MODELOS MATEMÁTICOS AUTOCONSISTENTES DE GALAXIAS ELÍPTICAS

A. F. Zorzi[♭] y J. C. Muzzio[†]

[♭]*Instituto de Física de Rosario (CONICET Rosario - UNR), Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura (UNR), Observatorio Astronómico Municipal de Rosario (OAMR), zorzi@ifir-conicet.gov.ar*
[†]*Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas (UNLP), Instituto de Astrofísica de La Plata (CONICET La Plata - UNLP), jcmuzzio@fcaglp.unlp.edu.ar*

Resumen: La construcción de modelos matemáticos de sistemas estelares triaxiales autoconsistentes, adecuados para representar galaxias elípticas, es compleja y debe recurrirse a métodos numéricos. El método de N–cuerpos ha adquirido últimamente merecida popularidad para esta tarea y lo hemos utilizado en varios trabajos recientes. Sin embargo, el integrador de N–cuerpos que veníamos empleando no resulta del todo satisfactorio, particularmente en el caso de modelos con fuerte concentración central. En este trabajo presentamos nuevos modelos que hemos construido utilizando el programa de N–cuerpos de [6], que resulta más adecuado para ese f n.

Palabras clave: *métodos numéricos, modelos de galaxias, integradores de N-cuerpos*
2000 AMS Subject Classif cation: 21A54 - 55P54

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los objetivos más importantes de la dinámica de los sistemas estelares es la construcción de modelos matemáticos que describan la morfología y cinemática observada en dichos sistemas, así como también la dinámica de los mismos. El conocimiento de esta última permitirá, entonces, acceder a propiedades no observables directamente (como la masa) e investigar el origen y evolución de dichos sistemas (tampoco observables directamente, en razón de los enormes intervalos de tiempo involucrados). Estos modelos deben ser *autoconsistentes*, es decir, la distribución de materia en los mismos debe generar un potencial gravitatorio tal que las órbitas en dicho potencial generen, a su vez, la distribución de materia original.

En el caso de sistemas simples, como los esféricos (adecuados para representar cúmulos globulares) y discos (adecuados para modelar discos galácticos) es posible obtener soluciones analíticas o que sólo requieren técnicas numéricas habituales (ver, por ejemplo, [4]) pero, para sistemas triaxiales (necesarios para representar galaxias elípticas), resulta indispensable recurrir a métodos numéricos específ cos. En los últimos años ha adquirido popularidad el método que, por brevedad, llamaremos de N–cuerpos. El mismo crea un sistema autoconsistente de partículas, partiendo de una cierta distribución inicial y siguiendo su evolución mediante algún programa de integración de las ecuaciones del movimiento de las partículas interactuantes, hasta alcanzar el equilibrio. Como, aún en equilibrio, el potencial de los N–cuerpos varía con el tiempo (por f uctuaciones estadísticas en la distribución de las partículas) y como presenta discontinuidades (por tratarse de la suma de los potenciales de las partículas individuales), se lo aproxima con alguna función interpolatoria, ahora sí constante y continua. Pueden entonces utilizarse las posiciones y velocidades de las partículas como condiciones iniciales para determinar, por integración numérica, órbitas en dicho potencial y propiedades de las mismas como, por ejemplo, los exponentes de Lyapunov.

Dentro de este esquema general, las técnicas empleadas para generar sistemas de N–cuerpos que den modelos adecuados de galaxias elípticas son variadas. Así, [14], [12], [9], [3], [13] parten de distribuciones esféricas de partículas con baja dispersión de velocidades cuyo colapso, vía la inestabilidad de órbitas radiales, las lleva a una distribución en equilibrio de forma triaxial. Por su parte, [7] parten de una distribución esférica en equilibrio a la que llevan a una forma triaxial, también en equilibrio, distorsionádola mediante fuerzas auxiliares. Finalmente, [8] utilizan los resultados de simulaciones numéricas de colisiones de galaxias.

Debe recordarse que en una galaxia las interacciones partícula - partícula son despreciables, por lo que no son necesarios métodos de N–cuerpos en que las partículas interaccionen individualmente, sino en los que cada partícula se mueva en el campo general promedio creado por las restantes (ver, por ejemplo, [4]).

Por ello, se pref eren aquellos métodos que aproximan el potencial medio con algún desarrollo en serie de funciones adecuadas tales como multipolos en [15], esféricos armónicos y funciones de Bessel en [1], esféricos armónicos y funciones especialmente seleccionadas para representar potenciales galácticos en [6], etc. Como se trabaja con gran número de cuerpos y la precisión requerida no es muy alta, se suelen utilizar integradores relativamente simples como el 'leapfrog', aunque últimamente han ganado popularidad los integradores de Hermite (ver [4]).

2. METODOLOGÍA

Nuestros trabajos anteriores en este tema ([12], [10], [3], [13]) se realizaron utilizando como integrador de N–cuerpos el programa realizado por L.A. Aguilar (ver [2]) que se basa en el desarrollo multipolar de [15]. Como dicho desarrollo es puramente numérico, no se cuenta con una expresión matemática para el potencial, sino que ésta debe obtenerse ajustando los valores numéricos con una función interpolatoria adecuada (ver los trabajos citados). Un inconveniente más grave es que el desarrollo de White necesita 'ablandar' el potencial, lo que diluye rasgos agudos de éste como son las fuertes concentraciones centrales de densidad (cúspides). Lamentablemente, son justamente los modelos cuspidales los más adecuados para la representación de galaxias elípticas (ver, por ejemplo, [11]) y, para lograr construirlos con este sistema, se hace necesario agregar potenciales correctivos que compensen el ablandamiento (ver [13]).

En [6] se recurre también a un desarrollo del potencial, $\Phi(\mathbf{r})$ (donde **r** es el vector posición, cuyas componentes en coordenadas esféricas son r, θ y ϕ), en multipolos:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{nlm} A_{nlm}\Phi_{nlm}(\mathbf{r}) \tag{1}$$

pero se descomponen las partes angulares en esféricos armónicos:

$$\Phi_{nlm}(\mathbf{r}) = -\frac{r^l}{(1+r)^{2l+1}} W_{nl}(\xi)\sqrt{4\pi}Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{2}$$

y la parte radial en un desarrollo en funciones ortogonales, $W_{nl}(\xi)$ (donde $\xi = (r-1) \div (r+1)$), derivadas del potencial de [5], apto para galaxias esféricas:

$$\varphi(r) = -\frac{GM}{r+a} \tag{3}$$

y que corresponde a una distribución de densidad:

$$\rho(r) = \frac{M}{2\pi}\frac{a}{r}\frac{1}{(r+a)^3} \tag{4}$$

donde M es la masa total del sistema y a un factor de escala de longitudes.

O sea, el programa de integración de N–cuerpos de [6] tiene la ventaja, menor, de que nos da directamente la expresión matemática del potencial del sistema de N–cuerpos y la ventaja, mayor, de que se basa en una distribución de densidad cuspidal ya que, para r pequeño, $\rho \propto r^{-1}$.

El programa utiliza un cierto número de términos para el desarrollo angular, l_{max}, y radial, n_{max}, y determina los parámetros del desarrollo a partir de las coordenadas de los N–cuerpos. Tiene la ventaja, respecto de otros como el de [2], de no necesitar ablandamiento. Las ecuaciones del movimiento se integran, como se indicó, con un método 'leapfrog' y obviamente, para mantener la autoconsistencia, los parámetros del desarrollo del potencial se vuelven a calcular a medida que van variando las posiciones de los cuerpos.

Excepción hecha del programa de integración de N–cuerpos, creamos los sistemas utilizando la misma metodología de [3]. Esto es, se parte de una distribucin inicial esférica de 1.000.000 de cuerpos, con densidad creciente hacia el centro segn r^{-1} y distribución de velocidades Gaussiana y se sigue su colapso con el programa de [6] durante 6.5 unidades de tiempo (u.t. en lo que sigue). Se eliminan las partículas con energía positiva (o sea, las no ligadas) y se rota el sistema elipsoidal resultante de forma tal que su eje mayor coincida con el eje x, el intermedio con el y y el menor con el z. Se deja evolucionar el sistema durante 300 tiempos de cruce (T_{cr} en lo que sigue, su valor depende cada modelo, pero es del orden de 0.5u.t.), se elimina un 2 % o 3 % de las partículas más débilmente ligadas (ya que tardarían demasiado tiempo en llegar al equilibrio), se vuelven a orientar los ejes del elipsoide con los del sistema de coordenadas y se evoluciona otras $100T_{cr}$ para obtener así el sistema f nal.

3. Resultados

La Tabla 1 presenta las principales características de los modelos obtenidos. Los mismos se han creado eligiendo diferentes valores para el número máximo de términos en el desarrollo angular, l_{max}, y radial, n_{max}. Variando el número semilla del generador de números al azar utilizado para crear las condiciones iniciales se han generado tres modelos distintos para cada caso y los valores dados en la tabla corresponden a los valores promedio de esos tres modelos junto con los errores medios de dichos promedios. Utilizando sólo el 80 % de partículas más fuertemente ligadas, se han calculado los semiejes de cada modelo como las raíces cuadradas de los valores cuadráticos medios en cada coordenada, y la Tabla 1 da las relaciones de semieje intermedio a mayor (y/x) y de semieje menor a mayor (z/x). La importancia de la cúspide la mide el parámetro γ (donde $\rho \propto r^{-\gamma}$), evaluado a partir de las partículas de 201 a 10.200 más próximas al centro, subdivididas en intervalos de 100 partículas para el cómputo de la densidad. No se toman en cuenta las primeras 200 partículas porque suele producirse un leve amesetamiento muy cerca del centro el que podría deberse a qué, como se utiliza un potencial promedio, el mismo resulta implícitamente un tanto ablandado aún cuando el método de [6] no introduzca ablandamiento explícito. De hecho, con métodos que incluyen ablandamiento explícito, el amesetamiento central es mucho mayor y, para obtener distribuciones cuspidales, es necesario compensarlo con correcciones adicionales como hacen [13].

Tabla 1
Propiedades de los modelos obtenidos.

l_{max}	n_{max}	y/x	z/x	γ
2	8	$0{,}663 \pm 0{,}008$	$0{,}435 \pm 0{,}003$	$1{,}08 \pm 0{,}05$
3	6	$0{,}787 \pm 0{,}032$	$0{,}590 \pm 0{,}019$	$0{,}76 \pm 0{,}11$
3	8	$0{,}863 \pm 0{,}031$	$0{,}685 \pm 0{,}040$	$0{,}63 \pm 0{,}04$
3	10	$0{,}689 \pm 0{,}031$	$0{,}496 \pm 0{,}033$	$0{,}66 \pm 0{,}02$
4	4	$0{,}767 \pm 0{,}022$	$0{,}491 \pm 0{,}005$	$1{,}00 \pm 0{,}05$
4	5	$0{,}768 \pm 0{,}014$	$0{,}498 \pm 0{,}001$	$0{,}94 \pm 0{,}03$
4	6	$0{,}809 \pm 0{,}003$	$0{,}510 \pm 0{,}003$	$1{,}02 \pm 0{,}00$
4	7	$0{,}810 \pm 0{,}004$	$0{,}521 \pm 0{,}009$	$0{,}72 \pm 0{,}25$
4	8	$0{,}779 \pm 0{,}002$	$0{,}495 \pm 0{,}004$	$1{,}04 \pm 0{,}01$
4	10	$0{,}756 \pm 0{,}006$	$0{,}496 \pm 0{,}003$	$0{,}68 \pm 0{,}06$
5	8	$0{,}924 \pm 0{,}016$	$0{,}738 \pm 0{,}041$	$0{,}89 \pm 0{,}01$
6	8	$0{,}861 \pm 0{,}044$	$0{,}596 \pm 0{,}081$	$0{,}69 \pm 0{,}07$

4. Conclusiones

Si bien los modelos obtenidos muestran cierta tendencia a arrojar mayores valores de y/x y de z/x al crecer l_{max}, aquellos con l_{max} par tienden a dar valores menores que los con l_{max} impar. Esto está de acuerdo con la indicación de [10] en el sentido de que los primeros tienen mayor sensibilidad a la inestabilidad del modo barra.

Los errores medios de los promedios son apreciables en algunos casos, lo que indica que modelos con exactamente los mismos parámetros de la esfera inicial de partículas, cuya evolución fue seguida con el programa de [6] utilizando exactamente los mismos valores de l_{max} y n_{max}, y que sólo dif eren en los números semilla utilizados para crear al azar la distribución inicial de partículas, dan modelos con propiedades macroscópicas que presentan diferencias signif cativas. Este fenómeno está sin duda vinculado al hecho de que la obtención de un sistema triaxial a partir del colapso de una distribución esférica se debe a una $inestabilidad$, la 'inestabilidad de barra' como indican [2], por lo que los resultados de este proceso son menos homogéneos que los de procesos menos violentos. Cabe esperar, sin embargo, que así como los casos con l_{max} par son más sensibles a la inestabilidad, se puedan encontrar combinaciones de l_{max} y n_{max} para las que se minimice la diversidad de resultados obtenidos con diferentes números semilla.

Afortunadamente así es y la Tabla muestra varios casos con bajos errores, en particular, la mayoría de los que corresponden a $l_{max} = 4$. Además, excepción hecha de los casos con $n_{max} = 7$ y $n_{max} = 10$, los casos con $l_{max} = 4$ arrojan valores de γ próximos a 1, es decir, nos brindan modelos cuspidales, tal como deseábamos obtener. Por otra parte, se trata de sistemas fuertemente achatados y triaxiales. El caso $l_{max} = 4$ y $n_{max} = 6$, por ejemplo, con un $z/x = 0{,}510$, corresponde a una galaxia elíptica de tipo E5 de Hubble y tiene una triaxialidad ($T = (1 - (y/x)^2)/(1 - (z/x)^2)$) de 0.467, muy próxima a la triaxialidad máxima, esto es, $T = 0{,}5$.

En conclusión, si bien es necesario controlar que modelos generados con los mismos parámetros y distintos números semilla den resultados similares y que los sistemas obtenidos sean realmente cuspidales, el programa de [6] resulta muy adecuado para crear modelos de galaxias fuertemente triaxiales y cuspidales, tal como era nuestro propósito.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. L. Hernquist por facilitarnos su programa de integración de N–cuerpos y a los Lics. R.E. Martínez y H.R. Viturro y al Dr. H.D. Navone por su valiosa ayuda. A las Universidades Nacionales de La Plata y Rosario, al CONICET y a la Agencia Nacional de Promoción Científ ca y Tecnológica, que proveyeron los fondos necesarios para esta investigación. Los cómputos fueron realizados con el 'cluster' de 24 procesadores Athena, del Instituto de Astrofísica de La Plata (IALP).

REFERENCIAS

[1] A.J. ALLEN, P.L. PALMER AND J. PAPALOIZOU, *A conservative numerical technique for colissionless dynamical systems: comparison of the radial and circular orbit instabilities*, Mon. Not. Royal Astron. Soc., 242 (1990), pp. 576-594.

[2] L.A. AGUILAR, AND D. MERRITT, *The structure and dynamics of galaxies formed by cold dissipationless collapse*, Astrophys. J., 354 (1990), pp. 33-51.

[3] R. O. AQUILANO, J.C. MUZZIO, H.D. NAVONE AND A.F. ZORZI, *Orbital structure of self–consistent triaxial stellar systems*, Celest. Mech. and Dynam. Astron., 99 (2007), pp. 307-324.

[4] J. BINNEY AND S. TREMAINE, *Galactic Dynamics*, Princeton University Press, 2008.

[5] L. HERNQUIST, *An analytical model for spherical galaxies and bulges*, Astrophys. J., 356 (1990), pp. 359-364.

[6] L. HERNQUIST AND J.P. OSTRIKER, *A self–consistent field method for galactic dynamics*, Astrophys. J., 386 (1992), pp. 375-397.

[7] K. HOLLEY-BOCKELMANN, J.C. MIHOS, S. SIGURDSSON AND L. HERNQUIST, *Models of cuspy traixial galaxies*, Astrophys. J., 549 (2001), pp. 862-870.

[8] R. JESSEIT, T. NAAB AND A. BURKERT, *Orbital structure of collisionless merger remnants: on the origin of photometric and kinematic properties of elliptical and S0 galaxies*, Mon. Not. Royal Astron. Soc., 360 (2005), pp. 1185-1200.

[9] C. KALAPOTHARAKOS AND N. VOGLIS, *Global dynamics in self–consistent models of elliptical galaxies*, Celest. Mech. Dynam. Astron., 92 (2005), pp. 157-188.

[10] T.A. MCGLYNN, *Dissipationless collapse of galaxies and initial conditions* Astrophys. J., 281 (1984), pp. 13-30.

[11] D. MERRITT AND T. FRIDMAN, *Triaxial galaxies with cusps*, Astrophys. J., 460 (1996), 136-162.

[12] J.C. MUZZIO, D.D. CARPINTERO AND F.C. WACHLIN, *Spatial structure of regular and chaotic orbits in a self–consisten triaxial stellar system*, Celest. Mech. and Dynam. Astron., 91 (2005), pp. 173-190

[13] J.C. MUZZIO, H.D. NAVONE AND A.F. ZORZI, *Orbital structure of self–consistent cuspy triaxial stellar systems*, Celest. Mech. and Dynam. Astron. (2009), enviado a publicar.

[14] N. VOGLIS, C. KALAPOTHARAKOS AND I. STAVROPOULOS, *Mass components in ordered and chaotic motion in galactic N–body models*, Mon. Not. Royal Astron. Soc., 337 (2002), pp. 619-633.

[15] S.D.M. WHITE, *Simulations of sinking satellites*, Astroph. J., 274 (1983), pp. 53-61.

INCORPORACIÓN DE DECISIONES BINARIAS CRUZADAS EN LA ELECCIÓN DEL CONSUMO DE LÁCTEOS EN UN MODELO LA/AIDS

Rodrigo García Arancibia†, Gustavo Rossini‡ y Edith Depetris Guiguet†‡

† Departamento de Economía, Facultad de Ciencias Económicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, rgarcia@fce.unl.edu.ar
‡ Departamento de Economía, Facultad de Ciencias Económicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, grossini@fce.unl.edu.ar
†‡ Departamento de Economía, Facultad de Ciencias Económicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, eguiguet@fce.unl.edu.ar

Resumen: El presente trabajo tiene como objetivo mostrar la relevancia sobre las estimaciones de las elasticidades precio y gasto de la demanda, cuando se considera la interacción cruzada entre las elecciones binarias en una primera etapa del proceso de estimación en dos etapas de sistemas de demanda censurados. Para ello se modela la elección binaria con un Probit Multivariado, tomando tales resultados en la segunda etapa para la estimación de los parámetros del modelo LA/AIDS. El análisis está aplicado al consumo de productos lácteos en Argentina, fundamentado en la posible dependencia de la elección de consumo entre pares de productos lácteos al momento en que una familia evalúa las componentes de su dieta. Las conclusiones se basan en las diferencias encontradas entre un modelo que considera tales correlaciones y otro alterno que supone la independencia entre las elecciones de consumir o no el bien.

Palabras claves: Probit Multivariado – LA/AIDS – Consumo de Lácteos
2000 AMS Subjects Classification: 62N01- 91G70- 91B42

1. INTRODUCCIÓN

Para la estimación de sistemas de demanda censurados se han propuesto diversas metodologías a los fines de eliminar el sesgo hacia el cero derivado de la multiplicidad de consumos nulos revelados en Encuestas de Hogares, a la vez que obtener especificaciones correctas en términos de su consistencia con la teoría económica. Particularmente, la propuesta de estimación en dos etapas de Shonkiler y Yen [7] ha dado una solución a este problema incorporando una elección binaria en una primera etapa, para luego, en la segunda etapa, usar estos resultados para corregir las estimaciones del sistema de demanda. La primera etapa, en general, ha sido modelada mediante un Probit Univariado, basado fundamentalmente en la menor complejidad computacional requerida, como también en la menor importancia de los efectos cruzados entre determinadas elecciones. Sin embargo, si las decisiones entre comprar o no diversos bienes están correlacionadas, los estimadores del Probit univariado serán ineficientes, lo que se traslada al sistema de demanda [2]. Tal es el caso del estudio de los diferentes productos lácteos, los que son objeto del presente trabajo. Una justificación posible para modelar tales correlaciones en la elección de comprar o no un determinado producto lácteo puede basarse en considerar las evaluaciones que realiza el agente sobre los nutrientes sustitutos que aportan tales productos. Bajo la hipótesis de que este efecto cruzado entre la elección de consumir o no diferentes lácteos es relevante, el objetivo de este trabajo es estimar las elasticidades correspondientes a un sistema de demanda censurado aplicado a Argentina, considerando tales efectos cruzados, y comparando las estimaciones en el caso de omitirlos. Para tal fin, la primera etapa del proceso de estimación se modela con un Probit Multivariado (*versus* el Probit Univariado) para luego corregir el sistema de demanda especificado mediante un LA/AIDS [3].

Los datos utilizados corresponden a los últimos datos publicados de la Encuesta Nacional de Gastos de Hogares (ENGH) elaboradas por el Instituto Nacional de Estadística y Censos (INDEC), tomando aquellos productos lácteos con mayor grado de perecebilidad como ser la leche fluida, la manteca, el queso blando y el yogurt, agrupando los restantes en la categoría de 'otros lácteos'. Se tomaron una serie de variables demográficas, el gasto total y los precios (estimados), con un tamaño total de la muestra de 22.852 hogares válidos correspondiente al total de regiones del país.

2. ESPECIFICACIÓN DEL MODELO Y SU ESTIMACIÓN

Sea la variable w_i la participación observada del gasto en el bien i en el gasto total para una familia dada (i = 1, ..,M), el sistema de M ecuaciones con dicha variable dependiente limitada, puede escribirse como

$$w_i = g_i.w_i^* \;;\; w_i^* = f(\mathbf{x}_i',\beta_i) + \varepsilon_i \;;\; g_i = \begin{cases} 1 & si \quad g_i^* > 0 \\ 0 & si \quad g_i^* \leq 0 \end{cases} \;;\; g_i^* = \mathbf{z}_i'\alpha_i + \upsilon_i \qquad i = 1,\ldots,M \qquad (1)$$

donde g_i es la variable dependiente observada en la primera etapa de elección binaria (consumir o no el bien i) , w_i^* y g_i^* son las correspondientes variables no observadas o laténtes, $\mathbf{x}_i'$ y $\mathbf{z}_i'$ son los vectores de variables explicatorias respectivos ; los parámetros a estimar vienen dados por los vectores β_i y α_j , y ε_i y υ_i son los errores aleatorios. Shonkwiler y Yen [7] demuestran que bajo el supuesto de que de para cada i los términos de error se distribuyen como una Normal Bivariada con $Cov(\varepsilon_i,\upsilon_i) \equiv \lambda_i$ luego la media de w_i viene dada por :

$$E(w_i \mid \mathbf{x}_i,\mathbf{z}_i) = \Phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i) f(\mathbf{x}_i',\beta_i) + \lambda_i \phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i) \qquad i = 1,\ldots,M \qquad (2)$$

Siendo Φ la función de distribución normal estandar acumulada y ϕ la densidad normal estandar. Luego de (1) y (2) la especificación, el sistema de ecuaciones (1)

$$w_i = \Phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i) f(\mathbf{x}_i',\beta_i) + \lambda_i \phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i) + \xi_i \qquad i = 1,\ldots,M \qquad (3)$$

donde $\xi_i = w_i - E(w_i \mid \mathbf{x}_i,\mathbf{z}_i)$ por lo que $E(\xi_i) = 0$. Con esto, el procedimiento en dos etapas consiste en obtener en una primera etapa los estimadores máximo verosímiles del modelo probit (α_i) , para luego en la segunda etapa estimar simultáneamente el vector β_i y los parámetros λ_i del sistema (3). Para las estimaciones de la primera etapa se realizan en base al modelo probit multivariado se aplica el método de máxima verosimilitud basado en el simulador Geweke-Hajivassiliou-Keane (GHK) [1] para lo cual se asume que $(\upsilon_1,\ldots,\upsilon_M)' \sim NMV(0,\Sigma_\upsilon)$ tal que $(\Sigma_\upsilon)_{ij} = \rho_{ij}$ si $i \neq j$ e igual a 1 si $i = j$, siendo ρ_{ij} el coeficiente de correlación correspondiente a la elección de consumo de i y j.

Para la especificación de $f(\mathbf{x}_i',\beta_i)$ se trabaja con el modelo LA/AIDS por sus bondades teóricas y computacionales. En su versión aumentada, considera como covariables adicionales a factores demográficos de acuerdo al método de traslación [4]. La misma viene dada por:

$$y_i \equiv f(\mathbf{x}_i',\beta_i) = \eta_{i0} + \sum_k \eta_{ik} d_k + \sum_j \gamma_{ij} \ln(p_j) + \delta_i \ln(x / p^*) \qquad (4)$$

En este contexto y_i es interpretada como la participación del bien i en el gasto total x realizado en el conjunto de productos representado en el sistema de demanda (i.e. en todo $i = 1,\ldots,M$ **)**, d_k representa el conjunto de variables demográficas de las familias, $\ln(p_j)$ es el logaritmo natural del precio del bien j y p^* es el índice de precios[1], que la aproximación lineal, es definido por el índice de Stone dado por $\ln(p^*) = \sum_i w_i \ln(p_i)$ .A su vez, para que el sistema (4) sea consistente con la teoría económica es necesario el cumplimiento de la restricciónes de *aditividad, simetría* y *homogeneidad* dadas, respectivamente, por

$$\sum_i \eta_i = 1 \,,\quad \sum_i \gamma_{ij} = 0 \;\text{ y }\; \sum_i \delta_i = 0 \;\;;\;\; \gamma_{ij} = \gamma_{ji} \;\;;\;\; \sum_j \gamma_{ij} = 0 \qquad \forall i = 1,..,M \,. \qquad (5)$$

Por lo tanto de (4) y (3) tenemos que el sistema LA/AIDS a estimar en la segunda etada está dado por

[1] En el modelo AIDS el indice tiene una expresión no lineal dada por $\ln(p^*) = \tau_0 + \sum_k \tau_k \ln(p_k) + 1/2 \sum_k \sum_j \vartheta_{kj} \ln(p_k)\ln(p_j)$ [3]

$$w_i = \Phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i)\left[\eta_{i0} + \sum_k \eta_{ik} d_k + \sum_j \gamma_{ij} \ln(p_j) + \delta_i \ln\left(x / p^*\right)\right] + +\lambda_i \phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i) + \xi_i \tag{5}$$

Dado que los consumos de interés están dados por los productos lácteos, i = leche, mantenca, queso blando, yogurt, otros lácteos (por lo que M=5), a su vez se han tomado 17 variables demográficas y geográficas (d_k), las que son consideradas en la etapa previa (en α_i) junto con variables de gasto total en consumo de alimentos, gasto total en consumo y gasto total como variables *proxy* del ingreso. El sistema de demanda (5) se estima por el método *Seemingly Unrelated Regressions* (SUR)[2] que a los fines de evitar la singularidad de la matriz de varianzas y covarianzas, una ecuación debe omitirse, que es precisamente la correspondiente a 'otros lácteos', logrando así mismo el cumplimiento de la restricción de aditividad. Estimados los coeficientes del sistema, se estiman las correspondientes elasticidades gasto, precio compensada y precio no compensada [6], estimando sus errores estándar y obteniendo un intervalo de confianza mediante el 'método delta' [5]. La elasticidad-gasto y precio compensada, viene dadas por

$$e_i^x = 1 + \delta_i\left[\Phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i)/ E(w_i)\right] \qquad \text{y} \qquad e_i^{pc} = -\delta_{ij}^K + \gamma_{ij}\left[\Phi(\mathbf{z}_i'\alpha_i)/ E(w_i)\right] \tag{6}$$

A su vez, la elasticidad precio no compensada puede ser derivada de la ecuación de la Slutsky:

$$e_i^{pc} = e_i^{pnc} + e_i^x E\left(w_j\right) \tag{7}$$

3. RESULTADOS

Los resultados de la primera etapa muestran que la mayoría de las variables demográficas utilizadas son significativas en la elección de comprar o no un determinado lácteo Para el caso de las *proxy* del ingreso de las familias, se tiene que el gasto total en alimentos es significativo, mientras que el gasto total en consumo y otros gastos, no lo son. Las correlaciones de los términos de perturbación del modelo probit multivariado son significativas, con valores positivos en todos los casos (en el rango de 0.12 y 0.21), con excepción de los errores correspondientes a la elección entre compra de leche y otros lácteos, en que es negativo (-0.082)[3].

En la Tabla 1 se presentan las elasticidades de la demanda de lácteos, estimadas a partir de los coeficientes obtenidos en la segunda etapa del proceso de estimación del modelo LA/AIDS, aplicando (6) y (7), y evaluando en la participación promedio de los hogares. Para el caso de la elasticidad-gasto, se observa que según ambos modelos todos los productos son normales (en términos del gasto total en lácteos). La leche resulta ser un bien superior normal, en el sentido de que la cantidad consumida de éste aumenta más que proporcionalmente ante un aumento en el desembolso total en lácteos, contrariamente a lo esperado; mientras que los otros productos, por el contrario, lo hacen menos que proporcionalmente.

Al comparar las elasticidades-precio, y más precisamente, las cruzadas, aparecen mayores diferencias entre ambas estimaciones. Como es de esperar, las elasticidades precio propias (compensadas y no compensadas) son negativas y significativas. Puede observarse que para los cuatro productos, bajo un probit univariado las demandas son más elásticas, por lo que si considera al modelo con 'efectos cruzados' como la especificación correcta, su omisión sobreestima la elasticidad-precio propia, al ser mayores en valor absoluto. A su vez, para ambos modelos, la elasticidad-precio propia no compensada es mayor a la compensada, lo que significa que los 'efectos renta' son positivos, o más específicamente, los efectos de cambios en el precio sobre el desembolso total destinado a la compra de lácteos. Entre las elasticidades precio cruzadas de ambos modelos, surge la mayor diferencia entre ellos. Así, mientras que en el modelo estimado con un probit multivariado la leche y la manteca son productos complementarios (signo negativo), según el modelo alternativo, los mismos son sustitutos. Esta diferencia de signos, como también en la significación estadística, entre las elasticidades cruzadas, se da en varios casos (Tabla 1), lo que resulta ser crucial, dado que cambia las conclusiones de las interpretaciones del sistema de demanda.

---

[2] Para la estimación del probit multivariado y del sistema se utilizo el software estadítico STATA empleando los procedimientos MVPROBIT e ITSUR, respectivamente

[3] Para obtener las salidas completas de las estimaciones de los coeficientes, contactar a los autores.

Tabla 1. Elasticidades gasto, precio compensadas y no compensadas para la demanda de lácteos. Comparación entre estimaciones basadas en Probit Multivariado *versus* Univariado en la primera etapa

	Estimaciones con Probit Multivariado				Estimaciones con Probit Univariado			
	Leche	Manteca	Queso B.	Yogurt	Leche	Manteca	Queso B.	Yogurt
$\hat{e}_i^{x}$	1.1775*	0.4608*	0.3875*	0.8379*	1.3211*	0.1591*	0.2236*	0.7726*
	(0.0054)	(0.0164)	(0.0097)	(0.0124)	(0.0057)	(0.0205)	(0.0109)	(0.0136)
$\hat{e}_i^{pc}$								
Leche	-0.4923*	-0.0302*	-0.0065	0.1777	- 0.8307 *	0.0486*	0.1799 *	0.3523*
	(0.0183)	(0.0146)	(0.016)	(0.0118)	(0.0208)	(0.0114)	(0.0157)	(0.0115)
Manteca	-0.0753**	-1.5951*	0.507*	0.2693*	0.3397 *	-1.6871*	0.8193*	-0.0001
	(0.0365)	(0.0557)	(0.0457)	(0.0314)	(0.0802)	(0.0982)	(0.0815)	(0.0514)
Queso B.	-0.0095	0.2956*	-0.8887*	0.0575*	0.4088*	0.2661*	- 1.1301*	0.0135
	(0.0233)	(0.0266)	(0.0357)	(0.0201)	(0.0358)	(0.0265)	(0.0441)	(0.0238)
Yogurt	0.2918*	0.198*	0.0649*	-1.2818*	0.9879*	-0.0001	0.0167	-1.5843*
	(0.0194)	(0.0231)	(0.0227)	(0.0255)	(0.0323)	(0.0211)	(0.0294)	(0.0331)
$\hat{e}_i^{pnc}$								
Leche	-0.9494*	- 0.0818*	-0.1828*	0.0379**	-1.3435*	-0.0093	-0.0177	0.1955*
	(0.0182)	(0.0147)	(0.016)	(0.0118)	(0.021)	(0.0115)	(0.0158)	0.01147
Manteca	-0.2542*	-1.6153*	0.4381*	0.2147*	0.2779*	-1.694*	0.7955*	-0.019
	(0.0363)	(0.0558)	(0.0458)	(0.0313)	(0.0806)	(0.0983)	(0.0815)	(0.0511)
Queso B.	-0.1599*	0.2786*	-0.9467*	0.01153	0.3219*	0.2563 *	-1.1636*	-0.013
	(0.0231)	(0.0267)	(0.0359)	(0.0199)	(0.0362)	(0.0265)	(0.0441)	(0.0237)
Yogurt	-0.04010**	0.1398 *	-0.0629 *	-1.3832*	0.686*	- 0.034***	0.0997*	-1.6766*
	(0.0196)	(0.0207)	(0.0229)	(0.0253)	(0.033)	(0.0206)	(0.0296)	(0.0328)

Errores estandárd entre paréntesis (*)Estadísticamente significativo al 1%, (**) Estadísticamente significativo al 5% y (***)Estadísticamente significativo al 10%. Fuente: Elaboración Propia en base a la ENGH 1996/1997

4. CONCLUSIONES

Mediante esta aplicación se ha podido mostrar que si las decisiones que toma un familia entre comprar o no un producto (en este caso en particular, un lácteo) están correlacionadas con las compras de otro, las estimaciones de los coeficientes del sistema de demanda varían si se omite este cruzamiento, lo que puede provocar cambios importantes en la información obtenida sobre cómo reacciona la demanda de lácteos ante cambios en los precios y en el gasto de los mismos.

5. REFERENCIAS

[1] J. CAPELLARI AND S. JENKINS, *Calculation of Multivariate Normal probabilities by Simulation with aplication tu maximun Simulated Likelihood Estimation*, IZA Disscusion Papers, 2006.

[2] K. CHEN, AND C. CHEN, *Cross Product Censoring in Demand System with Limited Dependent Variables: A Multivariate Probit Model Approach*, Rural Economics Staff Papers 00-02, Faculty of Agriculture, Forestry and Home Economics, University od Alberta, Canada, 2002.

[3] A. DEATON, AND J. MUELLBAUER, *Economics and Consumer Behavior*, New York: Cambridge University Press, 1980.

[4] D. HEIEN, AND C. R. WESSELLS, *Demand System Estimation with Microdata: A Censored Regression Approach*, Journal of Business and Economic Statistic vol. 8 (1990).

[5] G. ROSSINI, E. DEPETRIS GUIGUET Y R. GARCIA ARANCIBIA, *La Demanda de Alimentos en Argentina. Un Modelo LA/AIDS con datos de Encuestas de Hogares*, Annales de la Reunión Anual de Economía Política, Córdoba, 2008.

[6] R. SHIPTSOVA, H.L. GOODWIN JR. AND C. R. B. HOLCOMB, *Household Expenditure Patterns for Carbohydrate Sources in Russia*, Journal of Agricultural and Resource Economics Vol. 29 N°2(2004).

[7] J. SHONKWILER, AND S.T. YEN, *Two-step estimation of a censored system of equations*, American Journal of Agricultural Economics, Vol. 81 (1999), pp. 972-82.

UNA APROXIMACIÓN PARA EL CÁLCULO DE INTEGRALES MULTICÉNTRICAS USANDO DESACOPLE DE VARIABLES

J. Cesco[♭], C. Denner[†] y A. Rosso[†]

[♭] *Universidad Nacional de San Luis, San Luis Argentina, jcesco@unsl.edu.ar*
[†] *Departamento de Matemática. Fac. de Ciencias Exactas Fco-Qcas y Naturales. Universidad Nacional de Río Cuarto, Río Cuarto, Argentina, cdenner@exa.unrc.edu.ar, arosso@exa.unrc.edu.ar*

Resumen: En este trabajo presentamos un cálculo desacoplado para integrales multicéntricas

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^1 U(r,u)M(r,v)j_0(p(u,v)r)dudvdr \tag{1}$$

que usan una base mixta de funciones (Slater y Gaussianas). Para poder realizar el desacople de variables se demuestra que existe un único $Q > 0$ tal que

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^1 U(r,u)M(r,v)j_0(Qr)dudvdr \tag{2}$$

Con este resultado es posible plantear el cálculo como producto de integrales lo que permite simplificar el cálculo y reducir el tiempo de cómputo. En las implementaciones hemos analizado distintos criterios de aproximación de Q. Si bien los resultados teóricos son alentadores, las implementaciones realizadas necesitan de mejoras en la estimación del valor de Q.

Palabras clave: *desacople de variables, integrales multicéntricas, base mixta*
2000 AMS Subject Classification: 21A54 - 55P54

1. INTRODUCCIÓN

En cálculos moleculares se describe el modelo utilizando funciones orbitales de Slater (STO) y gaussianas (GTO):

$$\phi_i(\overrightarrow{r}) = \left(\frac{\alpha_i}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(-\alpha_i \left|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{R_i}\right|)(STO) \text{ y } \phi_j(\overrightarrow{r}) = \left(\frac{2\alpha_j}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \exp(-\alpha_j \left|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{R_j}\right|^2)(GTO)$$

con $\overrightarrow{R_i}$ y $\overrightarrow{R_j}$ los vectores posición de los centros i, j respectivamente. Con esa base de funciones se realizan numerosos cálculos, los más dificultosos son las integrales bielectrónicas multicéntricas [3]

$$(ab|cd) = \int\int_{IR^3\times IR^3} \phi_a^*(\overrightarrow{r_1})\phi_b(\overrightarrow{r_1})\frac{1}{|\overrightarrow{r_1}-\overrightarrow{r_2}|}\phi_c^*(\overrightarrow{r_2})\phi_d(\overrightarrow{r_2})d\overrightarrow{r_1}d\overrightarrow{r_2}$$

Particularmente resultan costosas cuando hay 3 ó 4 funciones de Slater involucradas; en este caso trabajamos con 3 Slater y 1 gaussiana. Realizando cambios adecuados [2] se tiene:

$$(ab|cd) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^1 U(r,u)M(r,v)j_0(p(u,v)r)dudvdr \tag{3}$$

$\diamond$ $p(u,v) = |\overrightarrow{P_{ab}}(u) - \overrightarrow{P_{cd}}(v)|$ una función continua y positiva, con $\overrightarrow{P_{ab}}(u) = u\overrightarrow{R_a} + (1-u)\overrightarrow{R_b}$

$\overrightarrow{P_{cd}}(v) = \frac{\alpha_c^2\overrightarrow{R_c}+4v^2\alpha_d\overrightarrow{R_d}}{\alpha_c^2+4v^2\alpha_d}$

$\diamond$ $j_0(x) = \frac{sen(x)}{x}$

$\diamond$ $U(r,u) = u(1-u)K(u,r)$ siendo $K(u,r) = \frac{exp(-z(r,u))}{z(r,u)^3}(1 + \frac{3}{z(r,u)} + \frac{3}{z(r,u)^2})$ y

$z(r,u) = \sqrt{\alpha_a^2(1-u) + \alpha_b^2 u + u(1-u)r^2}$

$\diamond$ $M(r,v) = h(v)e^{-r^2h_1(v)}$ con

$$h_1(v) = \frac{1}{4(v+\alpha_d)} \quad \text{y} \quad h(v) = v^{-3/2}(v+\alpha_d)^{-3/2}e^{\frac{-\alpha_c^2}{4v} - \frac{v}{v+\alpha_d}C}$$

2. Objetivo

Nuestro objetivo es separar las variables u y v del integrando de (3) para plantear el cálculo como producto de integrales simples, ello permite simplificar el cálculo y reducir el tiempo de cómputo.

3. Desarrollo

Definimos la función

$$F(q) = \int_0^\infty g_{12}(r) g_{34}(r) j_0(qr) dr \text{ si } q > 0 \quad \text{y} \quad F(0) = \int_0^\infty g_{12}(r) g_{34}(r) dr$$

donde

$$g_{12}(r) = \int_0^1 U(r,u) du \quad \text{y} \quad g_{34}(r) = \int_0^\infty M(r,v) dv$$

Algunas propiedades de las funciones g_{12} y g_{34}

Propiedad 1: $g_{12}(r)$ y g_{34} están bien definidas
Prueba.
En [5] se prueba que $g_{12}(r)$ está bien definida. Veamos ahora que g_{34} está bien definida:
h es positiva y continua en $(0, +\infty)$. Además para ciertas constantes positivas k y c se tiene
$0 \leq h(v) \leq kv^{-3/2} e^{-\frac{c}{v}}$ para todo v, y $kv^{-3/2} e^{-\frac{c}{v}} \leq kv^{-2} e^{-\frac{c}{v}}$ para $0 < v < 1$ luego

$$\lim_{v \to 0^+} h(v) \leq \lim_{v \to 0^+} \frac{e^{-\frac{c}{v}}}{v^2} = \lim_{v \to 0^+} \frac{\frac{1}{v^2}}{e^{\frac{c}{v}}} = \lim_{v \to 0^+} \frac{-\frac{2}{v^3}}{e^{\frac{c}{v}}(-\frac{c}{v^2})} = \lim_{v \to 0^+} \frac{\frac{2}{v}}{e^{\frac{c}{v}}} = \lim_{v \to 0^+} \frac{-\frac{2}{v^2}}{e^{\frac{c}{v}}(-\frac{c}{v^2})} = 0$$

Así,

$$\lim_{v \to 0^+} h(v) = 0 \tag{4}$$

Además

$$0 \leq \lim_{v \to \infty} h(v) = \lim_{v \to \infty} \frac{e^{-\frac{\alpha_c^2}{4v} - \frac{v}{v+\alpha_d} c}}{v^{3/2}(v+\alpha_d)^{3/2}} \leq \lim_{v \to \infty} \frac{1}{v^{3/2}(v+\alpha_d)^{3/2}} = 0 \text{ entonces } lim_{v \to +\infty} h(v) = 0$$

Ahora acotamos la integral que representa g_{34}: de (4) $h(v) < 1$ para $|v| < \delta$, usando este valor de δ,

$$\int_0^\infty M(r,v) dv = \int_0^\delta M(r,v) dv + \int_\delta^\infty M(r,v) dv \tag{5}$$

Así

$$0 \leq \int_0^\delta M(r,v) dv \leq \int_0^\delta 1 = \delta \quad \text{si} \quad v < \delta$$

y

$$\int_\delta^\infty h(v) e^{-r^2 h_1(v)} dv \leq \int_\delta^\infty h(v) dv \leq k \int_\delta^\infty \frac{1}{v^{3/2}} dv = \lim_{N \to \infty} -\frac{1}{\sqrt{N}} + \frac{1}{2\sqrt{\delta}} = \frac{1}{2\sqrt{\delta}}$$

entonces

$$g_{34}(r) = \int_0^\infty M(r,v) dv \leq \frac{1}{2\sqrt{\delta}} + \delta \quad \forall r$$

por lo que $M(r,v)$ es integrable en $(0, +\infty)$ □

Propiedad 2: g_{12} y g_{34} son continuas, acotadas, positivas, decrecientes y tienden a cero cuando r tiende a infinito. Esto es

$$g_{12}(r) \leq k_{12} \frac{1}{r^{3/2}}, \quad g_{34}(r) \leq k_{34} \frac{1}{r}, \quad \lim_{r \to \infty} g_{12}(r) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{r \to \infty} g_{34}(r) = 0$$

Prueba.

$$\begin{aligned} g_{12}(r) = \quad & \int_0^1 U(r,u)du = \int_0^1 u(1-u)\frac{e^{-z(u,r)}}{z(u,r)}\left(\frac{1}{z(u,r)^2}+\frac{3}{z(u,r)^3}+\frac{3}{z(u,r)^4}\right)du \\ & \leq \kappa \int_0^1 \frac{e^{-r\sqrt{u.(1-u)}}}{r\sqrt{u.(1-u)}}du = \frac{\kappa}{r}\int_0^1 \frac{e^{-r\sqrt{u.(1-u)}}}{\sqrt{u.(1-u)}}du \leq \frac{\kappa_2}{r}\sqrt{\frac{1}{2r}} \end{aligned}$$

Luego $0 \leq g_{12}(r) \leq k_{12}\frac{1}{r^{3/2}}$ con k_{12} constante

$$\begin{aligned} g_{34}(r) &= \int_0^\infty M(r,v)dv = \int_0^\infty h(v)e^{-r^2 h_1(v)}dv \leq \kappa \int_0^\infty (v+\alpha_d)^{-3/2} e^{\frac{-r^2}{4(v+\alpha_d)}}dv \\ &= \kappa \int_0^{\frac{r}{2\sqrt{\alpha}}} \frac{w^3}{3} e^{-w^2}\frac{r^2}{w^3}dw = \frac{1}{r}\kappa \int_0^{\frac{r}{2\sqrt{\alpha}}} e^{-w^2}dw \leq \frac{1}{r}\kappa\int_0^\infty e^{-w^2}dw \end{aligned}$$

entonces $0 \leq g_{34}(r) \leq k_{34}\frac{1}{r}$, k_{34} constante. Además usando las últimas desigualdades tenemos $\lim_{r\to\infty} g_{34}(r) = 0$ y $\lim_{r\to\infty} g_{12}(r) = 0$ $\square$

Propiedad 3 La función F y $(ab|cd)$ dada por (3) están bien definidas

Prueba.

$$F(0) = \int_0^\infty g_{12}(r)g_{34}(r)dr \leq k\int_0^\infty \frac{1}{r^{5/2}}dr < \infty$$

Dado que $|j_0(x)| \leq 1$ se obtiene $|F(q)| \leq F(0)$ y $|(ab|cd)| \leq F(0)$ $\square$

Lema 1

$$F'(q) < 0 \; \forall q > 0$$

Prueba.

$$F^{'}(q) = -\int_0^\infty g_{12}(r)g_{34}(r)j_1(qr)rdr = -\frac{1}{q^2}\int_0^\infty g_{12}(\frac{w}{q})g_{34}(\frac{w}{q})j_1(w)wdw$$

Como g_{12} y g_{34} son positivas, el signo del integrando depende de $j_1(w)$. Esta función es alternante, alcanzando sus ceros: $\lambda_1, ..., \lambda_n, ...$ en $tg(w) = w$. Así

$$\int_0^\infty g_{12}(\frac{w}{q})g_{34}(\frac{w}{q})j_1(w)wdw = \sum_{n=0}^{\infty}\int_{\lambda_n}^{\lambda_{n+1}} g_{12}(\frac{w}{q})g_{34}(\frac{w}{q})j_1(w)wdw$$

Se prueba que esta serie es convergente, utilizando el Criterio de Leibnitz y que su primer término es positivo. Llamemos a_n a los términos de la serie. Como $g_{12}g_{34}$ es decreciente:

$$\begin{aligned} |a_n| \quad &= |\int_{\lambda_n}^{\lambda_{n+1}} g_{12}(\tfrac{w}{q})g_{34}(\tfrac{w}{q})j_1(w)wdw| < (g_{12}g_{34})(\tfrac{\lambda_n}{q})\int_{\lambda_n}^{\lambda_{n+1}} |j_1(w)w|dw \\ &< (g_{12}g_{34})(\tfrac{\lambda_n}{q})(\lambda_{n+1}-\lambda_n)\max_{w\epsilon(\lambda_n,\lambda_{n+1})}|j_1(w)w| \end{aligned}$$

De [1] se tiene que

$$\lim_{n\to\infty}(g_{12}g_{34})(\frac{\lambda_n}{q}) = 0, \quad \lim_{n\to\infty}(\lambda_{n+1}-\lambda_n) = \pi \quad \lim_{n\to\infty}\max_{w\epsilon(\lambda_n,\lambda_{n+1})}|j_1(w)w| = 1 \quad \text{entonces} \quad \lim_{n\to\infty} a_n = 0$$

Para probar el decrecimiento de $|a_n|$ se usa que $g_{12}g_{34}$ es decreciente y que

$$|\int_{\lambda_n}^{\lambda_{n+1}} j_1(w)wdw| > |\int_{\lambda_{n+1}}^{\lambda_{n+2}} j_1(w)wdw| \quad [4] \quad \text{entonces} \quad |a_n| > |a_{n+1}|$$

Además a_1 es positivo ya que $g_{12}g_{34}$ y $j_1(w)$ son positivas en este intervalo. Así la serie es positiva y

$$\frac{dF}{dq}(q) = -\frac{1}{q^2}\sum_{n=0}^{\infty} a_n < 0$$

$\square$

Teorema 1 *Existe un único Q tal que $(ab|cd) = F(Q)$.*

Prueba.
✓**Existencia** Para demostrar la existencia usaremos que la imagen de un conexo por una función continua es un conexo, por ello se prueba:
• $0 < (ab|cd) < F(0)$
• Como el integrando de F(q) está uniformemente acotado por el integrando de F(0) y $j_0(qr)$ tiende a cero cuando q tiende a infinito, usando la convergencia mayorada de Lebesgue resulta $\lim_{q\to\infty} F(q) = 0$
• Dado que j_0 es C^1 y $r.j_1(qr)$ es acotada, entonces F es continua.
Con estas hipótesis existe Q tal que $(ab|cd) = F(Q)$
✓ **Unicidad**
Por el lema anterior, $F'(q) < 0$, luego F es monótona , y por ello el Q que existe es único. □

4. IMPLEMENTACIÓN

Hemos estudiado distintas alternativas para aproximar el valor de Q que hace posible el cálculo desacoplado. Mostramos una aproximación de Q usando un promedio y otra un cálculo iterativo. A modo de ejemplo se muestran dos casos para comparar los valores exactos con las aproximaciones obtenidas usando las estimaciones de Q mencionadas.

•

$$Qp = \left(\frac{1}{g_{12}(0)g_{34}(0)} \int_0^1 \int_0^\infty U(0,u)M(0,v)(p(u,v))^2 dvdu \right)^{1/2}$$

• Qit : Si $f(r) = \int_0^\infty \int_0^1 U(r,u)M(r,v)j_0(p(u,v)r)dudv$, Qit es la solución de

$$\sum_{i=1}^{N} (f(r_i) - g_{12}(r_i)g_{34}(r_i)j_0(Qit.r_i)) = 0$$

donde los r_i son puntos de la integración numérica de Chevyshev, N es la cantidad de puntos.

Ejemplo 1				Ejemplo 2			
$(ab\|cd)$	0.231515933	E. Rel.	red. tiempo	$(ab\|cd)$	0.07040591	E. Rel.	red tiempo
$F(Qp)$	0.231569412	$2{,}3 \times 10^{-4}$	95 %	$F(Qp)$	0.06934	1×10^{-2}	97 %
$F(Qit)$	0.231516317	$3{,}1 \times 10^{-4}$	50 %	$F(Qit)$	0.07057	$2{,}5 \times 10^{-2}$	50 %

5. CONCLUSIONES

- El desacople de variables permite optimizar la cantidad de cálculos a realizar en el programa que computa la mínima energía de una molécula.
- Con el desacople de variables se observa una importante reducción del tiempo de cálculo del aproximante en ambas propuestas.
- Para algunos ejemplos la aproximación no es muy buena, en cuanto a precisión, por lo que se debe seguir estudiando formas alternativas para buscar el valor de Q.

REFERENCIAS

[1] ABRAMOWITZ M. AND STEGUN I. *Handbook of Mathematical Functions an Tables, Bessel function of fractional order.* Ed. National Bureau of Standards. App Math. Series, Dover, NY, 1972

[2] GIUBERGIA G. *Métodos alternativos para el cálculo de integrales multicéntricas de tres y cuatro centros en la teoría de Hartree-Fock.* Tesis de Maestría en Matemática Aplicada. UNRC. 2000

[3] LEVINE I.N. *Quantum Chemistry.* Prentice-Hall Inc, N.J. 5th Edition, 2000

[4] PÉREZ J., CESCO J., ET ALL. *A new algorithm to evaluate bielectronic integrals with 1s Slater-Type Orbitals obtained by the integrals transforms.* International Journal of Quantum Chemistry. 2004.

[5] ROSSO A. *Técnicas de desacople en el cálculo de integrales multicéntricas.* Tesis de Maestría en Matemática Aplicada. UNRC 2004