINTIN, R.; PRINZ, S.; AMON, A. «CDC20 and CDH1: a family of substrate-specific activators of APC-dependent proteolysis». *Science*, 278 (5337) (1997), 460–463.
- [62] WALPOLE, J.; PAPIN, J. A.; PEIRCE, S. M. «Multiscale computational models of complex biological systems». *Annual Review of Biomedical Engineering*, 15 (2013), 137–154.
- [63] ZACHARIAE, W.; NASMYTH, K. «Whose end is destruction: cell division and the anaphase-promoting complex». *Genes Dev.*, 13 (1999), 2039–2058.

PILAR GUERRERO
DEPARTMENT OF MATHEMATICS
UNIVERSITY COLLEGE LONDON
GOWER STREET
LONDON WC1E 6BT, UK

I
CENTRE DE RECERCA MATEMÀTICA
CAMPUS DE BELLATERRA, EDIFICI C
08193 BELLATERRA, BARCELONA, SPAIN
pguerrero@ucl.ac.uk

TOMÁS ALARCÓN
CENTRE DE RECERCA MATEMÀTICA
CAMPUS DE BELLATERRA, EDIFICI C
08193 BELLATERRA, BARCELONA, SPAIN
I
DEPARTAMENT DE MATEMÀTIQUES
UNIVERSITAT ATONÒMA DE BARCELONA
08193 BELLATERRA, BARCELONA, SPAIN
talarcon@crm.cat

Una anàlisi matemàtica del moviment d'una pilota de futbol durant el vol

TIMOTHY G. MYERS I SARAH L. MITCHELL

Resum: En aquest article es presenta un estudi analític i numèric de les equacions tridimensionals que descriuen el moviment d'una pilota que gira a l'aire. L'anàlisi inicial considera coeficients de fregament constants i després s'estén al cas d'un fregament que depèn de la velocitat de rotació de la pilota. S'observa una coincidència excel·lent entre els resultats numèrics, els analítics i els experimentals. La solució analítica ens mostra de manera explícita com el moviment de la pilota depèn de paràmetres com la rugositat, la velocitat i les condicions atmosfèriques. Es demostra la importància d'aplicar models tridimensionals en comptes d'aproximacions bidimensionals.

Paraules clau: aerodinàmica, trajectòria d'una pilota de futbol, pilota de futbol girant, força de Magnus, solució de pertorbació.

Classificació MSC2010: 34L30, 76G25.

1 Introducció

Al llarg dels anys s'ha avançat molt en relació amb el disseny de les pilotes de futbol, des de la tradicional pilota de cuir que envoltava una bufeta de porc inflada a la més recent Jabulani, que es construeix fent servir panells de poliuretà. L'objectiu dels avenços tecnològics en el disseny de les pilotes de futbol ha estat fer la pilota més fiable i millor per al joc, en benefici de tots els jugadors. Recentment, en un grup d'estudi de matemàtiques a la indústria en una reunió celebrada a Johannesburg, l'entrenador d'un equip de primera divisió sud-africà, el Bidvest Wits, va plantejar la pregunta de si una pilota de futbol es pot escollir de manera que beneficiï l'equip local (o, alternativament, desafavoreixi l'equip visitant). Aquest article ha sortit d'aquest estudi i a les conclusions es discuteix la pregunta de si es pot triar una pilota que, efectivament, doni un avantatge a l'equip local.

En els partits de futbol professional a Sud-àfrica, i a molts altres països, l'equip local és el que proporciona la pilota que es farà servir durant el partit. L'elecció de la pilota està limitada, principalment, per la llei 2 de la FIFA, que

Aquest treball fou el guanyador del premi Albert Dou de l'any 2014 i va aparèixer en anglès amb el títol «A mathematical analysis of the motion of an in-flight soccer ball» a *Sports Engineering*, 16 (2013), 29–41. Agraïm a Springer Science+Business Media el permís per a la seva publicació. La traducció al català és deguda a Helena Ribera.

en dicta la mida, el pes (en sec), la pressió i el material. Per aquest motiu els principals canvis en el disseny de la pilota s'han produït en el material i en la forma dels panells [13]. Una altra limitació ve donada pel patrocinador, ja que l'equip ha d'usar una de les seves pilotes. En el cas del Bidvest Wits les pilotes són proporcionades per Nike. Durant la reunió a Johannesburg es van presentar tres pilotes Nike, d'aspecte molt similar, però hi havia una diferència important: dues de les pilotes eren rugoses (amb panells amb clots) mentre que la tercera tenia els panells llisos (vegeu, per exemple, fotos de prop de la Nike T90 Tracer and Catalyst a la web Nike.com).

Per respondre a la pregunta sobre l'elecció de la pilota l'anàlisi que presentem a continuació se centrarà en el seu moviment a través de l'aire i, en particular, des d'una falta o un córner. Un dels motius de triar aquests casos és que són situacions relativament controlades i hi ha molta informació en el moviment de la pilota a través de l'aire. Un altre motiu és que els xuts de falta són un factor important a l'hora de marcar: a la Copa del Món del 1998, 42 dels 171 gols marcats van venir de jugades assajades i un 50% eren xuts de falta [2]. En conseqüència, entendre el moviment de la pilota des d'un xut de falta o d'un córner podria aportar informació important a l'hora d'escollir la pilota. L'últim motiu és que Johannesburg està situada a un nivell sobre el mar molt alt (més o menys a 1800 m). La densitat de l'aire és aproximadament un 20% més baixa que al nivell del mar [10] així que cal esperar que la diferència més gran en el moviment de la pilota entre Johannesburg i ciutats situades a una altitud més baixa sigui quan aquest moviment es produeix a l'aire.

Per descomptat que hi ha hagut molts treballs sobre el moviment de les pilotes i els projectils a l'aire. A partir de 1600 Newton va observar que una pilota de tennis amb efecte tenia una trajectòria corbada. Un segle més tard Robin va mostrar que en una esfera giratòria hi havia una força aerodinàmica transversal: això és el que ara s'anomena *l'efecte Magnus* (o de manera més justa *l'efecte Robin-Magnus*). Cap a finals dels 1800, Tait va ser el primer a aplicar aquest concepte a una pilota relacionada amb l'esport (desafortunadament una pilota de golf en lloc d'una pilota de futbol). Tots aquests treballs eren sobre fluids sense fricció així que per l'explicació correcta de l'efecte Magnus es va haver d'esperar fins a la teoria de la capa límit de Prandtl el 1904. L'anàlisi específica del moviment d'una pilota de futbol durant el vol va arribar molt més tard. Asai *et al.* [1] van dur a terme un estudi experimental dels coeficients de sustentació en una pilota de futbol amb efecte i sense efecte i van mostrar una forta dependència del coeficient de sustentació respecte de la velocitat de rotació. Les equacions de moviment d'una pilota de futbol es poden trobar en molts treballs però en el nostre estudi farem servir la convenció de Goff i Carré [7] en la qual l'efecte Magnus es divideix en una component d'ascensió i en una component lateral (Asai *et al.* també utilitzen dues components). Hörzer *et al.* [10] proporcionen detalls útils de les diferències en les condicions atmosfèriques entre diverses seus de la Copa del Món a Sud-àfrica i demostren l'efecte de l'altitud en la trajectòria. Oggiano i Sætran [11] comparen la trajectòria de pilotes de futbol diferents: això confirma la creença que l'elecció de la pilota pot constituir un avantatge per a l'equip de casa.

Aquest article s'organitza de la manera següent. A la secció 2 es dóna el model matemàtic tridimensional, que és ben conegut i que es basa essencialment en la segona llei de Newton. A causa de la no-linealitat de les equacions del moviment totes les solucions publicades amb anterioritat s'han obtingut numèricament. En una anàlisi d'un model més simple que el considerat en l'estudi present, Bray i Kerwin [2] afirmen que les equacions que regeixen el moviment no tenen solució en forma tancada, i encara que això és tècnicament correcte, a la secció 3 es dedueix una solució aproximada exacta. D'aquesta manera es mostra clarament l'efecte dels paràmetres del model en el moviment de la pilota, la qual cosa no és possible amb una solució numèrica. A la secció 4 es calculen solucions numèriques per verificar l'exactitud de la solució aproximada. Estudis experimentals sobre coeficients de fregament i d'elevació han demostrat la seva dependència de la rotació, però els estudis teòrics generalment deixen aquests coeficients com a constants. A la secció 5 s'estén l'anàlisi feta per tal de tractar el cas de coeficients variables. Finalment, es discuteix la qüestió de si l'elecció de la pilota realment pot donar un avantatge a l'equip de casa.

2 Model matemàtic

El moviment d'una pilota de futbol està descrit per la segona llei de Newton, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}}$, on la força $\mathbf{F}$ es compon de la gravetat i del fregament amb l'aire. Per a una pilota que no gira, el fregament només actua en el sentit oposat al moviment de la pilota. Per a una pilota que gira el fregament té dues components, la resistència en contra del moviment endavant i la força de Magnus. La força de Magnus actua en la direcció perpendicular a la direcció del moviment i a l'eix de rotació. Aquesta força es pot separar en dues components que denoten moviment d'elevació i moviment lateral; vegeu [1, 7]. Si la pilota es mou en la direcció definida per la velocitat del vector $\hat{\mathbf{v}}$ (on el barret indica el vector unitat), aleshores es pot definir un segon vector $\hat{\mathbf{l}}$, que és perpendicular a $\hat{\mathbf{v}}$ però que roman en el mateix pla que $\hat{\mathbf{v}}$ i el vector gravetat, $\hat{\mathbf{g}}$. Notem que la component z de $\hat{\mathbf{l}}$ és positiva (*i. e.* apunta amunt). Un sistema orientat positivament es defineix a través d'un tercer vector $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$. El sistema de coordenades i els vectors es mostren a la figura 1. D'aquesta manera, la força de fregament que s'oposa al moviment, $\mathbf{F}_d$, actua en la direcció $-\hat{\mathbf{v}}$, l'aixecament $\mathbf{F}_l$ actua en la direcció $\hat{\mathbf{l}}$ i la força lateral $\mathbf{F}_s$ actua en la direcció $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$. La força total es defineix com

$$\mathbf{F} = m\mathbf{g} + \mathbf{F}_d + \mathbf{F}_l + \mathbf{F}_s. \quad (1)$$

Per tal de separar les components del gir s'han de definir dues velocitats de rotació: ω_l és la velocitat al voltant de l'eix $\hat{\mathbf{l}}$ i ω_s és la velocitat al voltant de l'eix $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$. Si només s'utilitza un eix de rotació (per exemple com es defineix a [10]), el qual està contingut en el pla $\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$, llavors l'eix fa un angle Ω amb l'eix $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$, on $\tan \Omega = \omega_l / \omega_s$. Noteu que el problema plantejat aquí és més general que l'estudiat a [2], on l'eix de rotació està contingut solament en el pla x - z .

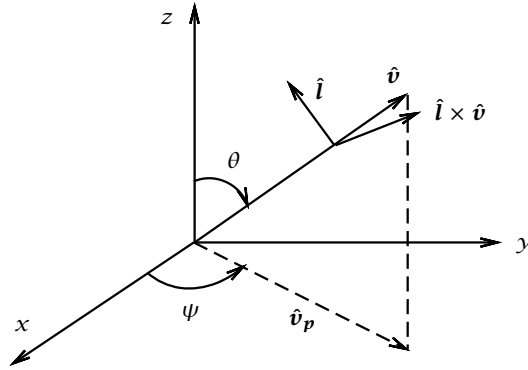


FIGURA 1: Sistema de coordenades.

Els signes de les forces depenen de quina convenció s'utilitzi. La força de fregament F_d és obvi que actua en direcció oposada al moviment de la pilota. Si es considera un gir lateral pur, aleshores l'eix z és l'eix de rotació. Utilitzant notació estàndard per a coordenades polars, com es mostra en la figura 1, amb ψ contingut en el pla x - y i mesurat des de l'eix x , i definint $\dot{\psi} = \omega_s$, aleshores la força resultant F_s actua en la direcció negativa de x . Si només hi ha rotació endavant, llavors l'eix de rotació és x i aleshores $\dot{\theta} = \omega_l$ i la força resultant F_l actua en la direcció negativa de z . Per tant, són certes les relacions següents:

$$\mathbf{F}_d = -\frac{1}{2}\rho A|\mathbf{v}|^2 C_d \hat{\mathbf{v}}, \quad \mathbf{F}_l = -\frac{1}{2}\rho A|\mathbf{v}|^2 C_l \hat{\mathbf{l}}, \quad \mathbf{F}_s = \frac{1}{2}\rho A|\mathbf{v}|^2 C_s \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}. \quad (2)$$

Aquí m és la massa de la pilota, A és la seva àrea transversal, ρ és la densitat de l'aire, C_i són els coeficients de fregament i

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)}, \quad (3)$$

on $\mathbf{v} = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ és el vector velocitat. El producte $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}}$ actua en la direcció negativa de x , de manera que no hi ha signe negatiu en l'expressió de $\mathbf{F}_s$. Els coeficients de fregament C_i varien amb $Re = \rho|\mathbf{v}|D/\mu$ (on D és el diàmetre de la pilota i μ la viscositat de l'aire) i el paràmetre de rotació $Sp = D\omega/(2|\mathbf{v}|)$ [1, 5]. La variació de C_d respecte de Re mostra un canvi radical quan la pilota es mou a través de la transició laminar-turbulenta. Els resultats experimentals de la posttransició de [1] indiquen que C_d i C_l varien amb Sp però tenen poca variació respecte de Re ; vegeu també [7]. Noteu que, com que C_l i C_s apareixen a causa del mateix efecte, tenen el mateix comportament. Com que la força de Magnus es descompon en dues components hi ha dues velocitats angulars, ω_l i ω_s . Aleshores la variació de C_l i C_s respecte de Sp significa que prenen diferents valors si $\omega_l \neq \omega_s$. L'avantatge d'utilitzar dos coeficients de fregament és que els diferents eixos de rotació es poden diferenciar fàcilment. En particular, per al gir lateral pur és $\omega_l = C_l = 0$ i per al gir endavant pur és $\omega_s = C_s = 0$ (la relació entre ω i C es discutirà amb més detall més endavant).

Els vectors unitat es poden definir en termes dels dos angles ψ , θ amb les relacions següents:

$$\hat{\mathbf{v}} = \sin \theta \cos \psi \mathbf{i} + \sin \theta \sin \psi \mathbf{j} + \cos \theta \mathbf{k}, \quad (4)$$

$$\hat{\mathbf{l}} = -\cos \theta \cos \psi \mathbf{i} - \cos \theta \sin \psi \mathbf{j} + \sin \theta \mathbf{k}, \quad (5)$$

$$\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{v}} = -\sin \psi \mathbf{i} + \cos \psi \mathbf{j}. \quad (6)$$

De manera alternativa els angles en termes de les components de la velocitat cartesiana es poden expressar com a

$$\sin \theta = \frac{|\mathbf{v}_p|}{|\mathbf{v}|}, \quad \cos \theta = \frac{\dot{z}}{|\mathbf{v}|}, \quad \sin \psi = \frac{\dot{y}}{|\mathbf{v}_p|}, \quad \cos \psi = \frac{\dot{x}}{|\mathbf{v}_p|}, \quad (7)$$

on $\mathbf{v}_p = (\dot{x}, \dot{y})$ és la projecció de $\mathbf{v}$ sobre el pla x - y (vegeu figura 1).

L'equació del moviment es pot escriure ara en termes de les components

$$\ddot{x} = -k_d |\mathbf{v}| \dot{x} + k_l \frac{|\mathbf{v}|}{|\mathbf{v}_p|} \dot{x} \dot{z} + k_s \frac{|\mathbf{v}|^2}{|\mathbf{v}_p|} \dot{y}, \quad (8)$$

$$\ddot{y} = -k_d |\mathbf{v}| \dot{y} + k_l \frac{|\mathbf{v}|}{|\mathbf{v}_p|} \dot{y} \dot{z} - k_s \frac{|\mathbf{v}|^2}{|\mathbf{v}_p|} \dot{x}, \quad (9)$$

$$\ddot{z} = -g - k_d |\mathbf{v}| \dot{z} - k_l |\mathbf{v}| |\mathbf{v}_p|. \quad (10)$$

Els coeficients escalats del fregament són $k_i = \rho A C_i / (2m)$. Es tracta d'un conjunt d'equacions diferencials ordinàries no lineals de segon ordre sense solució analítica. Es poden resoldre fàcilment de forma numèrica i es pot fer algun avenç analític després de fer algunes suposicions raonables en relació amb el moviment de la pilota:

1. Els eixos es poden triar de manera que hom xuta la pilota principalment en una direcció (tot i que pel viratge òbviament es desviarà). Per tant, suposarem que la pilota és impulsada principalment en la direcció y .
2. El viratge dominant és en la direcció lateral, és a dir, la pilota es xuta sobretot amb efecte lateral.

La primera suposició es tradueix en el fet que la velocitat en la direcció y ha de ser significativament més gran que la velocitat en les direccions x i z , $\dot{y} \gg \dot{x}, \dot{z}$ i també que la pilota arriba més lluny en la direcció y . La segona hipòtesi és certa en general en el moviment d'una pilota de futbol, ja que normalment l'efecte lateral és més gran que l'efecte endavant; en canvi en una pilota de golf hom esperaria el contrari. L'anàlisi es pot adaptar fàcilment a l'efecte endavant però com que aquí ens centrem en pilotes de futbol, l'efecte dominant que suposarem és el lateral.

3 Solució de pertorbació

Per tal de progressar analíticament adimensionarem el sistema fent el canvi de variables

$$X = \frac{x}{L_1}, \quad Y = \frac{y}{L_2}, \quad Z = \frac{z}{L_3}, \quad T = \frac{t}{\tau}, \quad (11)$$

on L_2 és la distància en la direcció y a la porteria, $\tau = L_2/v$ és l'escala del temps que la pilota tarda a arribar a l'objectiu on v és la velocitat inicial de la pilota en la direcció y i $L_3 = g\tau^2$ és l'escala de distància vertical. Les lletres majúscules X, Y, T denoten les variables no dimensionals. L'escala de distància L_1 és, de moment, desconeguda però observem que a causa de la suposició 1, $L_1 \ll L_2$.

En primer lloc, considerem els vectors velocitat i els escrivim en termes de les quantitats adimensionals

$$|\mathbf{v}| = \frac{L_2}{\tau} \dot{Y} \sqrt{1 + \frac{L_1^2}{L_2^2} \frac{\dot{X}^2}{\dot{Y}^2} + \frac{L_3^2}{L_2^2} \frac{\dot{Z}^2}{\dot{Y}^2}} = \frac{L_2}{\tau} \dot{Y} r_1, \quad |\mathbf{v}_p| = \frac{L_2}{\tau} \dot{Y} \sqrt{1 + \frac{L_1^2}{L_2^2} \frac{\dot{X}^2}{\dot{Y}^2}} = \frac{L_2}{\tau} \dot{Y} r_2, \quad (12)$$

on r_1, r_2 denoten les arrels quadrades. Hem aïllat el factor $L_2 \dot{Y}/\tau$ ja que és el terme més gran en l'expressió de la velocitat i aleshores $r_1, r_2 = \mathcal{O}(1)$ (és a dir, la seva magnitud és de l'ordre de la unitat).

k_d	0.013		k_l	0.004	
k_s	0.0108		m	0.45	kg
ρ	1	kg m ⁻³	D	0.22	m
A	0.039	m ²	v	25	m/s
C_d	0.3		C_s	0.25	
C_l	0.1		L_2	20	m

TAULA 1: Valors típics dels paràmetres; vegeu [1, 4, 12].

Ara podem escriure les equacions que regeixen el moviment com a

$$\ddot{X} = -k_d L_2 \dot{X} \dot{Y} r_1 + k_l L_3 \frac{r_1}{r_2} \dot{X} \dot{Z} + k_s \frac{L_2^2 r_1^2}{L_1 r_2} \dot{Y}^2, \quad (13)$$

$$\ddot{Y} = -k_d L_2 \dot{Y}^2 r_1 + k_l L_3 \frac{r_1}{r_2} \dot{Y} \dot{Z} - k_s \frac{L_1 r_1^2}{r_2} \dot{X} \dot{Y}, \quad (14)$$

$$\ddot{Z} = -1 - k_d L_2 r_1 \dot{Y} \dot{Z} - k_l \frac{L_2^2}{L_3} r_1 r_2 \dot{Y}^2. \quad (15)$$

Per determinar L_1 observem que el moviment en la direcció x és produït ja sigui per una velocitat inicial ja sigui per la component de rotació en la direcció y . Com que l'estudi se centra en el viratge causat pel gir, la velocitat inicial en

la direcció x és zero, $\dot{x}(0) = \ddot{x}(0) = 0$. El terme dominant a l'equació (13) és el terme que porta $\dot{Y}^2$ ja que els vectors velocitat estan escalats de manera que $r_1, r_2 = \mathcal{O}(1)$, $L_1 = k_s L_2^2$. Utilitzant els valors dels paràmetres de la taula 1 resulta que $L_1 \approx 4$ m, és a dir, hom espera que la pilota viatgi de l'ordre de 4 m lateralment durant el seu vol. El terme dominant en l'equació (14) és també el que porta $\dot{Y}^2$. Tenim $k_d = 0.013$, $k_d L_2 = 0.26$ i això ho expressem amb $\varepsilon = k_d L_2$, que és un paràmetre petit (i $\varepsilon^2 \approx 0.07$). Els termes que porten l'arrel quadrada r_1, r_2 contenen les ràtios $L_1^2/L_2^2 \approx 0.04$, $L_3^2/L_2^2 \approx 0.25$, que denotem per $c_1 \varepsilon^2$ i $c_2 \varepsilon$, respectivament (noteu que $k_s L_1 = L_1^2/L_2^2$). Finalment, $k_l L_3 \approx 0.03 = c_3 \varepsilon^2$ i $k_l L_2^2/L_3 \approx 0.27 = c_4 \varepsilon$.

Ara les equacions són

$$\ddot{X} = -\dot{Y} r_1 \left[\varepsilon \dot{X} - c_3 \varepsilon^2 \frac{\dot{X} \dot{Z}}{r_2 \dot{Y}} - \frac{r_1}{r_2} \dot{Y} \right], \quad (16)$$

$$\ddot{Y} = -\dot{Y} r_1 \left[\varepsilon \dot{Y} - c_3 \varepsilon^2 \frac{\dot{Z}}{r_2} + c_1 \varepsilon^2 \frac{r_1}{r_2} \dot{X} \right], \quad (17)$$

$$\ddot{Z} = -1 - \dot{Y} r_1 [\varepsilon \dot{Z} + c_4 \varepsilon r_2 \dot{Y}], \quad (18)$$

on

$$r_1 = \sqrt{1 + c_1 \varepsilon^2 \frac{\dot{X}^2}{\dot{Y}^2} + c_2 \varepsilon \frac{\dot{Z}^2}{\dot{Y}^2}}, \quad r_2 = \sqrt{1 + c_1 \varepsilon^2 \frac{\dot{X}^2}{\dot{Y}^2}}. \quad (19)$$

Notem que la hipòtesi que hom xuta la pilota sobretot amb efecte lateral vol dir que els termes k_l apareixen a les equacions de $\ddot{X}, \ddot{Y}$ amb un ordre més baix que els termes k_s (a través del coeficient c_3). En l'equació de $\ddot{Z}$ l'enlairament és la força dominant després de la gravetat, per tant hi apareix amb un ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Quan la rotació endavant domina, l'escalat s'ha de canviar de manera convenient.

Un cop escrites les equacions en forma adimensional podem fer algunes observacions sobre el comportament de la solució, sense resoldre el sistema. Per exemple, tots els termes de (17) tenen el paràmetre petit ε , que indica que el moviment dominant en la direcció Y està descrit per l'equació $\ddot{Y} = 0$ i que el fregament, representat per ε , té un efecte relativament petit. Com que $\varepsilon = 0.26$, obviar els termes amb ε podria portar a un error del voltant del 26%. El moviment en la direcció Z està dominat per la gravetat. El moviment en la direcció X està dominat per la contribució de $\dot{Y}$ (reflectint el fet que la força de Magnus és deguda a la diferència entre la velocitat equatorial i la velocitat endavant, que és aproximadament $\dot{Y}$). Tot i això, el més interessant és que, com que r_1 conté el terme $\varepsilon(\dot{Z}/\dot{Y})^2$, la velocitat en la direcció Z contribueix a totes les equacions. És més, afecta l'equació de X en un ordre ε , *i. e.* per als paràmetres que usem ara, no tenir en compte el moviment en la direcció Z pot portar a errors del voltant del 26%. Òbviament això pot tenir conseqüències significatives per a qualsevol experiment on s'utilitzi una anàlisi dos dimensional per modelar el moviment tridimensional de la pilota. Aquest fet es discuteix amb més detall a la secció 4, de resultats.

Les condicions inicials són que el moviment de la pilota comença a l'origen i surt amb una velocitat (dimensional) $(0, v, w)$. Noteu que la velocitat en la direcció x sempre es pot suposar nul·la, simplement definint l'eix y com la direcció del xut en el pla x - y . En forma adimensional aquestes condicions són $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$, $\dot{X}(0) = 0$, $\dot{Y}(0) = 1$, $\dot{Z}(0) = W$, on $W = w\tau/L_3$.

Per tal de determinar una solució de pertorbació estàndard basada en el paràmetre petit ε escrivim

$$X=X_0+\varepsilon X_1+\varepsilon^2 X_2+\cdots, \quad Y=Y_0+\varepsilon Y_1+\varepsilon^2 Y_2+\cdots, \quad Z=Z_0+\varepsilon Z_1+\varepsilon^2 Z_2+\cdots \quad (20)$$

La solució fins a l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ és

$$\begin{aligned} X = & \frac{T^2}{2} + \varepsilon \left[\frac{c_2 W^2 T^2}{2} - (3 + 2c_2 W) \frac{T^3}{6} + \frac{c_2 T^4}{12} \right] + \\ & + \varepsilon^2 \left[\left(-\frac{9}{2} c_2 W^2 + 3c_3 W - 2c_2 c_4 W \right) \frac{T^3}{6} + \right. \\ & \left. + \left(6c_2 W + \frac{11}{2} - 2c_3 - \frac{c_1}{2} + 2c_2 c_4 \right) \frac{T^4}{12} - \frac{13c_2 T^5}{120} \right], \end{aligned} \quad (21)$$

$$Y = T - \varepsilon \frac{T^2}{2} + \varepsilon^2 \left[-(c_2 W^2 - 2c_3 W) \frac{T^2}{4} + (2 - c_1 + c_2 W - c_3) \frac{T^3}{6} - \frac{c_2 T^4}{24} \right], \quad (22)$$

$$\begin{aligned} Z = & WT - \frac{T^2}{2} + \varepsilon \left[-(W + c_4) \frac{T^2}{2} + \frac{T^3}{6} \right] + \\ & + \varepsilon^2 \left[-c_2 W^2 (W + c_4) \frac{T^2}{4} + (4W + 6c_4 + 3c_2 W^2 + 2c_2 c_4 W) \frac{T^3}{12} - \right. \\ & \left. - (3 + 3c_2 W + c_2 c_4) \frac{T^4}{24} + \frac{c_2 T^5}{40} \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Bray i Kerwin [3] estudien un sistema simplificat dos dimensional. L'anàlisi que fan es basa a igualar l'acceleració al terme més gran dels membres de la dreta de les equacions. A partir de les equacions (16) i (17) això redueix el problema a

$$\ddot{X} = \dot{Y}^2, \quad \ddot{Y} = -\varepsilon \dot{Y}^2, \quad (24)$$

on cal remarcar que $r_1 \approx r_2 \approx 1$. Aplicant les condicions inicials resulta

$$Y = \frac{1}{\varepsilon} \ln |1 + \varepsilon T|, \quad X = -\frac{1}{\varepsilon} (Y - T). \quad (25)$$

Per relacionar aquestes solucions amb les de les equacions (21) i (22) utilitzem el desenvolupament de Taylor per a $\varepsilon \ll 1$ i trobem

$$X = \frac{T^2}{2} - \varepsilon \frac{T^3}{3} + \varepsilon^2 \frac{T^4}{4}, \quad (26)$$

$$Y = T - \varepsilon \frac{T^2}{2} + \varepsilon^2 \frac{T^3}{3}. \quad (27)$$

Si fixem $W = c_i = 0$ a (21) i (22), per tal d'eliminar la dependència en Z i fer que la solució sigui bidimensional, llavors les solucions de x difereixen en l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$, mentre que les solucions de y difereixen en l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. La simplificació de tenir en compte només els termes més grans dels membres de la dreta de les equacions permet posar de manifest correctament el comportament dominant, però en el cas del viratge lateral pot portar a errors en tots els termes posteriors. Per tant, aquesta forma de solució donarà una aproximació raonable en el resultat numèric per a y però una de molt més pobre per a x i l'error augmenta amb ε (per exemple, si incrementem el valor de L_2). Encara ens desviem més de la solució correcta pel fet de no tenir en compte el terme del moviment en Z . Discutirem això més endavant en el context de les solucions mostrades a la secció 4.

Tornem ara a les variables dimensionals $X = x/L_1$, $Y = y/L_2$, $Z = z/L_3$, $T = t/\tau$, on $L_1 = k_s L_2^2$, $L_3 = g\tau^2$, $\tau = L_2/v$ i L_2 , v són la distància i la velocitat inicials en la direcció y . Les constants s'han d'expressar en termes dels paràmetres dimensionals

$$\varepsilon = k_d L_2, \quad c_1 = \frac{k_s^2}{k_d^2}, \quad c_2 = \frac{g^2 L_2}{k_d v^4}, \quad c_3 = \frac{k_l g}{v k_d^2 L_2}, \quad c_4 = \frac{k_l v^2}{g k_d L_2}, \quad W = \frac{w v}{g L_2}. \quad (28)$$

La solució dimensional és

$$x = \frac{k_s (vt)^2}{2} \left[1 - \left\{ k_d vt - \frac{g^2 t^2 - 4gwt + 6w^2}{6v^2} \right\} \right], \quad (29)$$

$$y = vt \left[1 - \left\{ \frac{k_d vt}{2} \right\} \right], \quad (30)$$

$$z = wt - \frac{gt^2}{2} + \left\{ \frac{k_d g vt^3}{6} - (k_d w + k_l v) \frac{vt^2}{2} \right\}. \quad (31)$$

Noteu que, atès que les expressions són més aviat complicades, només les escrivim fins a l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$ (els termes $\mathcal{O}(\varepsilon)$ estan entre claus). En aquestes expressions podem veure clarament l'efecte que té cada paràmetre. L'equació per a y ens mostra que la distància recorreguda és aproximadament proporcional a la velocitat inicial i al temps, però que el fregament la redueix i que l'acció del fregament augmenta amb el temps. En la direcció z la distància recorreguda ve determinada principalment per la velocitat inicial i la gravetat, però l'acció tant del fregament com de l'aixecament tendeixen a canviar-ho. Altre cop, aquestes conseqüències augmenten amb el temps. De totes maneres, com que el viratge degut a l'efecte lateral és l'objecte principal d'aquest estudi, l'equació per a x és la més rellevant. En aquesta equació veiem que, fins a l'ordre principal, la distància recorreguda en la direcció x és proporcional al coeficient de fregament lateral k_s i també a $(vt)^2$. El disseny de la pilota i les condicions atmosfèriques contribueixen a través de k_s i, per tant, el disseny de la pilota és molt important pel que fa al viratge. El producte vt és la primera aproximació

a la distància recorreguda en la direcció y . La dependència quadràtica indica la importància de xutar lluny de la porteria. Com més viatgi la pilota, més virarà (això és ben conegut entre els especialistes de xuts lliures que sempre intenten moure la pilota lluny de la porteria). Potser l'exemple més famós és la falta llençada per Roberto Carlos contra França el 1997, que va produir una corba espectacular al final del vol de la pilota. Aquest xut es va fer aproximadament a 35 m de la porteria; vegeu-lo a YouTube o [6]. El fregament frontal k_d intervé al primer ordre i actua reduint el viratge. Una característica important de la solució és que el moviment vertical, a través de g i de w , també intervé al primer ordre. La forma quadràtica $g^2 t^2 - 4gwt + 6w^2$ és positiva sempre que $w \geq 0$ (i.e. la pilota no es xuta contra terra) i també actua per a incrementar el viratge. Una anàlisi bidimensional no podrà captar aquest efecte i la comparació amb les dades experimentals portarà a una sobrepredicció de k_s .

A causa de les diferències pel que fa a la dependència respecte del temps dels termes de les equacions (29)–(31), aquests termes seran menys precisos a mesura que el temps augmenti. Aquest fenomen és l'anomenat *efecte secular*. El col·lapse es produirà quan els termes d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$ passin a ser d'ordre $\mathcal{O}(1)$. En el cas de l'equació per a x això passa quan $t \sim 1/(k_d v) \approx 3$ s. Les equacions per a y i z indiquen temps d'uns 9 s. Ja que el vol d'una pilota de futbol és típicament d'un segon, aquestes aproximacions serveixen per a xuts raonables i no cal considerar l'efecte secular.

4 Resultats numèrics i analítics

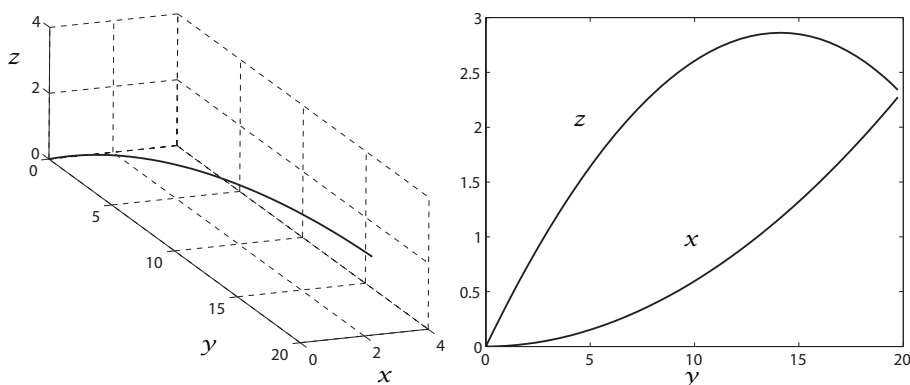


FIGURA 2: (a) a l'esquerra, solució numèrica que mostra una trajectòria dimensional d'una pilota de futbol que ha estat xutada a l'angle de la porteria; (b) a la dreta, representacions de x i z en funció de y .

La solució numèrica de les equacions (16)–(18) s'ha calculat utilitzant la rutina ODE45 de MATLAB. A la figura 2(a) es mostra una trajectòria tridimensional d'una pilota xutada amb condicions inicials $v = 25$ m/s, $w = 8.76$ m/s, i a una

distància de $L_2 = 20$ m de l'objectiu. L'elecció de w es va fer de manera que la pilota acabés a prop del travesser de la porteria (com que seguim el centre de massa de la pilota, l'alçada de la porteria es pren de 2.34 m, és a dir, l'alçada estàndard d'una porteria menys el radi de la pilota). Els altres paràmetres es poden trobar a la taula 1. Per recórrer 20 m en la direcció y es tarden 0.9112 s (sense fregament, $t = 20/25 = 0.8$ s). La figura 2(b) mostra la variació de x i z en funció de y . De la corba de x es pot deduir que la pilota viatja uns 2.3 m, amb una variació aproximadament quadràtica. En la direcció z l'altura de la pilota augmenta fins que és a prop de la porteria, i aconsegueix un màxim de 0.4 m per sobre de la porteria. Per mostrar la trajectòria d'una manera clara, la figura 2 utilitza quantitats dimensionals. Quan sigui possible, en les figures següents, preferirem utilitzar quantitats adimensionals ja que fan més clares les diferències en el moviment. També permeten combinar resultats, com a la figura 2, on les solucions de x i de y estan dibuixades a la mateixa gràfica.

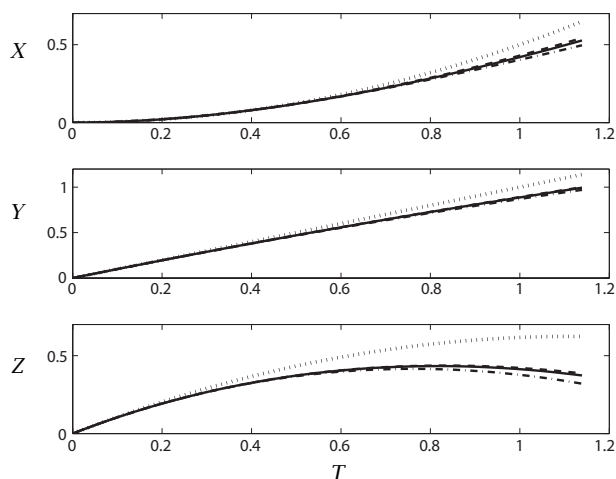


FIGURA 3: Trajectòries adimensionals de X , Y i Z en funció de T : solució numèrica completa (línia contínua), solució $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ (línia de punts), solució $\mathcal{O}(\epsilon)$ (línia de punts i ratlles) i solució $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ (línia discontinua). Els valors dels paràmetres són $C_d = 0.3$, $C_s = 0.25$ i $C_l = 0.1$.

A la figura 3 mostrem la variació de X , Y i Z en funció de T , per a les mateixes condicions que a la figura 2, però en aquest cas s'inclouen les diverses solucions de pertorbació. En unitats adimensionals el temps de vol és $T = 0.9112 \times 25/20 \approx 1.14$. La línia contínua correspon a la solució numèrica, la línia de punts correspon a la pertorbació d'ordre principal, la línia de punts i ratlles correspon al primer ordre i la línia discontinua correspon al segon ordre. En cada cas l'ordre principal dóna una aproximació raonable per a temps petits però perd exactitud ràpidament. Per descriure el vol sencer, la solució de pertorbació per a Y és prou exacta fins al primer ordre, però per a les solucions de X i Z és menys exacta. Totes les corbes mostren una coincidència excel·lent a l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$. Com que la solució de segon ordre implica obviar

termes d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3) \approx 0.02$, es poden produir errors de l'ordre del 2%. De fet, l'error augmenta amb el temps i és clar que val zero per a $T = 0$ a causa de la imposició de la condició inicial. En la direcció X el màxim error entre la solució numèrica i la de segon ordre és de quasi el 3% i això passa al final del vol. Aquest fet està d'acord amb la discussió prèvia segons la qual les solucions aproximades comencen a col·lapsar-se a mesura que el temps avança. Noteu que la mateixa conclusió serveix per al problema dimensional.

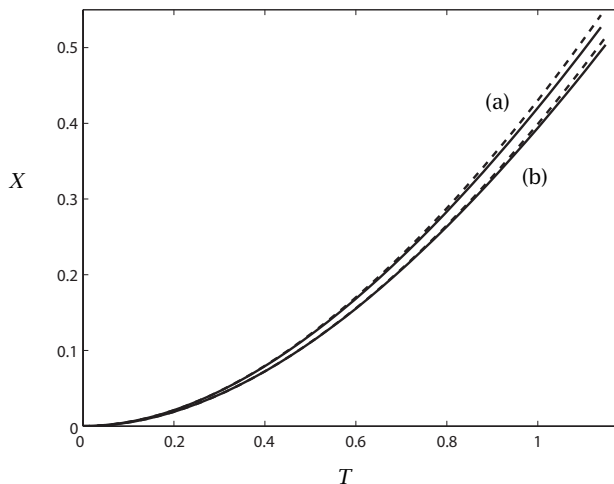


FIGURA 4: Comparació de la solució numèrica (línia contínua) i la solució de pertorbació de segon ordre (línia discontinua) per a X : (a) amb moviment vertical; (b) negligint el moviment vertical.

A la secció anterior s'ha discutit el problema aparent de negligir el moviment vertical i, en particular, s'ha vist que aquest problema seria més evident en el moviment en la direcció X . Recuperem ara un model bidimensional, amb moviment només en el pla X - Y , a través de la solució obtinguda posant $c_2 = c_3 = W = 0$ a les equacions (21) i (22). A la figura 4 es compara la solució numèrica (línia contínua) i la solució de pertorbació (línia discontinua) per a X fins al segon ordre. Les dues corbes etiquetades amb (a) inclouen el moviment en la direcció Z i les etiquetades amb (b) ignoren aquest moviment en Z . Si obviem el moviment en Z el viratge decreix entorn d'un 4.5%. Aquest error s'incrementa de manera no lineal a mesura que w augmenta: si doblem w l'error augmenta en un 30%. Aquesta observació té conseqüències òbvies en la interpretació dels estudis experimentals. Per exemple, si comparem el model dos-dimensional de [3] amb els experiments realitzats i l'utilitzem per calcular coeficients de fregament, aleshores per compensar el fet de negligir el moviment en la direcció Z el model predirà valors més grans que els reals. A [2] se simplifica el model matemàtic suposant que l'eix de rotació roman en el pla X - Z i per tant el terme $\dot{Z}$ de l'equació (16) es pot negligir, tot i que es manté en l'equació de Y . Aquesta aproximació sembla inconsistent i també afectarà la predicció dels coeficients de fregament. És important aleshores implementar un model completament tridimensional quan vulguem calcular paràmetres experimentals.

Un estudi bidimensional és possible però, atès que no podem evitar la gravetat, aquest hauria d'estar confinat en el pla $Y-Z$ i utilitzar només el gir endavant.

4.1 Comparació amb dades experimentals

A l'article de Carré *et al.* [4] es presenten un seguit de resultats per al moviment d'una pilota amb efecte o sense efecte. Les figures 4a, 4b i 4c de [4] mostren una trajectòria típica per a una pilota xutada sense efecte *amb un angle inicial d'uns 15° respecte de terra* i amb una velocitat de xut en el ventall de 17-31 m/s. Extreure informació d'aquestes figures és un problema senzill d'ajust de corbes (en aquest cas es va utilitzar la funció polyfit del MATLAB, que ajusta les dades fent servir el criteri dels mínims quadrats). Un ajust quadràtic a les dades $y(t)$ de les trajectòries de la figura 4b de [4] dóna

$$y \approx a_0 + a_1 t + a_2 t^2, \quad (32)$$

amb $a_0 = -0.1785$, $a_1 = 17.591$, $a_2 = -1.237$. Un ajust cúbic a les dades $z(t)$ de la figura 4c de [4] dóna

$$z \approx b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3, \quad (33)$$

amb $b_0 = 0.0253$, $b_1 = 6.287$, $b_2 = -6.294$, $b_3 = 0.201$. Els punts de dades es mostren a la figura 5 amb asteriscs. Finalment, la figura 4a de [4] indica que $z(y)$ és de la forma

$$z \approx c_0 + c_1 y + c_2 y^2 + c_3 y^3, \quad (34)$$

amb $c_0 = 0.008$, $c_1 = 0.371$, $c_2 = -0.023$, $c_3 = 0.0001$.

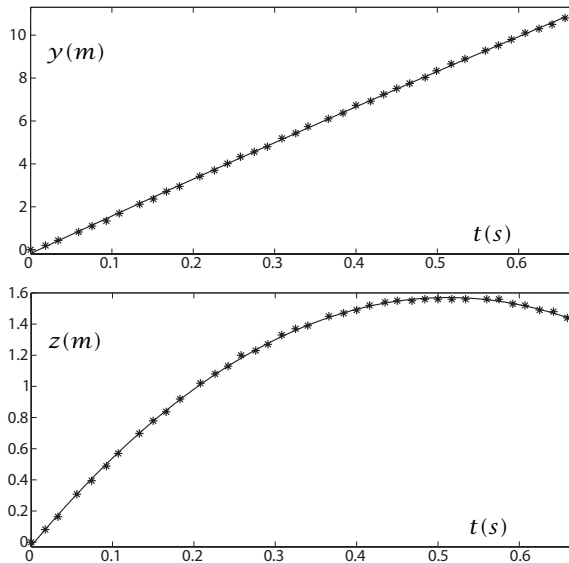


FIGURA 5: Comparació de les dades experimentals de [4] (asteriscs) i les corbes d'ajust (línies contínues).

A partir d'aquestes relacions és un problema senzill determinar uns quants dels paràmetres del vol de la pilota. Per exemple, l'angle inicial de xut, θ , el podem determinar observant que

$$\tan \theta = \frac{\dot{z}(0)}{\dot{y}(0)} = \frac{b_1}{a_1} \approx \frac{6.287}{17.591} \approx 0.357. \quad (35)$$

De manera alternativa $\tan \theta = dz/dy|_{y=0} = c_1 \approx 0.371$. Aquests dos resultats ens diuen que l'angle inicial del xut és $\theta \approx 19.65$ o 20.35 , amb una mitjana aproximada de 20° (una mica més alta que la citada en l'article). La velocitat inicial en les direccions y , z és $(\dot{y}(0), \dot{z}(0)) = (a_1, b_1) = (17.591, 6.287)$ i d'aquesta manera la velocitat inicial $|v| = \sqrt{a_1^2 + b_1^2} \approx 18.68$ m/s, que forma part del rang esmentat.

La comparació entre els ajusts de les corbes (32) i (33) i les solucions de pertorbació de (30) i (31) ens permet obtenir informació addicional sobre el xut. En primer lloc, podem observar que tant y com z haurien de començar a l'origen, que és el cas per a la solució de pertorbació, però l'ajust de les corbes indica un petit error. Tot i això, els termes rellevants b_0 , c_0 són petits. Els valors de (v, w) s'obtenen prenent $(\dot{y}(0), \dot{z}(0))$ a les equacions (30) i (31) i, òbviament, $(v, w) = (a_1, b_1)$. El coeficient de fregament k_d es pot obtenir comparant els termes quadràtics a les expressions de y

$$-\frac{k_d v^2}{2} = a_2 \quad \Rightarrow \quad k_d = 0.008 \quad (36)$$

que té un ordre de magnitud similar al citat a la taula 1. Les expressions de z ens donen l'eina per comprovar aquest valor; comparant els termes cúbics s'obté

$$\frac{k_d g v}{6} = b_3 \quad \Rightarrow \quad k_d = 0.007, \quad (37)$$

que, permetent errors experimentals i errors en l'ajust de corbes, està d'acord amb la primera estimació. A [4] s'afirma que aquesta trajectòria és típica dels casos sense efecte, i, per tant, $k_l = 0$. Hi ha una tercera manera de determinar k_d : comparant termes quadràtics en les expressions de z . Això ens porta a un valor de $k_d \approx 0.025$, un resultat que no coincideix amb els trobats anteriorment. De totes maneres, deixant $k_l \neq 0$, els termes quadràtics es poden utilitzar per determinar $k_l = 0.0061$ quan $k_d = 0.008$, i $k_l = 0.0065$ quan $k_d = 0.007$.

A la figura 5, part superior, es comparen les dades experimentals amb la funció quadràtica de l'equació (32) per als valors citats de a_i . Això és equivalent a dibuixar la solució aproximada (30) amb $v = 17.591$ m/s, $k_d = 0.008$. Clarament la coincidència és molt bona. A la figura 5, part inferior, es comparen les dades experimentals amb la funció cúbica donada per l'equació (33) per als valors citats de b_i . Això és equivalent a representar la solució (31) amb $w = 6.287$ m/s i $k_d = 0.007$. Una altra vegada, la concordança és excel·lent.

En resum, les funcions suggerides per les solucions de pertorbació poden donar una concordança excel·lent amb les dades experimentals. Comparar els

coeficients de la corba ajustada amb les solucions de pertorbació ens permet calcular els coeficients de fregament (i també es pot utilitzar per determinar les velocitats inicials si són desconegudes). Com a exemple, s'han fet servir les dades donades a [4] per determinar els paràmetres del vol de la pilota, que indiquen un angle inicial d'uns 20° (en contra dels mencionats 15°), un coeficient de fregament $k_d \in [0.007, 0.008]$ i un coeficient d'alçament $k_l \in [0.0061, 0.0065]$. És particularment interessant el fet de l'aparició d'un coeficient d'enlairament diferent de zero en el cas d'un experiment aparentment sense efecte. Atès que les equacions ens donen tres maneres de calcular k_d en absència de rotació i que dos d'aquests camins s'assemblen força, sembla que el problema no es troba en les equacions. En conseqüència podem deduir que les gràfiques han estat mal presentades (de fet, només es donen com una solució «típica»), o bé que s'ha generat una petita rotació durant el vol, potser a causa de la posició inicial de la costura o de la vàlvula.

5 Coeficients de fregament

Fins ara l'anàlisi ha tractat amb coeficients de fregament constants. Tanmateix, els estudis experimentals han mostrat que C_d , C_l i C_s varien amb el coeficient de rotació $Sp = R\omega/|\mathbf{v}|$ i, d'alguna manera (si la fluctuació de l'aire és turbulenta), amb el número de Reynolds. Durant el vol d'una pilota la velocitat angular disminueix a poc a poc [10]. Això es pot observar en els resultats experimentals de [9] i llavors la velocitat angular es pot prendre com a constant, però la magnitud de $|\mathbf{v}|$ disminueix pel fregament i, per tant, Sp augmenta.

Existeix un gran nombre d'estudis experimentals que mostren la variació de C_s (o de C_l) amb Sp ; vegeu, per exemple, [1, 5, 9, 11]. Goff i Carré [7] resumeixen els resultats experimentals de Asai *et al.* [1] i Carré *et al.* [5]. Observen que, com que C_l i C_s sorgeixen del mateix procés, són equivalents (alguns autors no separen el coeficient d'enlairament en components i prefereixen treballar amb un de sol definit en un eix apropiat de rotació; vegeu, per exemple, [10]). Els resultats experimentals indiquen que C_s i C_l augmenten amb la rotació fins a establitzar-se al voltant de $Sp = 0.3$. Els valors reals varien amb els experiments i, com es mostra a [11], amb diferents tipus de pilota, però típicament varien entre 0 i 0.35 quan Sp augmenta de 0 a 0.3 [1, 4, 9, 12]. Com que en aquest estudi ens centrem en l'efecte del gir, en els càlculs despreciam la regió on Sp és molt petit (per sota de 0.1) i utilitzem una aproximació a trossos de la forma

$$C_s = \begin{cases} C_{s0} \left(1 + \frac{m_s}{C_{s0}} (Sp - Sp_0)\right), & 0.1 < Sp < 0.3, \\ C_{s0} \left(1 + \frac{m_s}{C_{s0}} (0.3 - Sp_0)\right) = C_{sm}, & Sp > 0.3, \end{cases} \quad (38)$$

on el gradient $m_s = 0.8$, $C_{s0} = 0.25$ és el coeficient quan $Sp = Sp_0 = 0.15/0.8$ i $C_{sm} = 0.34$ és el valor constant màxim de C_s . El coeficient de fregament $k_s = k_{s0}$ s'escriu com a

$$k_{s0} = \frac{\rho A C_{s0}}{2m}.$$

La forma lineal, sense el truncament, també havia estat utilitzada per Hörzer *et al.* [10]. El coeficient de fregament C_d mostra una dependència menor respecte de Sp i, per tant, com a primer intent per modelar els coeficients variables permetem que C_s variï mentre que deixem constant C_d .

A causa de l'equivalència de C_s amb C_l , només estudiem l'efecte de variar una d'aquestes quantitats. Això és encertat, ja que, com hem comentat a la secció anterior, l'anàlisi hauria de ser tridimensional (llevat que la limitéssim al pla y - z i imposéssim només gir endavant). Si permetem que tant C_s com C_l variïn, aleshores la pertorbació serà extremament complicada de tractar. En comptes d'això, estudiem el cas de gir lateral pur, fixant $C_l = k_l = 0$ mentre C_s ve donat per l'equació (38). El model adimensional es redueix aleshores a

$$\ddot{X} = -\dot{Y}r_1 \left[k_d L_2 \ddot{X} - k_{s0} \phi_s \frac{L_2^2 r_1}{L_1 r_2} \dot{Y} \right], \quad (39)$$

$$\ddot{Y} = -\dot{Y}r_1 \left[k_d L_2 \dot{Y} + k_{s0} \phi_s \frac{L_1 r_1}{r_2} \dot{X} \right], \quad (40)$$

$$\ddot{Z} = -1 - k_d L_2 r_1 \dot{Y} \dot{Z}, \quad (41)$$

on

$$\phi_s = \begin{cases} 1 + \frac{m_s}{C_{s0}} (Sp - Sp_0), & 0.1 < Sp < 0.3, \\ \frac{C_{sm}}{C_{s0}}, & Sp > 0.3, \end{cases} \quad (42)$$

i

$$Sp = \frac{D\omega}{2|\mathbf{v}|} = \frac{D\omega}{2r_1 v \dot{Y}}. \quad (43)$$

Definim

$$\phi_s = \frac{\phi_1}{r_1 \dot{Y}} + \phi_2, \quad \phi_1 = \frac{m_s R \omega}{C_{s0} v}, \quad \phi_2 = 1 - \frac{m_s Sp_0}{C_{s0}}. \quad (44)$$

Per recuperar el cas de gir constant les condicions fixades són $\phi_1 = 0$ i $\phi_2 = 1$. Mantenint les definicions anteriors per als paràmetres petits (però amb k_s substituït per k_{s0}), les equacions es poden escriure com a

$$\ddot{X} = -\dot{Y}r_1 \left[\varepsilon \ddot{X} - \left(\frac{\phi_1}{r_1 \dot{Y}} + \phi_2 \right) \frac{r_1}{r_2} \dot{Y} \right], \quad (45)$$

$$\ddot{Y} = -\dot{Y}r_1 \left[\varepsilon \dot{Y} + c_1 \varepsilon^2 \left(\frac{\phi_1}{r_1 \dot{Y}} + \phi_2 \right) \frac{r_1}{r_2} \dot{X} \right], \quad (46)$$

$$\ddot{Z} = -1 - \varepsilon r_1 \dot{Y} \dot{Z}. \quad (47)$$

El gir variable és representat pel terme que inclou ϕ_1 el qual apareix amb l'ordre dominant a l'equació de $\ddot{X}$. Així doncs, hom espera que el gir variable tingui un efecte significatiu en el moviment en X . Tot i això, ϕ_1 i X només apareixen a les equacions de $\ddot{Y}$ i $\ddot{Z}$ amb el segon ordre i, per tant, hom espera que el gir variable tingui poc efecte en el moviment en Y , Z .

Utilitzant una pertorbació estàndard, fins a l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$ les solucions són

$$X = (\phi_1 + \phi_2) \frac{T^2}{2} + \varepsilon \left[\frac{c_2 W^2 (\phi_1 + 2\phi_2) T^2}{4} - \right. \quad (48)$$

$$\left. - (\phi_1 (2 + c_2 W) + \phi_2 (3 + 2c_2 W)) \frac{T^3}{6} + \frac{c_2 (\phi_1 + 2\phi_2) T^4}{24} \right],$$

$$Y = T - \varepsilon \frac{T^2}{2}, \quad Z = WT - \frac{T^2}{2} + \varepsilon \left[-\frac{WT^2}{2} + \frac{T^3}{6} \right]. \quad (49)$$

Observant que $k_l = 0$ resulta que $c_3 = c_4 = 0$ i aleshores les solucions de Y i de Z anteriors corresponen a les equacions (21)-(23) fins a l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$, mentre que la solució de X difereix de l'equació (21) en l'ordre dominant.

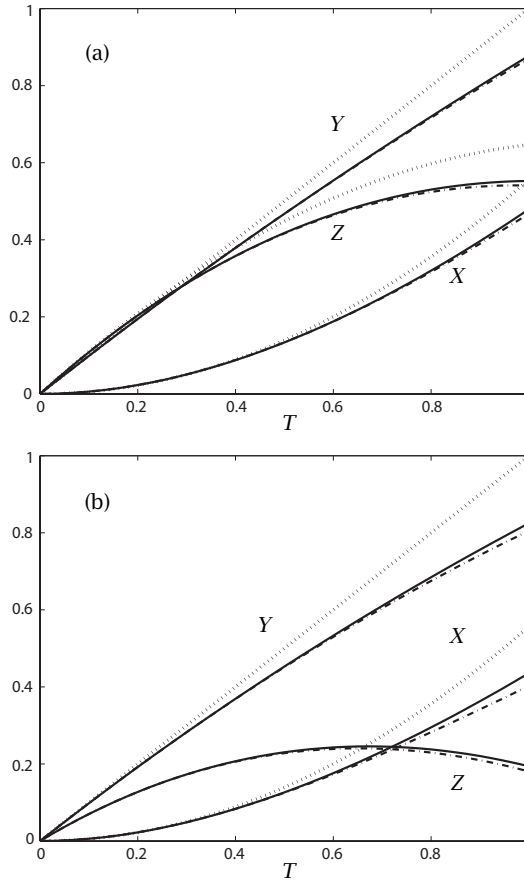


FIGURA 6: Trajectòries adimensionals de X , Y i Z en funció de T per a C_s variable (amb $\omega = 50$): solució numèrica completa (línia contínua), solució $\mathcal{O}(\varepsilon^0)$ (línia de punts) i solució $\mathcal{O}(\varepsilon)$ (línia de punts i ratlles): (a) $L_2 = 20$; (b) $L_2 = 30$ m.

La figura 6 mostra una comparació entre les solucions numèriques i de pertorbació del model incloent-hi el gir variable. La figura 6(a) té les mateixes condicions inicials que s'havien fet servir a la figura 3, però ara amb C_s variant d'acord amb l'equació (38) i $\omega = 50$ rad/s. La línia contínua és la solució numèrica i les línies discontinues indiquen diversos nivells de la solució de pertorbació. La corba X mostra que al final de la trajectòria la pilota s'ha mogut una mica menys de 0.6 unitats adimensionals, que correspon a una distància dimensional de $0.6k_{s0}L_2^2 \approx 2.59$ m. Com que el viratge dimensional és proporcional a L_2 , a la figura 6(b) es representa el mateix xut però ara a una distància de 30 m. El canvi de L_2 prové d'un augment de $\varepsilon = k_d L_2$ i així s'espera que la solució de pertorbació perdi precisió. Això és clar observant la figura, tot i que la solució $\mathcal{O}(\varepsilon)$ és relativament precisa (podríem augmentar aquesta precisió trobant el terme $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$). El viratge dimensional al final del recorregut ara és d'uns 4.86 m. Aquest valor és quasi el doble del corresponent a un xut des de 20 m i prové de la dependència aproximadament quadràtica respecte de la distància.

A la figura 7(a) hi ha dibuixades quatre corbes corresponents a $\omega = 30, 40, 50, 60$ rad/s i $L_2 = 30$ m (amb la resta de condicions com a la figura 3). Tal com s'esperava, augmentar ω fa augmentar el moviment lateral de manera que $X(1)$ varia de 0.298 a 0.44 quan ω augmenta de 30 a 60 (i dimensionalment de 2.9 m a 4.3 m). Obviant el fregament variable, l'equació (29) indica que l'increment hauria de ser aproximadament lineal $x \propto k_s$. Incloure la variació del coeficient de fregament, amb truncament, fa que l'augment sigui no lineal. Per exemple, quan ω augmenta de 30 a 40, $X(1)$ augmenta en 0.052 (dimensionalment 0.5 m), però augmentant ω de 50 a 60, $X(1)$ augmenta només en 0.04 (dimensionalment 0.4 m). Un augment de ω superior no produirà gaire variació en el moviment. Ens pot ajudar a entendre això la figura 7(b) que mostra la variació de C_s al llarg de la trajectòria: amb $\omega = 30$ o 40 el valor de C_s sempre augmenta. Quan $\omega = 50$ el valor de C_s es torna constant cap al final del vol i per a $\omega = 60$ és constant durant la meitat del temps de vol. Per tant, qualsevol xut amb $\omega > 60$ donarà un resultat similar al de $\omega = 60$. Duent a terme aquest estudi va sorgir la pregunta de què és el que presenten exactament els diferents grups de recerca quan dibuixen les corbes $C_s - Sp$. En particular no queda prou clar com s'interpreta $Sp = R\omega/|\mathbf{v}|$. Els experiments de Asai *et al.* [1] i de Passmore *et al.* [12] consideren una pilota fixada en un túnel de vent en el qual ω i $\mathbf{v}$ romanen constants, de manera que Sp pren un únic valor per a cada experiment. El fregament i la força lateral es mesuren directament, un fet que després permet calcular els coeficients de fregament a través de l'equació (2). Experiments més «realistes» consideren un xut real d'una pilota en un entorn controlat i després calculen els coeficients adaptant les dades a algun model matemàtic. Per exemple, Bray i Kerwin [2] monitoritzen el vol d'una pilota amb dues càmeres. Les equacions del model es resolten i s'iteren, utilitzant coeficients de fregament com a paràmetres variables fins que es troba una bona correspondència amb les dades experimentals.

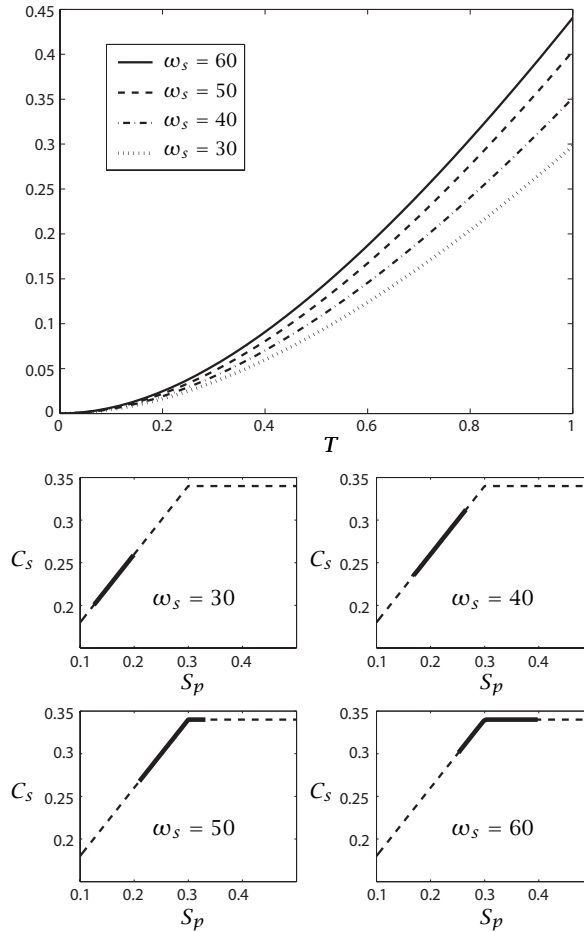


FIGURA 7: (a) a la part superior, trajectòries adimensionals de x en funció de t per a C_s variable; (b) a la part inferior, gràfiques corresponents a C_s en funció S_p , la línia discontinua representa l'equació (38), la línia contínua gruixuda és la variació de C_s al llarg de la trajectòria.

Amb aquest mètode es determinen valors constants per al fregament frontal i lateral per a un xut donat. De totes maneres, com que aquests valors provenen d'ajustar la trajectòria sencera, on S_p és una funció creixent, els coeficients han de ser alguna mena de mitjana per al xut específic. Carré *et al.* [4] fan servir una tècnica semblant on els coeficients de fregament són mitjanes, però les gràfiques es fan a partir del valor inicial de S_p (d'aquesta manera s'evita la confusió en la variació de S_p). Goff i Carré [7, 8] escullen coeficients de fregament per tal de minimitzar l'error de mínims quadrats entre la solució numèrica i les dades dels experiments, però per reduir la variació de S_p limiten les dades als primers 0.07 s de vol. Griffiths *et al.* [9] utilitzen un sistema

precís de seguiment de la pilota però calculen els coeficients amb la fórmula de Wesson [14], que suposa el fregament constant. Per tant, les diferents dades que es donen mostren valors de C_s i Sp reals o bé poden ser valors mitjans sobre una trajectòria donada (amb diferents mètodes de fer la mitjana). La figura 8 presenta dos grups de corbes, les corbes de sota corresponen a C_s variable amb $L_2 = 30$ m. La línia discontinua representa la trajectòria fins a $t = 1.655$ s (per acabar a $y \approx 30$ m) i la línia contínua acaba a $t = 0.693$ s (al voltant de $y = 15$ m). Les corbes de la part superior utilitzen un valor constant de $C_s = 0.307$, que va ser escollit per fer coincidir el resultat de la variable C_s després de 1.655 s. La gràfica es presenta dimensionalment, ja que totes les modificacions d'escala depenen de la tria de C_s . Totes les altres condicions són les mateixes que en cas de $\omega = 50$ rad/s de la figura 7. La característica important és que per a temps diferents de 1.655 s la corba constant de C_s té una quantitat de viratge diferent, fet que indica que si s'utilitza un valor mitjà per a C_s , aleshores el seu valor variarà amb la distància del punt de xut (a la figura els xuts de 15 m mostren una diferència de 10 cm en el viratge). Això és, si totes les altres condicions estan fixades, ajustant un valor constant de C_s a les dades experimentals, llavors obtindrem un rang de valors de C_s per a xuts fets a distàncies diferents.

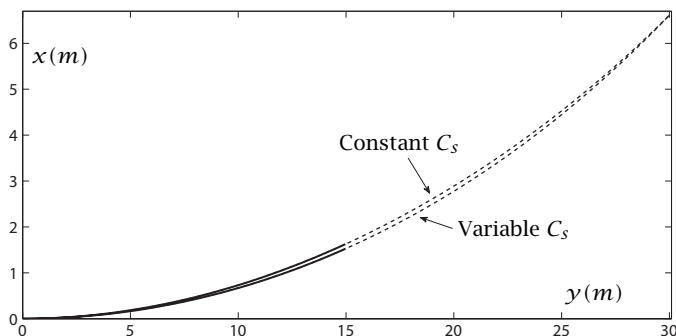


FIGURA 8: Comparació de trajectòries per a C_s variable i per a C_s constant.

6 Discussió

En aquest treball hem estudiat les equacions tridimensionals per al moviment d'una pilota de futbol durant el vol. La solució numèrica és trivial però aquesta no mostra la dependència del problema respecte dels paràmetres. Per aquest motiu, s'ha desenvolupat una solució de pertorbació que ha resultat molt precisa quan es compara amb la solució numèrica. En l'obtenció d'aquesta solució el canvi d'escala s'ha basat en la hipòtesi que els jugadors de futbol donen més efecte lateral que per sobre (o per sota) a la pilota. Això es podria canviar fàcilment si estudiéssim, per exemple, el moviment d'una pilota de golf, on l'efecte per sobre o per sota és el dominant. L'anàlisi realitzada ha permès fer un seguit d'observacions sobre el moviment de la pilota.

Les aproximacions analítiques mostren que a l'ordre principal el moviment lateral és proporcional al coeficient de fregament lateral k_s i a la distància $(vt)^2$. Això explica el motiu pel qual els xuts de falta fets de més lluny tenen més viratge. Fins al primer ordre en el paràmetre petit, el moviment en cada direcció està descrit per una equació de grau 4 com a màxim en el temps. Els estudis experimentals sovint aproximen les dades amb un polinomi. Per exemple, Carré *et al.* [4] mostren una concordança excel·lent amb les dades experimentals suposant que la x varia quadràticament amb t . Això està d'acord amb el resultat referent a l'ordre principal d'aquest estudi, $x \approx k_s(vt)^2/2$, i permetrà copsar correctament el comportament dominant i la solució per a temps petit. Bray i Kerwin [2] suposen una dependència quàrtica per a x , y , z : com que una quàrtica conté més coeficients, hom pot ajustar les dades experimentals amb més precisió. Aquesta funció està en concordança amb l'expressió de primer ordre. Per aquesta raó els resultats que presentem aquí no es van comparar inicialment amb dades experimentals: molts estudis han mostrat que les dades poden ser ben aproximades per funcions quadràtiques o quàrtiques. Com que els resultats prenen aquesta forma, es pot obtenir una bona concordança simplement escollint els coeficients adequats (i així deduint els valors dels coeficients de fregament). De totes maneres, pel suggeriment d'un revisor, hem comparat els resultats amb els de [4]. Així s'ha vist que hi ha la concordança esperada i s'han pogut determinar d'una manera senzilla els paràmetres del vol. De fet, això mostra d'alguna manera que les equacions poden ser considerades indulgents en el sentit que un model poc precís pot donar encara una bona concordança amb dades experimentals. Negligint termes, per exemple, estudiant només el moviment bidimensional, portarà a la mateixa forma de solució que el sistema tridimensional, però els coeficients polinomials seran diferents. Com a conseqüència, un estudi numèric d'un conjunt d'equacions lleugerament incorrecte serà capaç de donar una bona concordança amb les dades experimentals, però els coeficients de fregament calculats amb aquesta solució seran diferents del seu valor real. Per il·lustrar aquest fet, combinem les equacions (29) i (30) per tal de determinar una expressió de x com a funció de y , precisa fins a l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$,

$$x = \frac{k_s y^2}{2} \left[1 + \left\{ \frac{w^2}{v^2} - \frac{2gwy}{3v^3} + \frac{g^2 y^2}{6v^4} \right\} \right], \quad (50)$$

on els termes $\mathcal{O}(\varepsilon)$ estan entre claus. A l'ordre principal, es pot observar el fet ben conegut que x varia, de manera aproximada, quadràticament amb y . A mesura que el temps avança, i d'aquesta manera y , el terme $\mathcal{O}(\varepsilon)$ creix en importància i fa que el vol es desvii de la forma quadràtica i aquesta desviació és descrita per una quàrtica. El coeficient correcte de y^2 en l'equació anterior és $k_s(1 + w^2/v^2)/2$. Donat un polinomi que s'ajusti amb les dades experimentals i donats valors inicials de les velocitats v i w , és possible calcular k_s simplement comparant els coeficients polinòmics adequats. De totes maneres, si el model matemàtic negligeix el moviment en z (fixant $w = 0$ a (50)), aleshores la predicció de k_s estarà afectada per un factor $1 + w^2/v^2$ respecte del seu valor real.

Aleshores òbviament s'ha d'anar amb compte a l'hora de triar el model per tal d'obtenir els coeficients de fregament a partir de dades experimentals tridimensionals. Si la pilota és llançada en un camp gravitacional (cosa més aviat difícil d'evitar) amb efecte lateral, aleshores s'hauran d'utilitzar les equacions tridimensionals al complet, ja que la velocitat vertical té un efecte important en el moviment lateral. L'excepció a aquesta norma és quan la pilota és llançada amb velocitat zero en la direcció x i només amb efecte per sobre (o per sota); aleshores un estudi bidimensional en el pla y - z serà suficient. Com que C_s apareix pel mateix efecte que C_l , només s'ha de determinar una d'aquestes dues quantitats i l'experiment dos-dimensional ens donarà tota la informació necessària.

En la secció final s'ha investigat l'efecte que té la variació de C_s (o C_l) a causa del gir durant el vol. Els estudis numèrics generalment suggereixen un valor constant, sovint escollit per donar el millor ajust a les dades. Els resultats en aquest estudi mostren que la variació de C_s provoca un canvi en relació amb les trajectòries predites. Tot i que és possible triar un valor constant mitjà, aquest valor variarà amb la llargada de la trajectòria. Com que el coeficient de fregament és una funció de la pilota i de les propietats de l'aire, i no de la llargada del vol, aquest resultat és físicament poc realista. Un problema que va sorgir en aquesta part de l'estudi va ser la interpretació del gir. Per determinar C_s en termes de Sp es pot realitzar un experiment on la trajectòria de la pilota de futbol se segueix amb algun equip de captura de moviment. La comparació amb els resultats del model matemàtic porta a un valor de C_s per a un Sp donat, per a cada experiment. De totes maneres, com que Sp , de fet, creix durant el vol no és clar què es vol dir amb el valor citat. Excepcions a aquesta norma són els experiments duts a terme amb una pilota immòbil en un túnel de vent, cas en què Sp es pot mantenir constant; vegeu, per exemple, [1, 12].

El salt ben conegut en el coeficient de fregament, que pot produir una rotació en sentit contrari en altres esports, no s'ha considerat en aquest article ja que el moviment d'una pilota de futbol té lloc per a valors del número de Reynolds per sobre de la transició [10]. De totes maneres, val la pena fer notar que la transició té lloc per a valors de Re més alts com més llisa és la pilota. Com que la densitat de l'aire disminueix amb l'altitud (i per tant, també ho fa Re), això podria ser un factor important en el moviment d'una pilota llisa en estadis situats a molta altitud, com ara el de Johannesburg. De fet, durant la Copa del Món del 2010, en què es va fer servir la pilota Jabulani (una pilota llisa sense costures), hi va haver moltes crítiques sobre els vols aparentment erràtics de les pilotes. Per exemple, el seleccionador d'Anglaterra, Fabio Capello, va afirmar que la pilota es comportava d'una manera estranya a gran alçada sobre el nivell del mar; el davanter brasiler Fabiano va afirmar que canviava de manera imprevisible de direcció quan anava per l'aire; vegeu [15].

A continuació es discuteix si l'elecció de la pilota pot donar algun avantatge a un equip, i en particular si l'altura hi pot intervenir. De l'equació (29) es pot veure que el viratge en la direcció x és proporcional a $k_s = \rho AC_s / (2m)$. El valor de la densitat de l'aire ρ decreix amb l'altitud. En estadis a gran altitud, com el

de Johannesburg, a 1800 m, $\rho \approx 1.04 \text{ kg/m}^3$ és aproximadament un 20% més baixa que a nivell del mar, $\rho \approx 1.29 \text{ kg/m}^3$. Per tant, un equip acostumat a jugar a nivell del mar esperarà un 20% més de viratge. Per il·lustrar la diferència més clarament, a la figura 9 es mostren tres trajectòries per a xuts idèntics amb $\rho = 1.04, 1.19$ i 1.29 kg/m^3 (els dos últims valors són els adequats per a Madrid i Barcelona, respectivament). Els valors inicials són $v = 36 \text{ m/s}$ i $L_2 = 35 \text{ m}$, el coeficient de fregament és constant, $C_s = 0.34$, i les altres condicions són les mateixes que en les figures prèvies. Si la pilota es xuta inicialment a nivell del pal de la porteria, aleshores una velocitat en la direcció x de -15.16 m/s porta a un gol només a nivell del mar, quan $\rho = 1.29$ (utilitzem aquí la solució numèrica ja que $\dot{x}$ no es va incloure en la solució de pertorbació i de passada aquest xut verifica la solució de pertorbació). El mateix xut fet a Madrid passaria de llarg de la porteria uns 1.3 m mentre que a Johannesburg fallaria per uns 3.3 m. Hörzer *et al.* [10] van predir un comportament similiar a les seves solucions numèriques.

L'avantatge de la solució analítica presentada en aquest article és que no només mostra explícitament l'efecte de la densitat de l'aire, sinó que també mostra la dependència respecte d'altres variables. Per exemple, com que el viratge és proporcional a ρAC_s , el canvi en el comportament de la pilota degut a l'altitud es pot obtenir canviant el coeficient de fregament. La trajectòria per a $\rho = 1.29$ a la figura 9 pot fer-se idèntica a la corba de $\rho = 1.04$ posant $C_s = 1.04 \times 0.34 / 1.29 \approx 0.274$. Això és un tema important actualment per als fabricants de pilotes de futbol (impulsat per la Copa del Món de Sud-àfrica del 2010) que volen fabricar pilotes que tinguin el mateix comportament a diferents altituds.

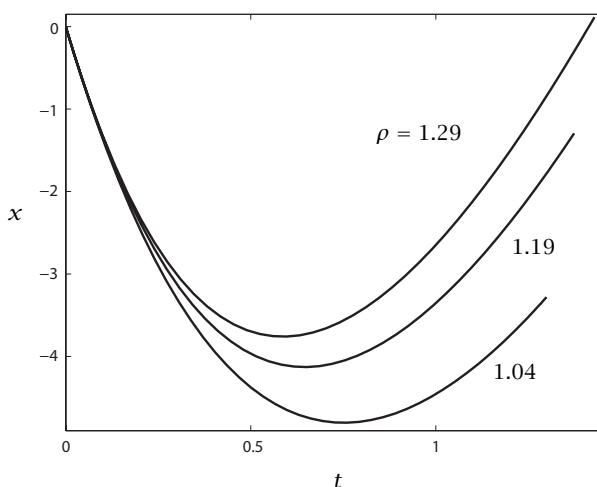


FIGURA 9: Diferències en trajectòries a diferents altituds.

Finalment, queda la pregunta de si aquesta anàlisi pot marcar diferència a la pràctica. La solució analítica mostra clarament els factors que afecten el

vol de la pilota. Posa de manifest que els equips que juguen a la costa estan acostumats a un viratge més gran que els equips que juguen a grans altituds, ja que la densitat de l'aire o la rugositat de la pilota redueixen el viratge. En conseqüència, després de la reunió que va tenir lloc a Johannesburg el gener del 2011 es va suggerir que el Bidvest Wits utilitzés una pilota llisa per als partits ja que d'aquesta manera s'aconseguiria el comportament més allunyat del que esperen els equips que normalment juguen en altituds més baixes. En canvi, en els entrenaments per a partits a fora haurien de fer servir una pilota rugosa. Els equips de costa haurien d'aplicar l'argument contrari i triar pilotes rugoses quan han de jugar amb equips d'altituds grans. És clar que no es poden predir tots els factors que afectaran la sort dels equips, però val la pena de notar que abans de la reunió de Johannesburg els Wits no havien guanyat en vuit partits consecutius. En el seu primer partit a casa després de la reunió, que van jugar amb un equip de costa, van guanyar per 6-0. Fins al final de la temporada 2011 van perdre només un partit a casa, que va ser un partit de Copa, on l'equip de casa no pot posar la pilota. Desafortunadament, no ho van fer tan bé en els partits fora de casa.

Agraïments

La recerca de T. G. Myers ha tingut el suport del projecte Industrial applications of moving boundary problems (Marie Curie International Reintegration Grant, núm. FP7-256417) i del Ministeri de Ciència i Innovació, ajut MTM2010-17162. S. L. Mitchell agraeix el suport del Mathematics Applications Consortium for Science and Industry (MACSI, www.macsi.ul.ie) finançat per la Science Foundation Ireland Mathematics Initiative, grant 06/MI/005.

Referències

- [1] ASAI, T.; SEO, K.; KOBAYASHI, O.; SAKASHITA, R. «Fundamental aerodynamics of the soccer ball». *Sports Engineering*, 10 (2007), 101-110.
- [2] BRAY, K.; KERWIN, D. «Modelling the flight of a soccer ball in a direct free kick». *Journal of Sports Sciences*, 21 (2) (2003), 75-85.
- [3] BRAY, K.; KERWIN, D. G. «Simplified flight equations for a spinning soccer ball». A: REILLY, T.; CABRI, J.; ARAÚJO, D. (ed.). *Science and Football V: The Proceedings of the Fifth World Congress on Science and Football*. Londres. Nova York: Routledge, 2005, 39-44.
- [4] CARRÉ, M. J.; ASAI, T.; AKATSUKA, T.; HAAKE, S. J. «The curve kick of a football II: flight through the air». *Sports Engineering*, 5 (2002), 193-200.
- [5] CARRÉ, M. J.; GOODWILL, S. R.; HAAKE, S. J. «Understanding the effect of seams on the aerodynamics of an association football». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 219 (2005), 657-666.

- [6] DUPEUX, G.; LE GOFF A.; QUÉRÉ, D.; CLANET C. «The spinning ball spiral». *New. J. Phys.*, 12 (2010), 093004.
- [7] GOFF, J. E.; CARRÉ, M. J. «Trajectory analysis of a soccer ball». *Am. J. Phys.*, 77 (11) (2009), 1020–2017.
- [8] GOFF, J. E.; CARRÉ, M. J. «Soccer ball lift coefficients via trajectory analysis». *Eur. J. Phys.*, 31 (2010), 775–784.
- [9] GRIFFITHS, I.; EVANS, C.; GRIFFITHS, N. «Tracking the flight of a spinning football in three dimensions». *Meas. Sci. Technol.*, 16 (10) (2005), 2056–2065.
- [10] HÖRZER, S.; FUCHS, C.; GASTINGER, R.; SABO, A.; MEHNEM, L.; MARTINEK, J.; REICHEL, M. «Simulation of spinning soccer ball trajectories influenced by altitude». 8th Conference of the International Sports Engineering Association (ISEA). *Procedia Engineering*, 2 (2) (2010), 2461–2466.
- [11] OGGIANO, L.; SÆTRAN, L. «Aerodynamics of modern soccer balls». *Procedia Engineering*, 2 (2) (2010), 2473–2479.
- [12] PASSMORE, M. A.; TUPLIN, S.; SPENCER, A.; JONES, R. «Experimental studies of the aerodynamics of spinning and stationary footballs». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 222 (2) (2008), 195–205.
- [13] RIGSBY, B. «The history of the soccer ball». Disponible a <http://www.soccerballworld.com/History.htm#Early>.
- [14] WESSON, J. *The science of soccer*. Bristol. Filadèlfia: IOP Publishing Ltd., 2002.
- [15] WIKIPEDIA CONTRIBUTORS. «Adidas Jabulani». Wikipedia, The Free Encyclopedia. Data de l'última revisió: 1 de gener de 2015. Disponible a http://en.wikipedia.org/wiki/Adidas_Jabulani.

TIMOTHY G. MYERS
CENTRE DE RECERCA MATEMÀTICA
CAMPUS DE BELLATERRA, EDIFICI C
08193 BELLATERRA
BARCELONA, ESPANYA
tmyers@crm.cat

SARAH L. MITCHELL
MACSI
DEPARTMENT OF MATHEMATICS AND STATISTICS
UNIVERSITY OF LIMERICK
LIMERICK, IRELAND
sarah.mitchell@ul.ie

Sèries de potències (aleatòries)

JOAQUIM ORTEGA-CERDÀ

Resum: La construcció de funcions aleatòries amb propietats interessants és un tema de llarga tradició en les matemàtiques. Darrerament, i resseguint l'estudi dels valors propis de matrius aleatòries, s'està duent a terme l'estudi dels zeros de polinomis i funcions aleatòries holomorfes.

Paraules clau: polinomis aleatoris, funcions analítiques gaussianes.

Classificació MSC2010: 30B20, 26C10, 30C15, 15B52.

1 Introducció

En l'*anàlisi* d'una funció, és freqüent descompondre-la en superposició de funcions simples i aquesta descomposició s'utilitza per arribar a esbrinar propietats de les funcions. Això és la base de l'anàlisi de Fourier, de les sèries de potències, de les ondetes, de les sèries de Dirichlet, etc.

El procés invers, la *síntesi*, construeix funcions a partir de la superposició de funcions simples per tal d'obtenir funcions amb propietats desitjades.

Un exemple clàssic és la funció de Weierstrass:

$$f(x) = \sum_{n \geq 1} a^n \cos(b^n x),$$

amb $a < 1$ i $ab \geq 1$. Aquesta és una funció contínua a $\mathbb{R}$ no derivable en cap punt.

De vegades, no sabem com triar els coeficients per fer una combinació de funcions simples amb propietats desitjades i el que fem és triar a l'atzar! Aquest ha estat un mecanisme popular en la segona meitat del segle xx utilitzat per generar funcions amb propietats prefixades. Un exemple paradigmàtic es troba en el llibre de Kahane de sèries de funcions aleatòries; vegeu [8].

Estudiarem ara un problema aleatori diferent. Volem generar punts aleatoris amb unes certes propietats de densitat i separació prefixada. Una forma de generar-los que ha guanyat popularitat en la darrera dècada (vegeu [6, 13]), tot i que hi ha antecedents molt més antics com ara [7, 9], és la següent: es tracta de triar polinomis, o, més generalment, funcions analítiques, mitjançant una elecció aleatòria dels seus coeficients de forma independent i observar els zeros d'aquests polinomis. Els punts aleatoris generats d'aquesta manera tenen propietats estadístiques de repulsió local molt interessants que han fet que siguin estudiats com a possibles models físics de partícules amb repulsió (fermions); vegeu [1].

2 Els polinomis de Kac

Comencem amb un cas senzill. Considerem el polinomi aleatori:¹

$$p_n(z) = a_0 + a_1 z + \cdots + a_n z^n,$$

on a_j , $j = 0, \dots, n$ són variables aleatòries independents idènticament distribuïdes, $a_j \simeq N_{\mathbb{C}}(0, 1)$. Calculem els zeros de p_n : $z_1, \dots, z_n$. Quina és la seva distribució? Podem observar-ne un exemple a la figura 1. En aquest cas sembla clar i es pot demostrar que els zeros d'aquests polinomis es concentren uniformement distribuïts entorn del cercle unitat de forma majoritària. Aquests són els anomenats *polinomis de Kac*.

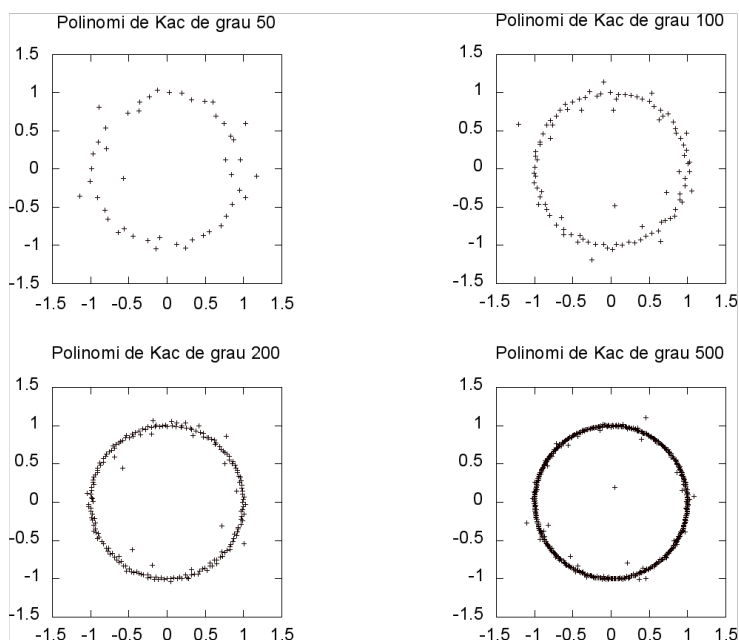


FIGURA 1: Els zeros dels polinomis de Kac.

¹ Marquem en negreta els elements aleatoris.

En aquest tipus de resultat, el fet que $\mathbf{a}_i$ sigui una variable aleatòria normal és molt convenient des d'un punt de vista tècnic, però no és imprescindible. De fet, hi ha resultats anomenats *d'universalitat* que garanteixen que, independentment de la tria de variables aleatòries per als coeficients, sempre que siguin independents i idènticament distribuïdes, els resultats seran molt similars. Si aquestes fossin totes les possibilitats, l'interès acabaria aviat. El que és rellevant és la normalització que triem dels coeficients. Veurem que, aleshores, el resultat varia molt substancialment.

Considerem una variant dels polinomis de Kac. Triem els polinomis aleatoris (dits *de Weyl*) amb una normalització dels coeficients diferent:

$$\mathbf{p}_n(z) = \frac{\mathbf{a}_0}{\sqrt{0!}} + \frac{\mathbf{a}_1}{\sqrt{1!}}z + \dots + \frac{\mathbf{a}_n}{\sqrt{n!}}z^n,$$

on $\mathbf{a}_j$, $j = 0, \dots, n$ són variables aleatòries independents idènticament distribuïdes $\mathbf{a}_j \simeq N_{\mathbb{C}}(0, 1)$. Calculem els zeros de $\mathbf{p}_n$: $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n$. La seva distribució, que observem en la figura 2, sembla ara repartir-se en un disc de radi $\sqrt{n}$, on n és el grau del polinomi.

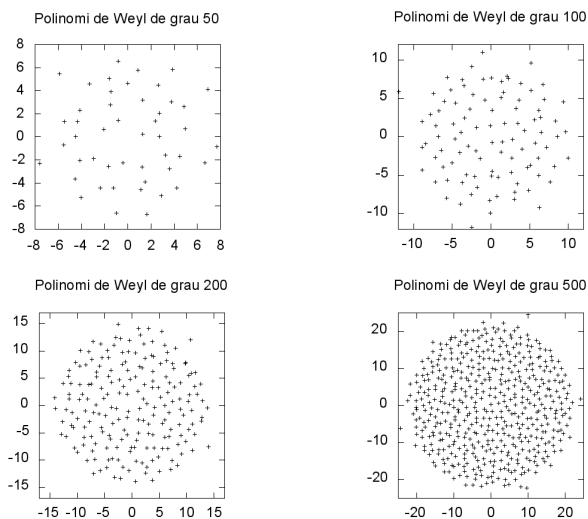


FIGURA 2: Els zeros dels polinomis de Weyl.

La diferència en la distribució dels zeros, entre els polinomis de Kac i els de Weyl, es pot explicar per la raó que les funcions $f_n(z) = z^n$ formen una base ortonormal de l'espai de Hardy de funcions holomorfes en el disc unitat amb norma $\|f\|^2 = \int_0^1 |f(e^{2\pi i\theta})|^2 d\theta$ i, en canvi, les funcions $g_n(z) = z^n / \sqrt{n!}$, utilitzades en la definició dels polinomis de Weyl, formen una base ortonormal de l'espai de Fock de funcions enteres g tals que $\|g\|^2 = \int_{\mathbb{C}} |g(z)|^2 e^{-|z|^2} dm(z)$. Tant l'espai de Hardy com l'espai de Fock són espais de Hilbert de funcions amb nucli reproduïdor, i veurem que la distribució dels zeros de les funcions aleatòries així construïdes es pot calcular a partir del nucli reproduïdor.

Vèiem abans alguna característica en comú que tenen els zeros de les funcions analítiques aleatòries independentment de la normalització triada.

La distribució dels punts dins del disc (o a prop del cercle, en el cas dels polinomis de Kac) no és arbitrària. Fem un *zoom* dels zeros dels polinomis de Weyl i comparem-los amb el mateix nombre de punts, però distribuïts uniformement i independent en el quadrat $[-15, 15] \times [-15, 15]$, com hem fet en la figura 3.

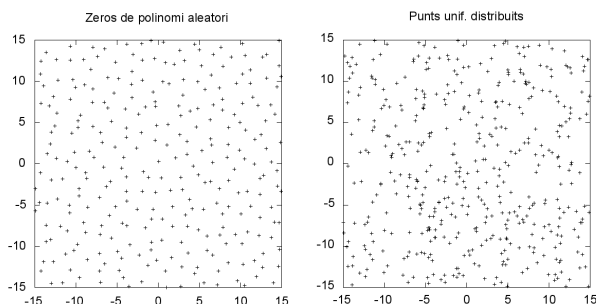


FIGURA 3

Observem que els zeros dels polinomis aleatoris semblen tenir més «estructura» i exhibeixen una repulsió local. També s'observa que no hi ha forats notables. Tot plegat sembla una disposició més uniforme.

Compararem aquest procés de punts aleatoris amb un altre de ben conegut, el procés de Ginibre. Consisteix a prendre una matriu de dimensió $n \times n$ amb tots els seus coeficients que siguin variables aleatòries idènticament distribuïdes i independents amb distribució gaussiana: $N_{\mathbb{C}}(0, 1)$ i a observar els valors propis d'aquesta matriu.

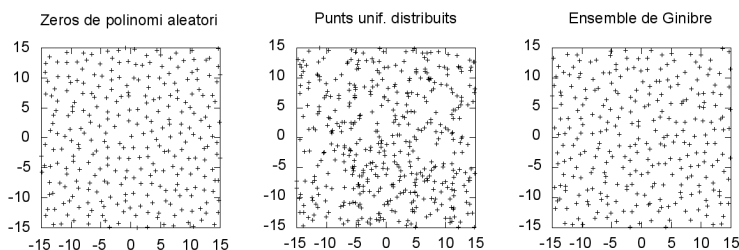


FIGURA 4

Ginibre a [2] va estudiar l'espectre d'aquesta matriu (que diagonalitza amb valors propis diferents fora d'un conjunt excepcional de matrius de probabilitat zero). Va observar que els valors propis són punts en el pla complex amb una distribució molt similar als zeros dels polinomis de Weyl. En la figura 4, veiem de prop la distribució dels zeros del polinomi aleatori i l'espectre de la matriu aleatòria.

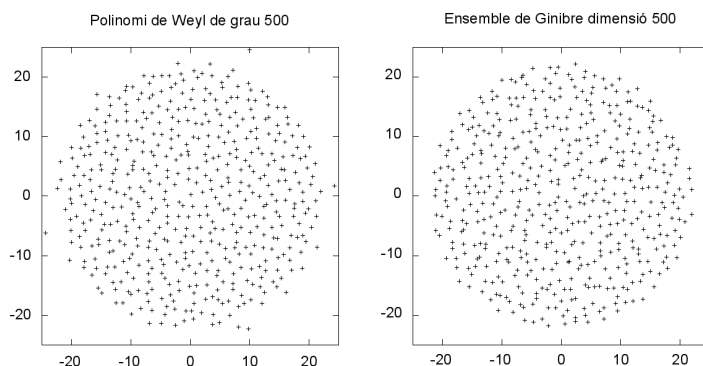


FIGURA 5

Si comparem els zeros i els valors propis globalment, com en la figura 5, observem una distribució molt similar, amb una diferència subtil. En el conjunt de Ginibre, la transició entre el disc ple de zeros i el seu complement sembla més nítida, més abrupta. En els zeros del polinomi de Weyl, sembla que hi ha una regió de transició on hi ha uns pocs zeros. Mirarem de justificar aquesta observació.

Els dos processos de punts aleatoris, el de Ginibre i el dels zeros del polinomi de Weyl, admeten una extensió a infinits punts. En el cas dels polinomis de Weyl, es tracta dels zeros d'una funció entera aleatòria:

$$f(z) = \sum_n \frac{a_n}{\sqrt{n!}} z^n.$$

El cas de valors propis de matrius de dimensions infinites és més delicat tècnicament. En qualsevol cas, una propietat en comú que tenen aquests processos d'infinits punts és que són invariants per translacions, és a dir, la probabilitat de trobar un nombre determinat de zeros en un conjunt A i en $A + z$ és la mateixa per a tot z . De fet, juntament amb el procés de Poisson clàssic, són els únics processos «naturals» que coneixem que tenen aquesta invariància per translacions. Això, naturalment, els fa molt atractius.

3 Un *detour* per les matrius aleatòries

La motivació per estudiar els valors propis de matrius aleatòries ve del problema de la difusió (*scattering*) nuclear. Wigner, en els anys cinquanta, va proposar l'estudi de valors propis aleatoris per modelar l'estat excitat d'alguns nuclis atòmics grans. Vegem alguns exemples trets del llibre clàssic de Mehta

(vegeu [10]) sobre matrius aleatòries, que segueix sent una bona referència. Es tracta de ressonàncies de difusió corresponents a nuclis de gadolini, tori i urani, representades en la figura 6 (treta de [10]).

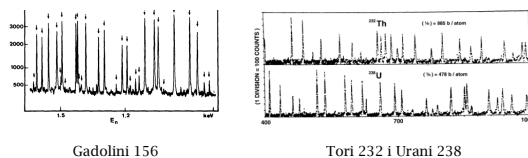


FIGURA 6

En la figura 7 (treta de [10]), comparem la distància entre ressonàncies de difusió i l'espai entre vaps del GOE (*Gaussian Orthogonal Ensemble*), que són matrius simètriques reals tals que les seves entrades triangulars superiors són variables aleatòries independents gaussianes reals idènticament distribuïdes.

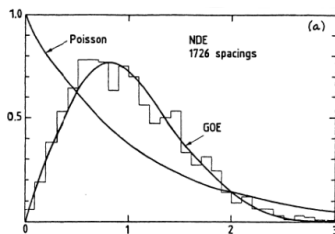


FIGURA 7

L'estudi dels valors propis de matrius aleatòries ha esdevingut un camp d'estudi immens (amb més de 2700 entrades al MathSciNet des de l'any 2000). Gran part de la seva popularitat és deguda a les relacions amb la física matemàtica, però també amb altres camps potser més sorprenents.

Estudiant la distribució dels zeros de la funció ζ de Riemann, Montgomery (vegeu [11]) conjecturà una certa repulsió local entre aquests zeros. És llegendària la trobada amb el famós físic nuclear Dyson, que li va fer notar la similitud d'aquesta qüestió amb la distribució dels espais entre els valors propis de matrius aleatòries del GUE (*Gaussian Unitary Ensemble*). Odlyzko a [12] experimentà numèricament aquesta conjectura calculant milions de zeros de la ζ de Riemann i ho compara amb la distribució dels valors propis del GUE, com en la figura 8 (treta de [10]), i dóna suport al lligam conjecturat entre la correlació dels zeros de la funció ζ i la correlació entre els valors propis de matrius del GUE.

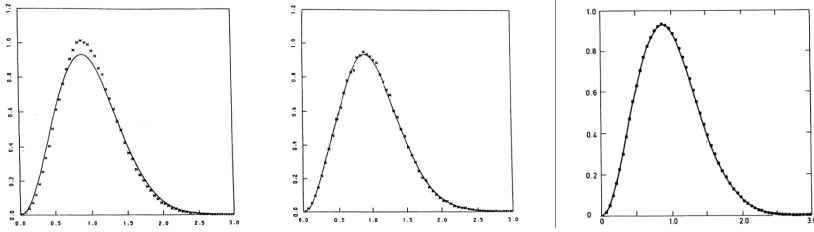


FIGURA 8

4 Interpretació dels resultats numèrics

4.1 La repulsió local

Intentem entendre alguns dels fenòmens observats en les figures anteriors. Una explicació heurística del perquè de la repulsió local és la següent:

PROPOSICIÓ 1. Si $p(z) = \prod_{i=1}^n (z - z_i)$ té coeficients a_k , i. e.:

$$p(z) = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + \cdots + a_1z + a_0,$$

aleshores l'aplicació $T(z_1, \dots, z_n) = (a_0, \dots, a_{n-1})$ té jacobià $\prod_{i < j} |z_i - z_j|^2$.

De manera que la mesura de Lebesgue «uniforme» sobre els coeficients es transporta per T a una mesura sobre els zeros amb funció de densitat 0, si dos zeros són iguals.

Això fa que la probabilitat de trobar zeros múltiples sigui zero i que la probabilitat de trobar zeros molt a prop l'un de l'altre sigui molt petita, ja que els coeficients dels polinomis són variables independents i localment la mesura de probabilitat és uniforme en els coeficients.

Intentem veure ara per què els zeros dels polinomis de Weyl es distribueixen de forma aparent en un disc. La manera més simple d'entendre això és estudiar la distribució en mitjana dels zeros. És el que es coneix com a *primera intensitat del procés de punts*.

4.2 La primera intensitat

Suposem que tenim una funció aleatòria de la forma

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} m_k \mathbf{a}_k z^k,$$

on m_k són coeficients (deterministes) prefixats i $\mathbf{a}_k$ variables aleatòries independents, $\mathbf{a}_k \simeq N_{\mathbb{C}}(0, 1)$. La primera intensitat ρ és la mesura mitjana dels punts.

Més formalment, per a cada realització dels zeros $z_1, z_2, \dots$, anomenem μ a la mesura empírica dels zeros: $\mu = \sum_i \delta_{z_i}$, on δ_{z_i} és la delta de Dirac en el

punt $\mathbf{z}_i$. Podem definir *la primera intensitat* ρ per dualitat com una mesura actuant sobre funcions contínues a suport compacte:

$$\int h d\rho := \mathbb{E} \int h d\boldsymbol{\mu}, \quad h \in C_c(\mathbb{C}),$$

on $\mathbb{E}$ denota l'esperança. Per tant, podem interpretar que $\rho = \mathbb{E}(\boldsymbol{\mu})$. Volem calcular ρ , que ens donarà una primera aproximació en mitjana de la distribució dels zeros.

Vegem ara una fórmula explícita per a ρ . Prenem $f_n(z) = m_k z^k$ i definim

$$K(z, w) = \sum_n f_n(z) \overline{f_n(w)}.$$

Observem que, si (f_n) és una base ortonormal de funcions d'un espai de Hilbert de funcions holomorfes amb nucli reproductor, aleshores K coincideix amb el seu nucli reproductor, *i. e.* $f(z) = \langle f(w), K(z, w) \rangle$. És oportú remarcar que no necessàriament (f_n) ha de ser la base ortonormal de cap espai de Hilbert, potser ni tan sols són independents. Però, en el cas de polinomis de Kac o en els de Weyl, sí que ho són, com ja hem indicat.

TEOREMA 2 (FÓRMULA D'EDELMAN-KOSTLAN). *Es compleix*

$$\rho = \frac{1}{4\pi} \Delta \log K(z, z).$$

PROVA. Presentem una prova simplificada deguda a Sodin; vegeu [13]. Sabem que, per a tota $f \in \mathcal{H}(\mathbb{C})$,

$$\frac{1}{2\pi} \Delta \log |f| = \sum_{z_i: f(z_i)=0} \delta_{z_i}.$$

Prenem ara $\mathbf{f}$ aleatòria $\mathbf{f}(z) = \sum_n \mathbf{a}_n m_n z^n = \sum_n \mathbf{a}_n f_n(z)$.

$$\mathbb{E}(\boldsymbol{\mu}) = \mathbb{E} \left(\sum \delta_{z_i} \right) = \frac{1}{4\pi} \mathbb{E} \left(\Delta \log |\mathbf{f}|^2 \right),$$

$$\mathbb{E} \left(\Delta \log |\mathbf{f}|^2 \right) = \Delta \mathbb{E} \log |\mathbf{f}|^2.$$

Utilitzant ara que $\mathbf{f}(z)$ és una variable gaussiana amb mitjana 0, es veu immediatament que la variància és $K(z, z)$.

$$\mathbb{E} |\mathbf{f}|^2 = \sum_n |f_n(z)|^2 = K(z, z).$$

Per tant, si $\mathbf{a}$ és una variable aleatòria amb distribució $N_{\mathbb{C}}(0, 1)$, tenim

$$\Delta \mathbb{E} \log |\mathbf{f}|^2 = \Delta \mathbb{E} \log |\mathbf{a}|^2 + \Delta \mathbb{E} \log K(z, z) = \Delta \log K(z, z),$$

atès que $\mathbf{a}$ és independent de z i $\mathbb{E} \log |\mathbf{a}|^2$ és constant i, per tant, harmònica. D'altra banda, $K(z, z)$ és determinista. $\square$

Recordem el cas particular dels polinomis de Weyl:

$$p_n(z) = \frac{a_0}{\sqrt{0!}} + \frac{a_1}{\sqrt{1!}}z + \cdots + \frac{a_n}{\sqrt{n!}}z^n.$$

Ara,

$$K_n(z, z) = \sum_{k=0}^n \frac{|z|^2}{k!} = \frac{\Gamma(n+1, |z|^2)}{\Gamma(n+1)} e^{|z|^2}.$$

Per la fórmula d'Edelman-Kostlan, la primera intensitat dels polinomis de Weyl és:

$$\rho_n(z) = \frac{1}{4\pi} \Delta(\log |\Gamma(n+1, |z|^2)|) + \frac{1}{\pi}.$$

Ginibre a [2] va calcular la primera intensitat del conjunt de Ginibre (matrius amb entrades gaussianes) i resulta:

$$\tilde{\rho}_n(z) = \Gamma(n, |z|^2) / (\pi \Gamma(n)).$$

Aquestes dues intensitats són funcions radials que tenen una transició molt ràpida d'1 a 0, com veiem en la figura 9. En particular, els zeros dels polinomis de Weyl tenen una transició lleugerament més lenta que els valors propis.

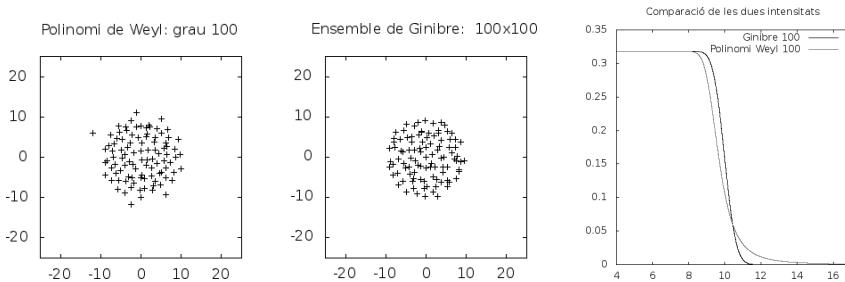


FIGURA 9

El tercer gràfic de la figura 9 explica, per tant, per què veiem algun zero més en els polinomis de Weyl que en el conjunt de Ginibre fora del disc on es concentren.

5 Punts crítics i zeros

En els polinomis aleatoris, no només s'estudia la distribució dels zeros, sinó que també s'han estudiat, per exemple, els punts crítics. Un exemple el trobem en l'estudi dels polinomis el·líptics fet per Hanin a [3].

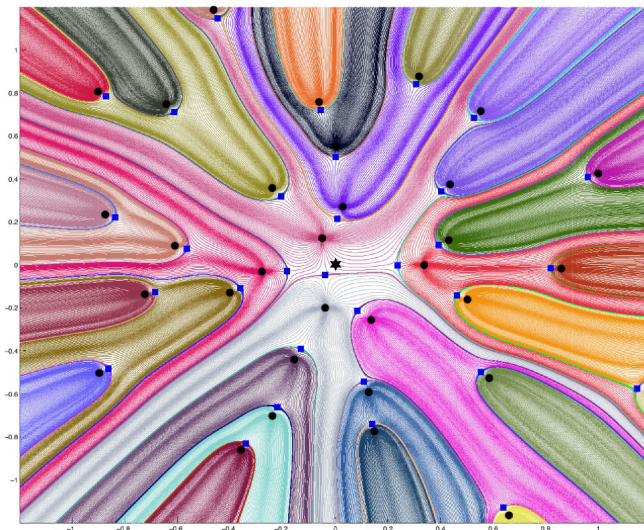


FIGURA 10: Zeros i punts crítics de polinomis aleatoris, cortesia de Boris Hanin.

5.1 Els polinomis el·líptics

Considerem els polinomis p_n de la forma:

$$p_n(z) = a_0 \sqrt{\binom{n}{0}} + a_1 \sqrt{\binom{n}{1}} z + \cdots + a_n \sqrt{\binom{n}{n}} z^n.$$

Els zeros es distribueixen en $\mathbb{C}$ de manera que, si fem la projecció estereogràfica, queden distribuïts uniformement en l'esfera unitat.

Comparats amb la distribució dels zeros dels polinomis de Weyl, que tendien cap a una distribució de punts invariant per translacions, la distribució dels zeros dels polinomis el·líptics és invariant per transformacions de Möbius. Per justificar aquest fet, podríem calcular la primera intensitat dels zeros dels polinomis el·líptics mitjançant la fórmula d'Edelman-Kostlan, i la intensitat resulta ser un múltiple de $(1 + |z|^2)^{-2}$. Aquesta mesura és la mesura de Lebesgue en l'esfera transportada al pla per la projecció estereogràfica i, per tant, és invariant per les transformacions de Möbius. Això no acaba de justificar del tot que els zeros siguin invariants, ja que només ho hem vist per a la primera intensitat (la mitjana dels zeros és invariant). Però hi ha un resultat sorprenent de rigidesa dels zeros de funcions analítiques gaussianes (vegeu [13, teorema 2]) que implica que totes les propietats estadístiques dels zeros queden determinades per la primera intensitat, en particular, la invariància.

Comparem els zeros dels polinomis i els punts crítics com es veu en la figura 10, on els punts crítics estan representats per un quadrat i els zeros,

per un punt. L'origen està representat per un estel. S'hi observa que, si ens allunyem de l'origen, els zeros i els punts crítics es troben aparellats i, de fet, si mesurem la distància entre ells, és aproximadament $1/n$, on n és el grau del polinomi. Intentem donar ara una explicació d'aquest fet. Per fer-ho, una idea potent és buscar un model físic del problema matemàtic; això permet guanyar intuïció i l'argument que donem es pot formalitzar fins a una prova rigorosa, que podeu trobar a [3], per exemple.

5.2 Heurística electrostàtica

Donem una justificació heurística de l'aparellament de zeros i punts crítics:

- Es pot veure que, amb probabilitat un, els zeros són separats, i un petit càlcul utilitzant la fórmula d'Edelman-Kostlan indica que es distribueixen uniformement en l'esfera de Riemann, un cop feta la projecció estereogràfica.
- Considerem el potencial electrostàtic aleatori $\mathbf{u} = \frac{1}{2\pi} \log |\mathbf{p}_n|$. Es compleix $\Delta \mathbf{u} = \sum_{j=1}^n \delta_{\mathbf{a}_j} - n\delta_{\infty}$. Això s'interpreta com un camp electrostàtic en l'esfera de Riemann generat per n càrregues positives situades en els zeros del polinomi aleatori i una càrrega negativa de pes n en el pol nord (que correspon al punt de l'infinit).
- Un punt crític del polinomi correspon a un punt on el gradient del potencial electrostàtic s'anulla, és a dir, a un punt d'equilibri del camp elèctric.

En un punt d'equilibri, hi actuen tres tipus de forces que s'han de compensar:

- La força de la càrrega negativa del punt de l'infinit. És proporcional a n .
- La força de la càrrega positiva de la partícula aleatòria més propera. És proporcional a $1/r$, on r és la distància a la partícula.
- La força de les altres càrregues. Aquestes estan distribuïdes «uniformement» al voltant del punt d'equilibri, i una variant del teorema central del límit permet veure que aquesta força és proporcional a $\sqrt{n}$, és a dir, negligible respecte a la força de la càrrega provinent del pol Nord.

Per tant, per compensar totes les càrregues, cal que la càrrega positiva més propera al punt crític estigui a una distància $1/n$ i, aproximadament, en el segment que uneix el punt crític i l'origen.

Aquest raonament heurístic es trenca a prop de l'origen (el pol Sud, en la representació estereogràfica), on la força exercida per la càrrega del pol Nord és zero. Efectivament, s'observa que l'aparellament de zeros i punts crítics es trenca a prop de l'origen.

Aquest punt resulta curiós, perquè, d'entrada, hàviem comentat que els zeros eren invariants per transformacions de Möbius. L'explicació és que, en definir els punts crítics, estem privilegiant l'origen.

6 Sèries de Dirichlet aleatòries

Vegem, finalment, com l'estudi dels zeros de funcions aleatòries no es redueix a sèries de potències, sinó que també es pot estendre a sèries de Dirichlet aleatòries. La curiositat que fem notar a continuació és deguda a Helson (vegeu [5]) i està desenvolupada a [4]. Considerem la funció següent:

$$f(s) = \sum_{n \geq 1} \chi(n) n^{-s},$$

on $\chi: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{T} = \{z \in \mathbb{C}, |z| = 1\}$ és un caràcter aleatori. Un caràcter satisfà $\chi(n \cdot m) = \chi(n) \cdot \chi(m)$. Per tant, si prescrivim el valor de χ sobre els primers: $\chi(2), \chi(3), \chi(5), \dots$, determinem χ de forma única.

La probabilitat que introduïm en l'espai de caràcters és la següent: prenem $\chi(2)$ un punt de $\mathbb{T}$ amb distribució uniforme. Independentment, $\chi(3)$ també amb distribució uniforme, i així amb tots els primers.

Identifiquem, doncs, els caràcters amb punts de $\mathbb{T}^\infty$ i introduïm a $\mathbb{T}^\infty$ la mesura de probabilitat producte. De la mateixa manera que havíem fet amb les sèries de potències aleatòries, podem considerar uns pesos a_n deterministes i la funció aleatòria

$$f(s) = \sum_{n \geq 1} a_n \chi(n) n^{-s}.$$

6.1 La hipòtesi de Riemann quasi segurament

Diem que (a_n) és totalment multiplicativa, si $a_1 = 1$ i $a_{nm} = a_n a_m$ per a tot n, m . Per a qualsevol $a > 0$, el semiplà $\Re(z) > a$ es denota per $\mathbb{C}_a^+$. Helson va provar el teorema següent:

TEOREMA 3. *Si (a_n) és totalment multiplicativa i de ℓ_2 , aleshores la sèrie $f_\chi(s) = \sum_n a_n \chi(n) n^{-s}$ és convergent quasi segurament cap a una funció sense zeros a $\mathbb{C}_0^+$.*

Una conseqüència gairebé immediata aplicant el teorema anterior a $a_n = n^{-1/2-\varepsilon}$ per a qualsevol $\varepsilon > 0$ és

COROLLARI 4 (HELSON). *Quasi segurament la funció de Riemann ζ_χ*

$$\zeta_\chi(s) = \sum_n \chi(n) n^{-s}$$

és convergent a $\mathbb{C}_{1/2}^+$ i no té zeros a $\mathbb{C}_{1/2}^+$.

Agraïments

L'autor agraeix el suport del projecte del Ministeri d'Economia i Competitivitat MTM2014-51834-P i del projecte 2014-SGR-289 de la Generalitat de Catalunya.

Referències

- [1] BERMAN, R. J. «Determinantal point processes and fermions on complex manifolds: large deviations and bosonization». *Comm. Math. Phys.*, 327 (1) (2014), 1–47.
- [2] GINIBRE, J. «Statistical ensembles of complex, quaternion, and real matrices». *J. Mathematical Phys.*, 6 (1965), 440–449.
- [3] HANIN, B. «Correlations and pairing between zeros and critical points of Gaussian random polynomials». *Int. Math. Res. Not. IMRN*, 2015 (2) (2015), 381–421.
- [4] HEDENMALM, H.; LINDQVIST, P.; SEIP, K. «A Hilbert space of Dirichlet series and systems of dilated functions in $L^2(0, 1)$ ». *Duke Math. J.*, 86 (1) (1997), 1–37.
- [5] HELSON, H. «Compact groups and Dirichlet series». *Ark. Mat.*, 8 (1969), 139–143.
- [6] HOUGH, J. B.; KRISHNAPUR, M.; PERES, Y.; VIRÁG, B. *Zeros of Gaussian analytic functions and determinantal point processes*. Providence: American Mathematical Society, 2009. (University Lecture Series; 51)
- [7] KAC, M. «On the average number of real roots of a random algebraic equation». *Bull. Amer. Math. Soc.*, 49 (1943), 314–320.
- [8] KAHANE, J.-P. *Some random series of functions*. 2a ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1985. (Cambridge Studies in Advanced Mathematics; 5)
- [9] LITTLEWOOD, J. E.; OFFORD, A. C. «On the distribution of zeros and a -values of a random integral function. II». *Ann. of Math. (2)*, 49 (1948), 885–952; errata 50 (1949), 990–991.
- [10] MEHTA, M. L. *Random matrices*. 3a ed. Amsterdam: Elsevier: Academic Press, 2004. (Pure and Applied Mathematics (Amsterdam); 142)
- [11] MONTGOMERY, H. L. «The pair correlation of zeros of the zeta function». A: *Analytic number theory* (Proc. Sympos. Pure Math., vol. XXIV, St. Louis Univ., St. Louis, Mo., 1972). Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1973, 181–193.
- [12] ODLYZKO, A. M. «On the distribution of spacings between zeros of the zeta function». *Math. Comp.*, 48 (177) (1987), 273–308.
- [13] SODIN, M. «Zeros of Gaussian analytic functions». *Math. Res. Lett.*, 7 (4) (2000), 371–381.

English summaries

Joaquim Bruna

Non-linear approximation and compressive sampling

In this paper we give an introduction to relatively new field in mathematics, the so called compressed sensing or compressive sampling. It can be presented as a branch of signal analysis, whose appearance is related to another important field, big data analysis. Compressed sensing does not deal with processing big data sets, but rather with sampling methods that do not lead to unnecessary data. For the sake of the exposition we briefly refer as well to non linear approximation theory.

Keywords: discretisation, linear approximation, non-linear approximation, Hilbert basis, compressive sampling, sparse vectors, decodificator, random matrices, non-coherent bases.

MSC2010 Subject Classification: 94A12, 68P30, 41A46.

Pilar Guerrero and Tomás Alarcón

Stochastic multiscale models of cell population dynamics: asymptotic and numerical methods

In this paper we present a new methodology that allows us to formulate and analyse stochastic multiscale models of the dynamics of cell populations. In the spirit of existing hybrid multiscale models, we set up our model in a hierarchical way according to the characteristic time scales involved, where the stochastic population dynamics is governed by the birth and death rates as prescribed

by the corresponding intracellular pathways (e.g. stochastic cell-cycle model). The feed-back loop is closed by the coupling between the dynamics of the population and the intracellular dynamics via the concentration of oxygen: Cells consume oxygen which, in turn, regulate the rate at which cells proceed through their cell-cycle. The coupling between intracellular and population dynamics is carried out through a novel method to obtain the birth rate from the stochastic cell-cycle model, based on a mean-first passage time approach. Cell proliferation is assumed to be activated when one or more of the proteins involved in the cellcycle regulatory pathway hit a threshold. This view allows us to calculate the birth rate as a function of the age of the cell and the extracellular oxygen in terms of the corresponding meanfirst passage time. We then proceed to formulate the stochastic dynamics of the population of cells in terms of an age-structured Master Equation. Further, we have developed generalisations of asymptotic (WKB) methods for our age-structured Master Equation as well as a τ -leap method to simulate the evolution of our age-structured population. Finally, we illustrate this general methodology with a particular example of a cell population where progression through the cell-cycle is regulated by the availability of oxygen.

Keywords: multiscale modelling, stochastic modelling, cancer, cell-cycle.

MSC2010 Subject Classification: 92B05.

Timothy G. Myers and Sarah L. Mitchell

A mathematical analysis of the motion of an in-flight soccer ball

In this paper an analytical and numerical study of the three-dimensional equations describing the motion through the air of a spinning ball is presented. The initial analysis involves constant drag coefficients but is later extended to involve drag varying with the spin ratio. Excellent agreement is demonstrated between numerical and analytical results. The analytical solution shows explicitly how the balls motion depends on parameters such as ball roughness, velocity and atmospheric conditions. The importance of applying three-dimensional models, rather than two-dimensional approximations, is demonstrated.

Keywords: aerodynamics, soccer ball flight, spinning soccer ball, Magnus force, perturbation solution.

MSC2010 Subject Classification: 34L30, 76G25.

Joaquim Ortega-Cerdà

(Random) power series

The construction of random functions with interesting properties is a classical subject in Mathematics. Lately, there has been a renewed interest in the random zeros of polynomials and of entire functions spurred in part by the growing literature on the spectrum of random matrices.

Keywords: Random polynomials, Gaussian analytic functions.

MSC2010 Subject Classification: 30B20, 26C10, 30C15, 15B52.

Instruccions per als autors

Els articles sotmesos a publicació s'han d'enviar als editors o a qualsevol membre del comitè editorial, per correu electrònic, preferentment en format PDF. Els originals han de contenir la versió anglesa del títol, un resum breu en català i en anglès, paraules clau en català i en anglès i els codis de la classificació per matèries MSC2010.

Les versions definitives dels articles acceptats s'han de presentar en codi $\text{\TeX}$, preferentment en l'estil $\text{\LaTeX}$ propi del BUTLLETÍ. Aquest estil es pot obtenir a les pàgines web de la Societat Catalana de Matemàtiques (SCM). Fem notar que en aquesta publicació s'utilitza preferentment el punt per a separar decimals, en lloc de la coma recomanada per l'IEC, per poder facilitar la comprensió de les expressions matemàtiques. Per tal d'accelerar el procés de producció, es prega als autors que segueixin les indicacions contingudes en el document d'exemple.

La versió en paper del BUTLLETÍ s'imprimeix en blanc i negre. Quan un article contingui figures en color i es consideri convenient, l'autor proporcionarà una versió dels gràfics substituint el color per tons de grisos i línies de gruix variable. Així mateix modificarà els comentaris que facin referència al color de les figures. En qualsevol cas el BUTLLETÍ publicarà l'original en color en el seu format electrònic.

Els autors dels articles publicats al BUTLLETÍ en retenen el dret de còpia (*copyright*) i autoritzen l'IEC a difondre'ls, tant a través de la publicació impresa com mitjançant els portals digitals propis o d'altres amb què s'estableixin els convenis oportuns a aquest efecte. És responsabilitat dels autors assegurar que es disposa dels drets de reproducció dels gràfics i de les figures que hi apareguin. Cada autor rebrà una còpia en PDF d'alta qualitat de la versió digital del seu article i un exemplar imprès del número del BUTLLETÍ en el qual es publiqui.

La correspondència administrativa relacionada amb el BUTLLETÍ s'ha d'adreçar a la SCM.

Comitè editorial

Julià Cufí (editor en cap)
Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
jcufi@mat.uab.cat

Bartomeu Coll
Dep. de Matemàtiques i Informàtica
Universitat de les Illes Balears
tomeu.coll@uib.cat

Núria Fagella
Dep. de Matemàtica Aplicada i Anàlisi
Universitat de Barcelona
fagella@maia.ub.es

Josep Maria Font
Dep. de Probabilitats, Lògica i Estadística
Universitat de Barcelona
jmfont@ub.edu

Armengol Gasull
Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
gasull@mat.uab.cat

Gábor Lugosi
ICREA i Departament d'Economia
Universitat Pompeu Fabra
gabor.lugosi@upf.edu

Rosa Camps (editora adjunta)
Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
rcamps@mat.uab.cat

Jorge Mateu
Departament de Matemàtiques
Universitat Jaume I
mateu@mat.uji.es

Marc Noy
Departament de Matemàtica Aplicada II
Universitat Politècnica de Catalunya
marc.noy@upc.edu

Francesc Planas
Departament de Matemàtica Aplicada I
Universitat Politècnica de Catalunya
francesc.planas@upc.edu

Agustí Reventós
Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
agusti@mat.uab.cat

Marta Sanz-Solé
Dep. de Probabilitats, Lògica i Estadística
Universitat de Barcelona
marta.sanz@ub.edu



Societat Catalana de Matemàtiques

La **Societat Catalana de Matemàtiques (SCM)** és una societat filial de l'Institut d'Estudis Catalans, que continua les activitats de la Secció de Matemàtiques de la Societat Catalana de Ciències, que fou fundada per l'Institut l'any 1931. Les finalitats de la **SCM** són: el conreu de les ciències matemàtiques, l'extensió del seu coneixement en la societat catalana, el foment del seu ensenyament i de la seva investigació teòrica i aplicada, així com la publicació de tota mena de treballs que s'adeqüin a aquests objectius. La **SCM** desenvolupa les seves activitats en les terres de llengua i cultura catalanes. El català és, doncs, la llengua pròpia de la **SCM** i la que és usada normalment en tots els seus actes i publicacions.

La **SCM** edita les publicacions periòdiques *SCM/Notícies* i *Butlletí de la Societat Catalana de Matemàtiques*. Els socis de la **SCM** reben, gratuïtament, aquestes dues publicacions.

La **SCM** té convenis de reciprocitat amb diverses societats matemàtiques d'arreu del món, mitjançant els quals els socis de la **SCM** obtenen una reducció en la quota de soci d'aquestes societats. Així mateix, els socis de la **SCM** poden fer-se socis de la Societat Matemàtica Europea pagant una quota complementària.

La Junta Directiva de la **SCM** està constituïda per les persones següents:

PRESIDENT: Xavier Jarque i Ribera

VICEPRESIDENT: Enric Ventura i Capell

ADJUNTA DE LA VICEPRESIDÈNCIA: Iolanda Guevara i Casanova

SECRETARI: Albert Ruiz i Cirera

TRESORERA: Natàlia Castellana i Vila

VOCALS: Núria Fagella i Rabionet, Josep Grané i Manlleu, Agustí Reventós i Tarrida, Carles Romero i Chesa, Oriol Serra i Albó, Esther Silberstein, Manel Udina i Abelló

DELEGAT DE L'IEC: Joan Girbau i Badó

L'adreça de la **SCM** és carrer del Carme, 47, 08001 Barcelona. Telèfon: 933 248 583. Fax: 932 701 180. Correu electrònic: scm@iec.cat. Adreça web: <http://scm.iec.cat>.

El Butlletí de la Societat Catalana de Matemàtiques publica, en llengua catalana, exposicions matemàtiques de qualitat, que puguin interessar a un nombre elevat de lectors. Es donarà prioritat a aquells treballs en què destaquin la claredat d'exposició i l'interès general del tema. El Butlletí està obert a tots els camps de la matemàtica i també als aspectes matemàtics de les ciències experimentals, la tecnologia, l'economia, etc., així com a altres àrees, com la història, la didàctica i la filosofia, sempre que els treballs tinguin un component matemàtic important. També tenen cabuda al Butlletí aquells articles que desenvolupin un aspecte significatiu de la problemàtica de la professió matemàtica al nostre país.

El Butlletí publica un volum a l'any, dividit en dos números, que es trameten gratuïtament a tots els socis. El Butlletí es publica també en format electrònic. L'edició electrònica del Butlletí pot obtenir-se des del portal de revistes científiques en línia de l'IEC o al servidor <http://scm.iec.cat>.

La correspondència administrativa s'ha d'adreçar a la Societat Catalana de Matemàtiques.

Editor en cap _____

Julia Cufí

Departament de Matemàtiques

Universitat Autònoma de Barcelona

Editora adjunta _____

Rosa Camps

Departament de Matemàtiques

Universitat Autònoma de Barcelona

Comitè editorial _____

Bartomeu Coll

Dep. de Matemàtiques i Informàtica

Universitat de les Illes Balears

Jorge Mateu

Departament de Matemàtiques

Universitat Jaume I

Núria Fagella

Dep. de Matemàtica Aplicada i Anàlisi

Universitat de Barcelona

Marc Noy

Departament de Matemàtica Aplicada II

Universitat Politècnica de Catalunya

Josep Maria Font

Dep. de Probabilitats, Lògica i Estadística

Universitat de Barcelona

Francesc Planas

Departament de Matemàtica Aplicada I

Universitat Politècnica de Catalunya

Armengol Gasull

Departament de Matemàtiques

Universitat Autònoma de Barcelona

Agustí Reventós

Departament de Matemàtiques

Universitat Autònoma de Barcelona

Gábor Lugosi

ICREA i Departament d'Economia

Universitat Pompeu Fabra

Marta Sanz-Solé

Dep. de Probabilitats, Lògica i Estadística

Universitat de Barcelona

Societat Catalana de Matemàtiques

Carrer del Carme, 47 - 08001 Barcelona

tel. 933 248 583 - fax 932 701 180

scm@iec.cat - <http://scm.iec.cat>