



Universidad Michoacana de San Nicolás de
Hidalgo.

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas.

Tesis:

Un método numérico para la solución de
problemas diferenciales parabólicos.

Para obtener el Título de: Licenciado en Ciencias
Físico Matemáticas.

Autor: Rafael García Ruiz

Asesor: Dr. Rafael González Campos.

Diciembre 2010

UN MÉTODO NUMÉRICO PARA LA
SOLUCIÓN DE PROBLEMAS
DIFERENCIALES PARABÓLICOS.

PRESENTANDO MI TRABAJO DE TESIS EN: UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO
PARA OBTENER EL GRADO DE: LICENCIADO DE CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICO
POR PARTE DE: FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

2010

Rafael García Ruiz

Tesis

Índice general

1. Introducción	5
2. Descripción del método de matrices de diferenciación.	11
2.1. Interpolación algebraica.	12
2.2. Propiedades de las matrices de diferenciación	16
2.2.1. Más Propiedades.	18
2.3. Interpolación trigonométrica	19
3. Esquema del método en IVP.	27
3.1. Propiedades analíticas	30
3.2. Convergencia del método.	33
3.3. Estabilidad	35
4. Ecuación de calor en 1+1 dimensiones	40
4.1. Solución exacta	42
4.2. Solución mediante el método de matrices de diferenciación.	46
4.3. Problema propuesto.	54
4.4. Implementación	55
4.5. Resultados.	58
5. Conclusiones.	68

Bibliografía

Índice de figuras

3.1. Primer bloque con $N+1$ nodos.	28
3.2. Segundo bloque con $N+1$ nodos.	29
3.3. La region sombreada corresponde a L -estabilidad para $N = 4$. . .	38
3.4. La region sombreada corresponde a L -estabilidad para $N = 6$. . .	39
4.1. Malla.	46
4.2. Exacta y Aproximada algebraica.	62
4.3. Exacta y Aproximada trigonométrica	63
4.4. Exacta, aproximada algebraica, aproximada trigonométrica	64
4.5. Error relativo punto a punto donde cada curva representa el error respecto al recorrido completo en el conjunto de puntos en x para un tiempo.	65
4.6. Error relativo algebraico y trigonométrico.	66

Capítulo 1

Introducción

Las ecuaciones diferenciales parciales son ecuaciones que involucran funciones desconocidas de varias variables y sus respectivas derivadas parciales; por razones de complejidad su tratamiento recurre al análisis numérico. Las ecuaciones diferenciales parciales se caracterizan por ser un tema muy vasto y ser parte central de muchas aplicaciones de suma importancia dentro de la física, economía, biología y muchas otras ciencias que necesitan del tratamiento que proporciona el análisis numérico computacional en sus diversas formas dentro de las matemáticas aplicadas, para encontrar una solución a los problemas que se plantean mediante las ecuaciones diferenciales parciales, que se describen como simulaciones y modelación de procesos matemáticos que interpretan los fenómenos físicos o procesos de otras ciencias, que se distribuyen en el espacio y en el tiempo. Ejemplos de estos problemas típicos son la propagación o difusión del calor, sonido, la dinámica de fluidos, la elasticidad, electrostática, electrodinámica, relatividad numérica, astrofísica entre muchos otros. Para poder clasificar las EDP's se comienza por establecer su orden. El orden, que se define como el orden de la derivada más

alta. De manera más general, la ecuación

$$F[x, \phi(x), \phi'(x), \dots, \phi^{(n)}(x)] = 0 \quad (1.1)$$

es una ecuación diferencial ordinaria de orden n y que representa una relación entre la variable independiente x y los valores de la función ϕ y sus n primeras derivadas $\phi', \phi'', \dots, \phi^{(n)}$. Una de las clasificaciones más importantes se basa en el hecho de si la función desconocida depende de una sola variable independiente o de varias variables independientes. Si en la ecuación diferencial (1.1) sólo aparecen derivadas ordinarias, se le llama ecuación diferencial ordinaria; Cuando las derivadas son derivadas parciales, la ecuación es una ecuación diferencial parcial, que es el caso que nos interesa. Las ecuaciones diferenciales parciales se clasifican en ecuaciones parciales de primer orden, por ejemplo

$$A\phi_x + Bx\phi_y - Cy = 0$$

en donde se consideran solo dos variables por el momento, por ejemplo, ecuaciones diferenciales parciales lineales de segundo orden,

$$A\phi_{xx} + 2B\phi_{xy} + C\phi_{yy} + D\phi_x + E\phi_y + G = 0.$$

En general los coeficientes A, B, C, D, E y G dependen de x y y . Las ecuaciones de nuestro interés son las ecuaciones diferenciales parciales lineales de segundo orden. Estas ecuaciones se clasifican como:

- Ecuaciones diferenciales parciales parabólicas, las cuales describen una familia de problemas y cumplen la siguiente condición,

$$\det \begin{bmatrix} A(x, y) & B(x, y) \\ B(x, y) & C(x, y) \end{bmatrix} = 0,$$

a través de una región \mathcal{R} en el plano (x, y) . Un simple ejemplo es la ecuación de difusión o ecuación de calor $\phi_t = a^2 \phi_{xx}$, donde $\phi(t, x)$ es la temperatura a un tiempo t en una posición x y con una constante de difusión a , este tipo de problemas son conocidos como problemas de evolución que describen problemas físicos y matemáticos entre otros que contienen una variable temporal.

- Ecuaciones diferenciales parciales del tipo hiperbólico, las que cumplen con la condición

$$\det \begin{bmatrix} A(x, y) & B(x, y) \\ B(x, y) & C(x, y) \end{bmatrix} < 0.$$

en una región \mathcal{R} , en el plano (x, y) . Estas ecuaciones son parte de las ecuaciones de segundo orden que describen la propagación de ondas ya sean sonoras, de luz o agua, entre otro tipo de ondas que se relacionan con la vibración de una cantidad física. Estas ecuaciones son de suma importancia para la acústica, dinámica de fluidos y electromagnetismo, ya que muchas ecuaciones de la mecánica son hiperbólicas y su estudio es de un gran interés contemporáneo, un ejemplo es la ecuación de la onda que es el ejemplo base de las ecuaciones hiperbólicas y se escribe como $\phi_{tt} = c^2 \phi_{xx}$.

- Ecuaciones diferenciales parciales del tipo elíptico, que cumplen con la siguiente condición

$$\det \begin{bmatrix} A(x, y) & B(x, y) \\ B(x, y) & C(x, y) \end{bmatrix} > 0.$$

a través de una región \mathcal{R} en el plano (x, y) . Las ecuaciones diferenciales parciales elípticas tienen aplicaciones en casi todas las áreas de las matemáticas al igual que en la física. Un ejemplo de una ecuación del tipo elíptica es la ecuación de Laplace y Poisson que se escribe como $\phi_{xx} + \phi_{yy} = f(x, y)$. Además de la clasificación anterior las EDP's también se clasifican si éstas son lineales o no lineales. Se dice que una ecuación diferencial es lineal si las variables involucradas que en este caso son x y y son elevadas únicamente a la primera potencia y no contiene productos entre las variables, las ecuaciones que no cumplen con dicha condición, se llaman ecuaciones no lineales. Por otra parte, se discute si puede ser homogénea o no homogénea, de manera que cada una de estas clasificaciones describe un proceso diferente con sus respectivas limitantes o condiciones que pueden ser condiciones iniciales y condiciones de borde o frontera, dependiendo el problema que se quiera resolver. Como ya hemos mencionado, para poder llegar a una solución se hace necesario el uso de métodos de solución numérica. Sin embargo para muchas EDP's una solución de manera numérica es difícil de obtener.

El análisis numérico es una rama de las matemáticas que estudia formas de resolver de manera numérica y aproximada diversos problemas en las ciencias aplicadas que son muy complejos como para resolverlos de manera analítica o que simplemente no tienen otra forma de reducción. Así, el análisis numérico es de vital importancia en la solución de ecuaciones diferenciales parciales en la matemática aplicada y es especialmente útil cuando la ecuación no tiene solución analítica por ser de fronteras irregulares, no lineales o no homogénea; es aquí cuando el análisis numérico facilita el desarrollo del problema proporcionando de manera concisa una solución aproximada al problema.

El principal objetivo de esta tesis es proponer un nuevo método de solución numérica para resolver ecuaciones en derivadas parciales con valores de borde o frontera e iniciales, mediante el uso de las matrices de diferenciación. El planteamiento y desarrollo de este método se llevará a cabo en los primeros capítulos y a manera de aplicación se resolverá la ecuación de calor en 1+1 dimensiones con sus respectivas condiciones de borde o frontera y condiciones iniciales. La ecuación de calor es muy importante dentro de las aplicaciones que proporcionan, ya que describe como se distribuye el calor en una región a lo largo del tiempo. Además, la ecuación de calor tiene una importancia fundamental en diversos campos de la ciencia, por ejemplo en el estudio de dispersión de contaminantes o difusión de sustancias, transporte de calor, o bien en el estudio del movimiento Browniano por medio de la ecuación de Fokker-Planck que describe la evolución del tiempo y la función de densidad de probabilidad para la posición de una partícula.

Las matrices de diferenciación son una herramienta útil y relativamente nueva dentro del análisis numérico, que tienen aplicaciones en cualquier problema que involucre diferenciación e integración. También tienen conexión con la transformada de Fourier y con problemas de simetría, entre otras aplicaciones más. Las matrices de diferenciación han sido usadas en el ámbito de sistemas dinámicos y mecánica cuántica respectivamente a partir de los años 80's. Otra área donde se ha desarrollado la aplicación de estas matrices, es en mecánica de fluidos bajo los métodos llamados espectrales que son métodos para resolver ecuaciones diferenciales con valores típicos de contorno. El método espectral es una clase de discretización espacial para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. Si bien los trabajos en esta área se remontan unos años más atrás de 1980, el

estudio de estas matrices y de algunas de sus propiedades han sido realizadas particularmente en [1]-[8]. También cabe señalar que en el área de los métodos espectrales ha habido un gran desarrollo y uso de las matrices de diferenciación desde hace más de tres décadas. De acuerdo a las referencias que se presentan al final de la tesis, las matrices de diferenciación pueden obtenerse como se muestra en el capítulo siguiente donde se desarrolla la descripción del método que usaremos en esta tesis.

Capítulo 2

Descripción del método de matrices de diferenciación.

A continuación se presentarán dos clases de matrices de diferenciación. Una de ellas consiste en matrices que se emplean en espacios de polinomios que pueden reproducir exactamente la derivada de un polinomio algebraico y la otra clase consiste en matrices que reproducen exactamente la derivada de polinomios trigonométricos. Estas clases de matrices se obtienen usando el concepto de interpolación en sus versiones algebraica y trigonométrica, es decir, con la interpolación de polinomios de Lagrange e interpolación polinómica de Hermite o interpolación de Gauss.

2.1. Interpolación algebraica.

Considérese un polinomio $f(x)$ de grado hasta $n - 1$ y n puntos arbitrarios distintos $x_1 < x_2 < \dots < x_n$. De acuerdo al problema general de interpolación, $f(x)$ se puede escribir en la forma Lagrangiana

$$f(x) = \sum_{j=1}^n f(x_j) \frac{\prod_{i \neq j} (x - x_i)}{\prod_{i \neq j} (x_j - x_i)} = \sum_{j=1}^n f_j \frac{P_j(x)}{P_j(x_j)}, \quad (2.1)$$

donde hemos definido $P_j(x) = \prod_{i \neq j} (x - x_i)$. Es conveniente en el desarrollo del método definir el polinomio $g(x)$ como:

$$g(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n).$$

En términos de $g(x)$ es posible obtener una forma matricial que aproxima la derivada de una función en general. Nótese que

$$P_j(x) = \frac{g(x)}{(x - x_j)}. \quad (2.2)$$

Nuestro interés es construir un vector cuyos elementos sean las aproximaciones a los valores de la derivada de $f(x)$ evaluada en x_k , así que calculamos las expresiones evaluadas en x_k . Derivando (2.2) y evaluando en x_k obtenemos

$$P_j'(x_k) = \frac{g'(x_k)}{(x_k - x_j)} - \frac{g(x_k)}{(x_k - x_j)^2}. \quad (2.3)$$

Considerese primero el caso en que $j \neq k$. Entonces la expresión anterior está bien definida. Obsérvese que a la expresión (2.2), podemos acomodarla de tal manera que $g(x) = (x - x_k)P_k(x)$. Derivando respecto de x se obtiene $g'(x_k) = (x - x_k)P_k'(x) + P_k(x)$ y evaluando en x_k resulta $g'(x_k) = (x_k - x_k)P_k'(x_k) + P_k(x_k)$ y de aquí obtenemos que $g'(x_k) = P_k(x_k)$, sustituyendo en (2.3) y tomando en cuenta

que $g(x_k) = 0$ se obtiene

$$P'_j(x_k) = \frac{P_k(x_k)}{(x_k - x_j)}. \quad (2.4)$$

Ahora para el caso cuando $j = k$ la ecuación (2.2), permite escribir a P_k en la siguiente forma

$$P_k(x) = (x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n),$$

Derivando a $P_k(x)$ se llega a la siguiente expresión

$$P'_k(x) = \prod_{1,k} + \prod_{2,k} + \dots + \prod_{n,k},$$

donde cada producto indica un producto de binomios que no contienen ciertos elementos que se desaparecen al momento de haber derivado $P_k(x)$ respecto a x obteniendo una suma de multiplicatorias. El primer término es $\prod_{1,k} = \prod_{l \neq 1, l \neq k} (x - x_l)$, que además de no contener al elemento k no contiene al elemento 1, la segunda multiplicatoria es $\prod_{2,k} = \prod_{l \neq 2, l \neq k} (x - x_l)$, dicho término no contiene al elemento 2 y al elemento k , y así sucesivamente hasta la última multiplicatoria $\prod_{n,k} = \prod_{l \neq n, l \neq k} (x - x_l)$ que no contiene al elemento k y al elemento n . Se hace notar que todos los productos son multiplicados por la unidad, dicha unidad la podemos escoger en la manera más conveniente de tal manera que los multiplicadores obtengan uno de los términos faltantes al momento de ser evaluada x en x_k como se muestra a continuación

$$P'_k(x) = \frac{x_k - x_1}{x_k - x_1} \prod_{1,k} + \dots + \frac{x_k - x_n}{x_k - x_n} \prod_{n,k}.$$

Podemos escribir a $P'_k(x)$ en términos de una suma de productos

$$P'_k(x) = \sum_{j=1}^n \prod_{j,k} (x - x_l) = \sum_{j=1}^n \frac{x_k - x_j}{x_k - x_j} \prod_{j,k} (x - x_l). \quad (2.5)$$

Se observa de (2.4) que $P_k(x) = (x - x_j) \prod_{j,k}$, por lo que la expresión (2.5) se puede simplificar de la siguiente manera

$$P'_k(x) = \frac{P_k(x)}{x_k - x_1} + \dots + \frac{P_k(x)}{x_k - x_n},$$

de manera que si evaluamos la derivada de $P_k(x)$ en x_k se puede acomodar la ecuación anterior en términos de la siguiente sumatoria:

$$P'_k(x_k) = P_k(x_k) \sum_{j=1, j \neq k}^n \frac{1}{x_k - x_j}. \quad (2.6)$$

Ahora bien, derivando, la ecuación (2.1), se obtiene

$$f'(x) = \sum_{j=1}^n f(x_j) \frac{P'_j(x)}{P_j(x_j)},$$

separando de la suma el término k-ésimo se llega a la expresión siguiente

$$f'(x) = \sum_{j=1, j \neq k}^n f(x_j) \frac{P'_j(x)}{P_j(x_j)} + f(x_k) \frac{P'_k(x)}{P_k(x_k)}.$$

Evaluando x en x_k para la expresión anterior y sustituyendo de (2.4) $P'_j(x_k)$ y de (2.6) $P'_k(x_k)$, se obtiene la siguiente ecuación

$$f'(x) = \sum_{j=1, j \neq k}^n f(x_j) \frac{P_k(x_k)}{x_k - x_j} \frac{1}{P_j(x_j)} + \sum_{j=1, j \neq k}^n f(x_k) P_k(x_k) \frac{1}{x_k - x_j} \frac{1}{P_k(x_k)}.$$

La ecuación anterior se puede escribir como una multiplicación matriz-vector:

$$f'(x_k) = \sum_{j=1}^n P_k(x_k) [\tilde{D}_{kj}] \frac{1}{P_j(x_j)} f(x_j), \quad (2.7)$$

donde se define a \tilde{D}_{kj} como:

$$\tilde{D}_{kj} = \begin{cases} \frac{1}{(x_k - x_j)}, & j \neq k, \\ \sum_{l=1, l \neq k}^n \frac{1}{x_k - x_l}, & j = k. \end{cases} \quad (2.8)$$

Considerando que P puede definirse como la matriz diagonal compuesta por los elementos $P_k \equiv P_k(x_k)$, de manera que la matriz inversa P^{-1} está definida por los elementos $P_j^{-1} = \frac{1}{P_j(x_j)}$. Así, la expresión (2.7) toma la forma compacta

$$f'(x_k) = \sum_{j=1}^n D_{kj} f_j.$$

donde los elementos de D_{kj} son los elementos de la matriz $P\tilde{D}P^{-1}$ y están dados por:

$$D_{kj} = P_k \tilde{D}_{kj} P_j^{-1}. \quad (2.9)$$

La ecuación anterior proporciona los parámetros para que la matriz D_{kj} tome la siguiente forma:

$$D_{kj} = \begin{cases} \frac{P_k}{P_j(x_k - x_j)} & j \neq k \\ \sum_{l=1, l \neq k}^n \frac{1}{x_k - x_l} & j = k \end{cases} \quad (2.10)$$

2.2. Propiedades de las matrices de diferenciación

1. Linealidad: La matriz D aplicada a la suma de funciones es la suma de la matriz D aplicada a cada función $D(ax^k + bx^{k-1}) = aDx^k + bD(x^{k-1})$.
2. Regla de Leibniz: La regla del producto se cumple para las matrices de diferenciación si la matriz D aplicada a un producto de funciones fg cumplen con $D(fg) = fDg + gDf$, donde el grado de $D(fg) \leq n - 1$. Si la suma de las funciones es de un grado mayor que la matriz D entonces la regla del producto no es posible a menos que se incremente el número de puntos para D obteniendo un grado mayor, para que de esta manera se cumpla la regla de Leibniz.
3. Hay que enfatizar que este procedimiento simplifica la solución de problemas que tengan valores a la frontera y valores iniciales al usar las matrices que se desarrollan dentro del trabajo de esta tesis, ya que se obtienen ecuaciones matriciales en lugar de las ecuaciones diferenciales. Las condiciones de frontera se usan para determinar los puntos que formarán parte importante de la construcción de las ecuaciones matriciales al igual que las condiciones iniciales, proporcionadas en los problemas que se resolverán.

Estos resultados pueden extenderse al caso complejo, es decir, es posible encontrar matrices de diferenciación, construidas con números complejos que actúan como la derivada d/dz para funciones complejas. Estas matrices se obtienen considerando la interpolación de Hermite para valores de alguna función $g(z)$ como puede observar en las referencias de [8]-[9]. El resultado es similar al caso real, esto es

$$D_{mn} = (D(z))_{mn} = \begin{cases} \frac{\prod_{j \neq m} (z_m - z_j)}{(z_m - z_n) \prod_{j \neq n} (z_n - z_j)}, & m \neq n \\ \sum_{k \neq n} \frac{1}{z_n - z_k}, & m = n \end{cases} \quad (2.11)$$

En donde los z_j son considerados números complejos, ya que la función interpolante se considera definida sobre n puntos arbitrarios en el plano complejo.

2.2.1. Más Propiedades.

Después del obtener las matrices de diferenciación mediante la interpolación algebraica, debemos enfatizar los aspectos importantes que las caracterizan :

- Los n nodos son arbitrarios $x_1 < x_2 < \dots < x_n$.
- Se obtiene una fórmula de diferenciación aproximada para cuando f no es un polinomio.
- Se obtiene una fórmula exacta para cuando f es un polinomio como el caso cuando $f(x) = x^k$, $k = 0, 1, \dots, n - 1$, o bien cuando $f(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1}$.
- Al aplicar la matriz D a un vector f , se obtiene que $Dx^k = kx^{k-1}$, ya que la matriz D es una matriz de derivación, así que cada vez que este resultado se vuelva a multiplicar por la matriz D se obtendrán las derivadas subsecuentes, lo cual es válido si f es un polinomio de grado menor o igual hasta $n - 1$ tal que $f(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1}$, por lo que su derivada sería $D_f = f' = a_1 + 2a_2x + \dots + (n - 1)a_{n-1}x^{n-2}$; la expresión anterior es un polinomio de grado menor a $n - 1$. Si f es de grado mayor a $n - 1$ por ejemplo $f(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + \dots$; podemos decir que el vector obtenido por éste método aproximaría a la derivada exacta es decir, $D_f \sim f'$.
- Mientras más grande sea N (numero de nodos), menor será el error que presente el método.

2.3. Interpolación trigonométrica

Nuestro interés se centra en el desarrollo de este método aplicado a algunos problemas en ecuaciones diferenciales con valores iniciales, que tienen soluciones periódicas y que por lo tanto pueden aproximarse por polinomios trigonométricos. Varios sistemas dinámicos son de este tipo: para tiempos suficientemente grandes, presentan un comportamiento periódico; y pueden resolverse numéricamente usando el esquema de diferenciación numérica que desarrollamos enseguida.

Sea $f(z)$ una función analítica y de 1-periodo 2π , aproximando por polinomios trigonométricos, que no son otra cosa que una combinación lineal de funciones. La función puede desarrollarse por series de Fourier.

Un polinomio trigonométrico de grado M tiene la forma

$$T(z) = a_0 + \sum_{n=1}^M (a_n \cos nz + b_n \sin nz).$$

La expresión anterior se puede reescribir en el plano complejo en su forma exponencial, de esta manera se obtendrá una ecuación general y compacta, como

$$T(z) = \sum_{n=-M}^M c_n e^{inz} = w^{-M} \sum_{n=0}^{2M} c_{n-M} w^n = w^{-M} f(w), \quad (2.12)$$

en donde $c_n = a_n - ib_n$, $c_{-n} = c_n^*$ y $w = e^{iz}$. Se observa en la expresión anterior que el polinomio trigonométrico de grado M adquiere casi la forma de un polinomio algebraico donde,

$$f(w) = \sum_{n=0}^{2M} c_{n-M} w^n,$$

es el polinomio algebraico de grado $2M$ como el que se analizó en el apartado anterior excepto por el término w^{-M} que está multiplicando en la ecuación (2.12).

De la misma forma en que se desarrolló la matriz de diferenciación en el caso de las

funciones polinomiales reales, podemos obtener otra matriz de diferenciación útil en el caso de funciones de variable compleja, analíticas y 1-periódicas, de la forma $f(w(z))$. Se observa que en la ecuación (2.12) a excepción de w^{-m} es un polinomio algebraico con la variable $w = e^{iz}$ que puede interpolarse en $2M + 1$ puntos de acuerdo a lo que ya hemos visto en la sección anterior que hace referencia a la interpolación algebraica. Se puede encontrar un polinomio interpolante a $f(w)$ con N puntos y de grado a lo más de $N - 1$; por su relación con la ecuación (2.12) de grado $2M$, $f(w)$ debe tener un número impar de puntos, lo que permite el interpolar de manera exacta a polinomios trigonométricos de orden $M = (N - 1)/2$ a lo más.

Escribimos el polinomio interpolante algebraico de la ecuación (2.12) en su forma lagrangiana, siguiendo el procedimiento para la interpolación algebraica

$$f(w) = \sum_{k=1}^N f(w_k) \frac{\prod_{l \neq k}^N (w - w_l)}{\prod_{l \neq k}^N (w_k - w_l)}.$$

El orden del polinomio interpolante es $N = 2M + 1$ y la ecuación (2.12) se reescribe en términos del interpolante lagrangiano que se expresó en la ecuación anterior, de la siguiente manera:

$$T(z) = w^{-M} f(w) = \sum_{k=1}^N w^{-M} f(w_k) l_k(w).$$

A continuación se procede a derivar $T(z)$ respecto a z , donde la derivada de esta función será evaluada en z_j , tal como se hizo con el caso algebraico. Pero para poder derivar a $T(z)$, se observa en la expresión anterior la dependencia del término derecho respecto a la variable w , así que usando la regla de la cadena se

obtiene una expresión para la derivada de $T(z)$ de la siguiente manera

$$T'(z_j) = \left. \frac{dT(z)}{dw} \right|_{w_j} \left. \frac{dw}{dz} \right|_{z_j}.$$

Resultando una ecuación que se evalúa y desarrolla en términos de w_j . Dicha ecuación se expresa a continuación en su forma desarrollada

$$\left. \frac{dT(z)}{dz} \right|_{z_j} = \left[-Mw_j^{-(M+1)} \sum_{k=1}^N f(w_k) l_k(w_j) + w_j^{-M} \sum_{k=1}^N f(w_k) \left. \frac{dl_k(w)}{dw} \right|_{w_j} \right] \left. \frac{dz}{dw} \right|_{z_j},$$

donde $l_k(w_j) = \delta_{jk}$, lo que es una de las propiedades de los polinomios de Lagrange. Esta propiedad se puede analizar fácilmente, primero en el caso de que $j = k$ donde todos los términos del polinomio son $\frac{(w_k - w_l)}{(w_k - w_l)} = 1$, ya que $l \neq k$. El segundo caso cuando $j \neq k$ el numerador del polinomio se anulará ya que en algún momento del desarrollo del polinomio el índice l toma el valor de j de manera que $\frac{(w_j - w_j)}{(w_k - w_l)} = 0$ por lo que la ecuación anterior se escribe de la siguiente manera,

$$\left. \frac{dT(z)}{dz} \right|_{z_j} = \left[-Mw_j^{-(M+1)} \sum_{k=1}^N f(w_k) \delta_{j,k} l_k(w_k) + w_j^{-M} \sum_{k=1}^N f(w_k) \left. \frac{dl_k(w)}{dw} \right|_{w_j} \right] \left. \frac{dz}{dw} \right|_{z_j}. \quad (2.13)$$

La derivada del polinomio $\left. \frac{dl_k(w)}{dw} \right|_{w_j}$ nos proporciona la posibilidad de encontrar a la matriz que substituye a la derivada para este espacio de polinomios. Comenzamos desarrollando la derivada del polinomio $l_k(w)$ en la siguiente expresión

$$\left. \frac{dl_k(w)}{dw} \right|_{w_j} = \frac{1}{\prod_{l \neq k} (w_k - w_l)} \left. \frac{d(\prod_{l \neq k} (w - w_l))}{dw} \right|_{w_j} = \frac{\prod_{l \neq k, l \neq j} (w_j - w_l)}{\prod_{l \neq k} (w_k - w_l)}. \quad (2.14)$$

Primeramente se supone que $j \neq k$ y se factoriza el término w_j del denominador,

para obtener que:

$$\frac{\prod_{l \neq k, l \neq j} (w_j - w_l)}{(w_k - w_j) \prod_{l \neq k, l \neq j} (w_k - w_l)}.$$

La expresión anterior se multiplica por la unidad $\frac{(w_j - w_k)}{(w_j - w_k)}$ como se muestra a continuación

$$\frac{\prod_{l \neq k, l \neq j} (w_j - w_l)}{(w_k - w_j) \prod_{l \neq k, l \neq j} (w_k - w_l)} \frac{(w_j - w_k)}{(w_j - w_k)}.$$

Agregando el término k -ésimo en el numerador y el término j -ésimo para el denominador se obtienen los elementos no diagonales de la matriz de diferenciación

$$\frac{1}{(w_j - w_k)} \frac{\prod_{l \neq j} (w_j - w_l)}{\prod_{l \neq k} (w_k - w_l)} = \frac{1}{(w_j - w_k)} \frac{P'(w_j)}{P'(w_k)}. \quad (2.15)$$

Ahora consideremos el caso restante que complementa la matriz de diferenciación cuando $j = k$ usando la ecuación (2.14) que se escribe como

$$\left. \frac{dl_k(w)}{dw} \right|_{w_j} = \frac{1}{\prod_{l \neq k} (w_k - w_l)} \left. \frac{d \prod_{l \neq k} (w - w_l)}{dw} \right|_{w_j}.$$

Factorizando los términos j -ésimos del denominador, se obtiene la ecuación anterior la cual se reduce y se obtienen los elementos diagonales de las matriz de diferenciación.

$$\frac{\sum_{l \neq j, l=1}^n \prod_{l \neq k, l \neq j} (w_j - w_l)}{\sum_{l \neq j, l=1}^n (w_j - w_l) \prod_{l \neq k, l \neq j} (w_k - w_l)} = \sum_{l \neq j, l=1}^n \frac{1}{(w_j - w_l)}. \quad (2.16)$$

Las ecuaciones (2.15) y (2.16) nos proporcionan la representación de la matriz de diferenciación en el caso en que la función interpolante sea un polinomio algebraico,

$$P'(w_j)\tilde{D}P'^{-1}(w_k) = \begin{cases} \frac{P'(w_j)}{(w_j - w_k)P'(w_k)} & j \neq k, \\ \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{1}{w_j - w_l} & j = k. \end{cases}$$

Substituyendo la representación anterior de la matriz de diferenciación en la ecuación (2.13) se obtiene:

$$\left. \frac{dT(z)}{dz} \right|_{z_j} = \left[-Mw_j^{-(M+1)} \sum_{k=1}^N f(w_k)\delta_{j,k}l_k(w_k) + w_j^{-M} \sum_{k=1}^N f(w_k)P'(w_j)\tilde{D}P'^{-1}(w_k) \right] \left. \frac{dw}{dz} \right|_{z_j}. \quad (2.17)$$

Escribamos la ecuación anterior en forma matricial para obtener una ecuación más compacta

$$T' = [-MW^{-(M+1)}fPP^{-1} + W^{-M}fP'\tilde{D}P'^{-1}]iW.$$

En esta ecuación W es la matriz diagonal cuyos elementos no ceros son proporcionados por e^{iz_j} , PP^{-1} es la matriz identidad, y \tilde{D} nos proporciona los elementos de la matriz de diferenciación algebraica pero sin los elementos matriciales P y P^{-1} que la multiplican por la derecha y por la izquierda respectivamente. Factorizando W^{-M} y W de la ecuación anterior se obtiene la siguiente representación

$$T' = W^{-M}P[-MW^{-1} + \tilde{D}]iWfP^{-1},$$

$$T' = iW^{-M}P[-M + W\tilde{D}]fP^{-1}.$$

Se hace notar que $T = W^{-M}f$, o bien $f = W^MT$ para así obtener la siguiente

ecuación

$$T' = iW^{-M}P[-M + W\tilde{D}]W^MTP^{-1} = i[-MW^{-M}W^M + W^{-M}W^MWP\tilde{D}P^{-1}]T. \quad (2.18)$$

De la ecuación anterior consideremos el caso cuando $j = k$, es decir los elementos diagonales,

$$i[-MW^{-M}W^M + W^{-M}W^MWP\tilde{D}P^{-1}]T.$$

Sustituimos los valores que dan forma a cada una de las matrices de la ecuación anterior para así obtener, que ésta tome la forma

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + e^{iz_j} \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{1}{e^{iz_j} - e^{iz_l}} \right].$$

En la ecuación anterior incluimos en la sumatoria el término e^{iz_j} para reducirla a

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{e^{iz_j}}{e^{iz_j} - e^{iz_l}} \right]. \quad (2.19)$$

Factorizamos los términos exponenciales del denominador en la sumatoria de la ecuación (2.19) en la siguiente forma:

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{e^{iz_j}}{e^{\frac{iz_j}{2}} e^{\frac{iz_l}{2}} (e^{\frac{i(z_j-z_l)}{2}} - e^{\frac{-i(z_j-z_l)}{2}})} \right].$$

Reacomodamos los exponenciales de manera que se nos facilite su desarrollo en términos de funciones trigonométricas y reescribir esta ecuación como

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{e^{\frac{i(z_j-z_l)}{2}}}{(e^{\frac{i(z_j-z_l)}{2}} - e^{\frac{-i(z_j-z_l)}{2}})} \right].$$

Se sustituyen las funciones exponenciales del numerador y el denominador de la

ecuación (2.19) por su representación en identidades trigonométricas

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{\cos \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right) + i \sin \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right)}{2i \sin \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right)} \right].$$

Reducimos términos similares para obtener los elementos diagonales de la matriz de diferenciación para el caso trigonométrico:

$$i \left[- \left(\frac{n-1}{2} \right) + \sum_{l \neq j, l=1}^N \left(\frac{\cot \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right)}{2i} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

Al desarrollar la sumatoria de la ecuación anterior se eliminan todos los términos a excepción del término trigonométrico,

$$\sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{\cot \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right)}{2}.$$

De la ecuación (2.18) se considera el caso restante cuando $j \neq k$

$$i[-MW^{-M}W^M + W^{-M}W^MWP\tilde{D}P^{-1}]T = iW^{-M} \left[\frac{WP'(w_j)}{(w_j - w_k)P'(w_k)} \right] W^M \quad (2.20)$$

desarrollamos la ecuación anterior para sus valores correspondientes, comenzado con el término $\frac{P'}{P'-1}$:

$$\frac{P'(w_j)}{P'(w_k)} = \frac{\prod_{l \neq j, l=1}^N (e^{iz_j} - e^{iz_l})}{\prod_{l \neq k, l=1}^N (e^{iz_k} - e^{iz_l})}.$$

Factorizando los términos exponenciales y observando que se puede dejar todo en términos de alguna función trigonométrica como se aprecia a continuación

$$\frac{\prod_{l \neq j, l=1}^N e^{\frac{iz_j}{2}} e^{\frac{iz_l}{2}} \sin \left(\frac{z_j - z_l}{2} \right)}{\prod_{l \neq k, l=1}^N e^{\frac{iz_k}{2}} e^{\frac{iz_l}{2}} \sin \left(\frac{z_k - z_l}{2} \right)}.$$

Sustituyendo el resultado anterior en la ecuación (2.20) y desarrollando la ecuación con sus valores correspondientes obtenemos la siguiente representación:

$$= i \left[\frac{e^{-\frac{i(N-1)z_j}{2}} e^{iz_j} e^{\frac{i(N-1)z_k}{2}} \prod_{l \neq j, l=1}^N e^{\frac{iz_j}{2}} e^{\frac{iz_l}{2}} \sin\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right)}{e^{iz_j} - e^{iz_l}} \prod_{l \neq k, l=1}^N e^{\frac{iz_k}{2}} e^{\frac{iz_l}{2}} \sin\left(\frac{z_k - z_l}{2}\right)} \right],$$

Factorizamos en los productos del numerador el exponencial evaluado en j y en el denominador el exponencial evaluado en k respectivamente, para así obtener que,

$$= i \left[\frac{e^{-\frac{i(N-1)z_j}{2}} e^{\frac{i(N-1)z_k}{2}} e^{iz_j} e^{\frac{iz_j(N-2)}{2}} \prod_{l \neq j, l=1}^N \sin\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right)}{e^{iz_j} - e^{iz_l}} \frac{e^{\frac{iz_k(N-2)}{2}} \prod_{l \neq k, l=1}^N \sin\left(\frac{z_k - z_l}{2}\right)}{e^{\frac{iz_k(N-2)}{2}} \prod_{l \neq k, l=1}^N \sin\left(\frac{z_k - z_l}{2}\right)} \right].$$

Después de haber factorizado y haber sustituido algunas identidades trigonométricas en la ecuación anterior, obtenemos la siguiente representación, para obtener

$$= \frac{\csc\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right) \prod_{l \neq j, l=1}^N \sin\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right)}{2 \prod_{l \neq k, l=1}^N \sin\left(\frac{z_k - z_l}{2}\right)}.$$

Con este último resultado obtenemos nuestra matriz de diferenciación que se escribe de la siguiente manera

$$D_{jk} = \begin{cases} \frac{\csc\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right) \prod_{l \neq j, l=1}^N \sin\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right)}{2 \prod_{l \neq k, l=1}^N \sin\left(\frac{z_k - z_l}{2}\right)}, & j \neq k \\ \sum_{l \neq j, l=1}^N \frac{\cot\left(\frac{z_j - z_l}{2}\right)}{2}, & j = k \end{cases} \quad (2.21)$$

De manera que un problema diferencial que sea periódico, con derivadas espaciales y temporales se puede resolver numéricamente usando estas matrices en lugar de las derivadas correspondientes.

Capítulo 3

Esquema del método en IVP.

El objetivo es ampliar los métodos de colocación usando explícitamente las matrices de diferenciación obtenidas mediante polinomios de interpolación como se menciona en el capítulo anterior. Dicha extensión se basa en una sencilla idea que es particionar la matriz subyacente de la ecuación (2.10) y (2.21) para incorporar el valor inicial, como se desarrolla a continuación. Considere el IVP

$$x(t)' = f(x, t), \quad x(a) = \alpha, \quad (3.1)$$

definido en $R = (t, x) \mid a \leq t \leq b, \quad c \leq x \leq d$, donde $f(x, t)$ es Lipchitz en R . Dado $N, M \geq 1$, el objetivo es aproximar a x en M bloques de nodos

$$\{t_{11} < \dots < t_{1N}\}, \{t_{21} < t_{22} < \dots < t_{2N}\}, \dots, \{t_{M1} < t_{M2} < \dots < t_{MN}\},$$

donde $t_{1N} < t_{21}, t_{2N} < t_{31}, \dots, t_{(M-1)N} < t_{M1}$ y $t_{MN} \leq b$. Evaluamos la ecuación diferencial en los $N+1$ nodos del primer bloque $a < t_{11} < t_{12} < \dots < t_{1N}$ (incluyendo a a).

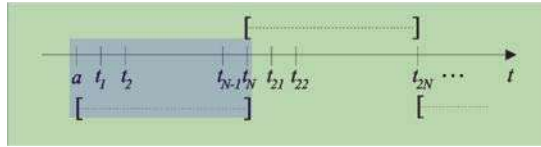


Figura 3.1: Primer bloque con N+1 nodos.

De lo que resulta una ecuación vectorial.

$$\begin{bmatrix} x'(a) \\ x'(t_{11}) \\ x'(t_{12}) \\ \vdots \\ x'(t_{1N}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(\alpha, a) \\ f(x_1, t_{11}) \\ f(x_2, t_{12}) \\ \vdots \\ f(x_N, t_{1N}) \end{bmatrix}.$$

De acuerdo a como se discretiza una ecuación diferencial mediante matrices de diferenciación, la ecuación anterior se escribe como,

$$\begin{bmatrix} D_{aa} & D_{a1} & D_{a2} & \dots & D_{aN} \\ D_{1a} & D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1N} \\ \vdots & & & \ddots & \\ D_{Na} & D_{N1} & D_{N2} & \dots & D_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ u_{11} \\ \vdots \\ u_{1N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(\alpha, a) \\ f(u_1, t_{11}) \\ \vdots \\ f(u_N, t_{1N}) \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Esta ecuación es un sistema de ecuaciones que tiene N desconocidos $u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1N}$ que se pueden encontrar resolviendo la siguiente ecuación,

$$\sum_{k=1}^N D_{jk} u_{1k} - f(u_{1j}, t_{1j}) = -\alpha d_j, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.3)$$

donde d_j es el j -ésimo elemento de la primera columna de la matriz de diferenciación D por lo que $d_j = D_{ja}$. Esto produce una aproximación de u_{1j} en los $x(t_{1j})$ puntos en el espacio que se evalúan en el intervalo $[a, b]$. Ahora, escogiendo u_{1N}

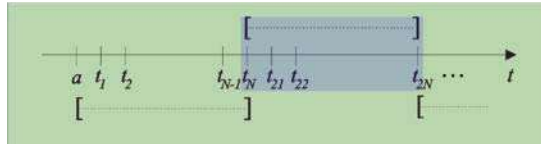


Figura 3.2: Segundo bloque con N+1 nodos.

como un nuevo valor inicial y los nodos del segundo bloque,

el problema local,

$$y(t)' = f(y, t), \quad t \in [t_{1N}, t_{2N}], \quad y(t_{1N}) = u_{1N},$$

puede resolverse numéricamente siguiendo el procedimiento anterior para dar una nueva aproximación de u_{2j} a $x(t_{2j})$, $1 \leq j \leq N$, en el segundo bloque $[t_{21}, t_{2N}]$. Este procedimiento puede repetirse en los siguientes subintervalos $[t_{nN}, t_{(n+1)N}]$, hasta alcanzar el último bloque. Es importante notar que el procedimiento anterior establece un esquema para resolver problemas con valores iniciales, evitando cálculos que tienen otros métodos del tipo Runge-Kutta. Tal vez lo más importante que el método presenta es superconvergencia. Es importante notar también, que este procedimiento permite incorporar valores de la función previamente almacenadas $\tilde{x}_0 = \alpha = x(a)$, $\tilde{x}_{i-1} \simeq x(t_{i-1})$ para disminuir el número de ecuaciones del sistema a resolver. En este caso obtenemos una ecuación de la forma,

$$\sum_{k=i}^N D_{jk} u_k - f(u_j, t_j) = - \sum_{l=0}^{i-1} \tilde{x}_l d_{jl}, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

Donde ahora $d_{jl} = D_{jl}$. Se debe notar que este método es diferente en general de los métodos de multipasos-multietapas, aún cuando se basa en interpolación de Lagrange.

3.1. Propiedades analíticas

Consideremos la matriz D del sistema de ecuaciones de la ecuación (3.3) evaluado en $N + 1$ nodos $t_{((n-1)N)} = t_{n0} < t_{n1} < t_{n2} < \dots < t_{nN}$. De la ecuación (3.3), el subíndice a toma el valor de 0. \mathbf{D} es la submatriz de $N \times N$ de D definida por la partición

$$\begin{bmatrix} D_{00} & \bar{d} \\ d & \mathbf{D} \end{bmatrix}$$

Aquí d es el vector de las entradas $d_j = D_{j0}$, $j = 1, \dots, N$. El vector \bar{d} no es necesario para la aproximación de la solución de IVP (3.1). La solución aproximada evaluada en los nodos del n -ésimo bloque se obtiene resolviendo el sistema de la ecuación (3.3), la que se puede escribir en forma simple como

$$\mathbf{D}u - f_u = -\alpha d, \quad (3.4)$$

donde $\alpha = u_{n-1,N} = u_{n0}$ y u y f_u son los vectores con entradas $u_j = u_{nj}$, $(f_u)_j = f(u_{nj}, t_{nj})$, respectivamente. Se hace notar que el Jacobiano de (3.4) puede aproximarse fácilmente usando diferencias finitas haciendo de manera más simple la solución de la ecuación. Por lo que, la iteración newtoniana correspondiente para funciones $f(x, t)$ no-lineales puede escribirse como

$$u^{(k+1)} = u^{(k)} + \eta^k, \quad (\mathbf{D} - \Lambda^{(k)})\eta^{(k)} = -(\mathbf{D}u^{(k)} - f^{(k)} + \alpha d), \quad (3.5)$$

donde $\Lambda^{(k)}$ es la matriz diagonal cuyos elementos no ceros son

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f(u_{n1}^{(k)}, t_{n1})}{\partial x} \\ \frac{\partial f(u_{n2}^{(k)}, t_{n2})}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(u_{nN}^{(k)}, t_{nN})}{\partial x} \end{bmatrix},$$

y $f_u^{(k)}$ es el vector con elementos $(f_u^k)_j = f(u_{nj}^{(k)}, t_{nj})$. El valor inicial $u^{(0)}$ puede tomarse como el vector con todas sus componentes iguales a la condición inicial $u_{n-1,N}$.

Por otro lado si f es lineal, digamos que $f(x, y) = kx + \phi(t)$, la aproximación ξ es la solución de (3.4) que comienza como

$$(\mathbf{D} - \kappa 1_N)u = -\alpha d - \phi,$$

donde 1_N es la matriz identidad de dimensión N y ϕ es el vector con entradas $\phi(t_{nj})$, $j = 1, 2, \dots, N$.

Es claro que la existencia de una aproximación numérica proporcionada por el método se basa en la invertibilidad de la suma de \mathbf{D} y la matriz diagonal. La invertibilidad de \mathbf{D} puede probarse fácilmente. Sea D_N la matriz de diferenciación asociada con (2.10) y (2.21) con los conjuntos de N puntos $t_{n1} < t_{n2} < \dots < t_{nN}$ (Notar que el primer punto t_{n0} fue removido). Con un poco de álgebra se puede mostrar que

$$(T - t_{n0}1_N)D = (T - t_{n0}1_N)D_N + 1_N, \quad (3.6)$$

donde T es la matriz diagonal cuyas entradas distintas de cero son $t_{n1}, t_{n2}, \dots, t_{nN}$. Ya que D_N es una matriz de diferenciación, las derivadas de $(t - t_{n0})^m$, $m = 0, 1, \dots, N - 1$, se pueden reproducir para cada n aplicando D_N al vector de entradas $(t_{nj} - t_{n0})^m$, $j = 1, 2, \dots, N$.

Así pues tenemos que

$$(T - t_{n0}1_N)D_N \begin{bmatrix} (t_{n1} - t_{n0})^m \\ (t_{n2} - t_{n0})^m \\ \vdots \\ (t_{nN} - t_{n0})^m \end{bmatrix} = m \begin{bmatrix} (t_{n1} - t_{n0})^m \\ (t_{n2} - t_{n0})^m \\ \vdots \\ (t_{nN} - t_{n0})^m \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Sustituyendo estos resultados en (3.6) se obtiene

$$(T - t_{n0}1_N)\mathbf{D}_N \begin{bmatrix} (t_{n1} - t_{n0})^m \\ (t_{n2} - t_{n0})^m \\ \vdots \\ (t_{nN} - t_{n0})^m \end{bmatrix} = (m + 1) \begin{bmatrix} (t_{n1} - t_{n0})^m \\ (t_{n2} - t_{n0})^m \\ \vdots \\ (t_{nN} - t_{n0})^m \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Esta ecuación muestra que los eigenvalores de $(T - t_{n0}1_N)\mathbf{D}$ son enteros $1, 2, \dots, N$ para cualquier conjunto de puntos $t_{n1}, t_{n2}, t_{n3}, \dots, t_{nN}$. Por lo tanto, $(T - t_{n0}1_N)\mathbf{D}$ es invertible. Entonces $(T - t_{n0}1_N)$ es invertible, con esto se comprobó que

Lema 3.1.1. *D es invertible*

Este es un resultado de gran importancia en la prueba de convergencia y estabilidad del método.

3.2. Convergencia del método.

El método propuesto es diferente respecto a los métodos estándares para problemas de valores iniciales, ya que el método propuesto trabaja como un “bloque-implícito”. Por esto es conveniente el mencionar sus propiedades básicas.

Supongamos que la solución del problema local

$$y'(t) = f(y, t), \quad t \in [t_{n0}, t_{nN}], \quad t_{n0} = t_{(n-1)N} \quad y(t_{(n-1)N}) = \alpha_{n-1},$$

es suficientemente suave y Lipschitz en y . Para probar la convergencia, se denota $y = (y_{n1}, y_{n2}, \dots, y_{nN})^T$ a los vectores cuyas entradas son los valores de $y(t)$ para N nodos $t_{n1}, t_{n2}, \dots, t_{nN}$, i.e., $y_{nj} = y(t_{nj})$ y supongamos que $[a, b]$ ha sido dividido en M subintervalos. Entonces, aplicamos la siguiente ecuación

$$x'(t_j) = \sum_{k=0}^N \mathcal{D}_{jk} x(t_k) + \frac{1}{(N+1)!} P'(t_j) x^{(N+1)}(\tau_j), \quad (3.7)$$

que no es más que la técnica que usa matrices de diferenciación para obtener aproximaciones a las derivadas de funciones suaves, es decir, es el método de colocación en donde la derivada puede aproximarse por medio de una matriz de diferenciación, obtenida por medio de la interpolación de Lagrange evaluada en los nodos correspondientes que se escribe en la forma de la ecuación (3.7) donde $\tau_j \in (t_0, t_N)$, $P(t) = \prod_{k=0}^N (t - t_k)$, y \mathcal{D} se refiere a la matriz de diferenciación de la ecuación (2.10). Así de acuerdo al método

$$\sum_{k=1}^N D_{jk} y_{nk} - f(y_{nj}, t_{nj}) = -\alpha d_{nj} + \frac{E_{nj}}{(N+1)!}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.8)$$

donde E_{nj} es proporcionado por $y^{N+1}(\tau_{nj})P'(t_{nj})$, $\tau_{nj} \in [t_{n0}, t_{nN}]$ y $P(t) = \prod_{k=0}^N (t - t_{nk})$. El resultado anterior se puede escribir en forma de matrices como,

$$Dy - f_y = -\alpha d + \frac{E}{(N+1)!}, \quad (3.9)$$

donde f_y , d y E son los vectores de las entradas $f(y_{nj}, t_{nj})$, d_{nj} y E_n , $j = 1, 2, \dots, N$, respectivamente. De (3.4) y (3.9) conseguimos,

$$\|y - u\| \leq \|D^{-1}\| \left(\|f_y - f_u\| + \frac{\|E\|}{(N+1)!} \right),$$

donde $\|\cdot\|$ denota la norma máxima. Como f es suficientemente suave y satisface las condiciones de Lipschitz, puede probarse que el error local entre la solución exacta y_n y la solución aproximada u_n es

$$\|y_n - u_n\| \leq \frac{\mathcal{K}_n \|\Delta^{-1}\| h^{N+1}}{(N+1)(1 - h\mathcal{L}_n \|\Delta^{-1}\|)}$$

de forma similar podemos obtener el error siguiente,

$$\|x_T - u_T\| \leq \frac{M\mathcal{K}_M \|\Delta^{-1}\| h^{N+1}}{(N+1)(1 - h\mathcal{L}_M \|\Delta^{-1}\|)}$$

EL resultado anterior se desarrollo en ([8]) para así obtener el siguiente teorema

Theorem 3.2.1. *El método proporcionado por (3.4) es convergente y es de orden $\mathcal{O}(h^N)$.*

Así, el presente método tiene el mismo orden, que la fórmula de cuadratura en que se basa en el método de colocación (ver [10]) y por lo tanto es superconvergente.

3.3. Estabilidad

La estabilidad condicional de este método como una dependencia continua en los valores iniciales (es decir que cambios pequeños en el valor inicial producen pequeños cambios en la solución) puede probarse fácilmente. Sean α y $\tilde{\alpha}$ diferentes valores iniciales para un subintervalo, y ξ_α , $\xi_{\tilde{\alpha}}$ las soluciones correspondientes calculadas con el método. Entonces

$$\|\xi_\alpha - \xi_{\tilde{\alpha}}\| \leq \frac{\mathcal{K}\|D^{-1}\| |\alpha - \tilde{\alpha}|}{1 - \mathcal{L}\|D^{-1}\|}.$$

Por lo tanto, pequeños cambios en la condición inicial, genera pequeños cambios en la solución numérica, cuando $\mathcal{L}\|D^{-1}\| < 1$.

Ya que el problema principal de esta tesis es aplicar el método de matrices de diferenciación a la ecuación de calor, es necesario cambiar la definición anterior de estabilidad (de la solución producida por el método Numérico). Ya que la ecuación de calor presenta soluciones rígidas (Stiffs), por el simple hecho de que tiene decaimiento exponencial en el tiempo. Una definición adecuada de estabilidad para este tipo de problemas es la así llamada A-estabilidad, que consiste en lo siguiente: Un método es A-estable si la solución producida para el problema lineal $y' = ky$ con $\mathbf{k} \in \mathbb{C}$, se aproxima a cero cuando $t \rightarrow \infty$ en $\text{Re}k < 0$. Si el método numérico muestra este comportamiento, entonces se dice que es A-stable.

Compararemos el método de matrices de diferenciación considerando el problema lineal $x'(t) = \kappa x(t)$, $x(a) = \alpha$ y los nodos uniformemente espaciados en un solo subintervalo. Así el método toma la forma

$$(\Delta - z1_N)u = -\alpha h d,$$

donde $z = h\kappa$ y 1_N es la matriz identidad de dimensión N . Por lo que la regla de Cramer nos da que la j -ésima componente de la solución aproximada u es de la forma

$$u_j = R_j(z)\alpha, \quad j = 1, \dots, N,$$

donde

$$R_j(z) = \frac{\det \left(-hd \begin{matrix} \rightarrow \\ j \end{matrix} (\Delta - z1_N) \right)}{\det(\Delta - z1_N)}. \quad (3.10)$$

Como cada una de estas funciones son coeficientes de polinomios de la forma $Q_j(z)/D(z)$, podemos usar el resultado dado en [11] concerniente a la condición para un método con función de estabilidad $R(z) = Q(z)/D(z)$ sea A -estable: El método es A -estable si y solo si

1. Todos los polos de $R(z)$ estan en el semiplano derecho
2. $E(y) = D(iy)D(-iy) - Q(iy)Q(-iy) \geq 0$ para todo real y .

Entonces, para determinar si el presente método es A -estable para un N dado, nosotros tenemos que encontrar el E -polinomial entre las N posibilidades $E_j(y)$. Tomamos como la E -polinomial de $E_j(y)$ que da el minimo valor entre todos ellos. Los siguientes son casos especiales. El orden es fijo y los nodos estan uniformemente espaciados.

Orden	Estabilidad.
$N = 1$	Este caso es muy conocido . El método se convierte en el método de Euler implícito (L -estable).
$N = 2$	El método es L -estable ya que

$$R(z) = -\frac{z+2}{2z^2-3z+2}, \quad E(y) = 4y^4.$$

$N = 3, \dots, 7$ Encontramos $L(\alpha)$ -estabilidad.

Las figuras (3.3) y (3.4) muestran la region de estabilidad para $N = 4$ y $N = 6$ respectivamente. Notemos que la razón de los polinomios R_j proporcionados en (3.10) satisface que

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} R_j(z) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

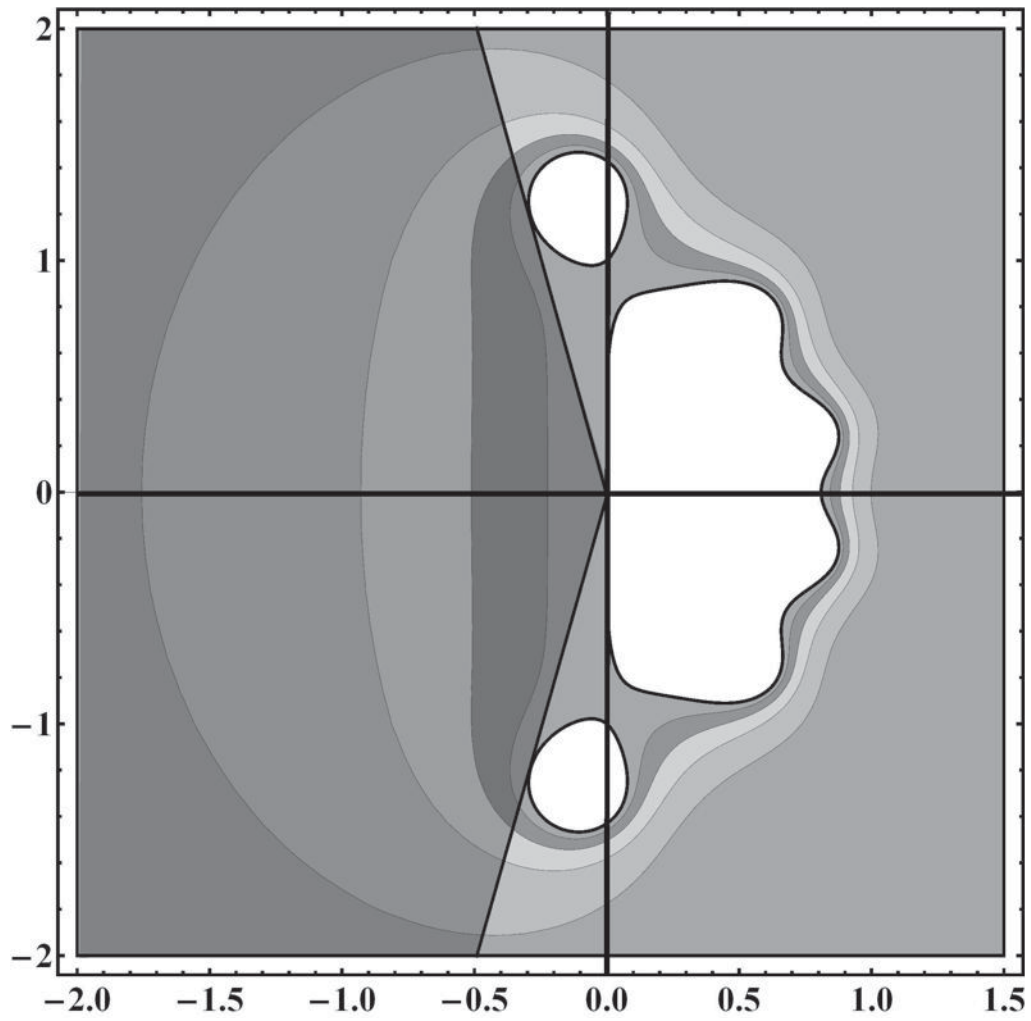


Figura 3.3: La region sombreada corresponde a L -estabilidad para $N = 4$.

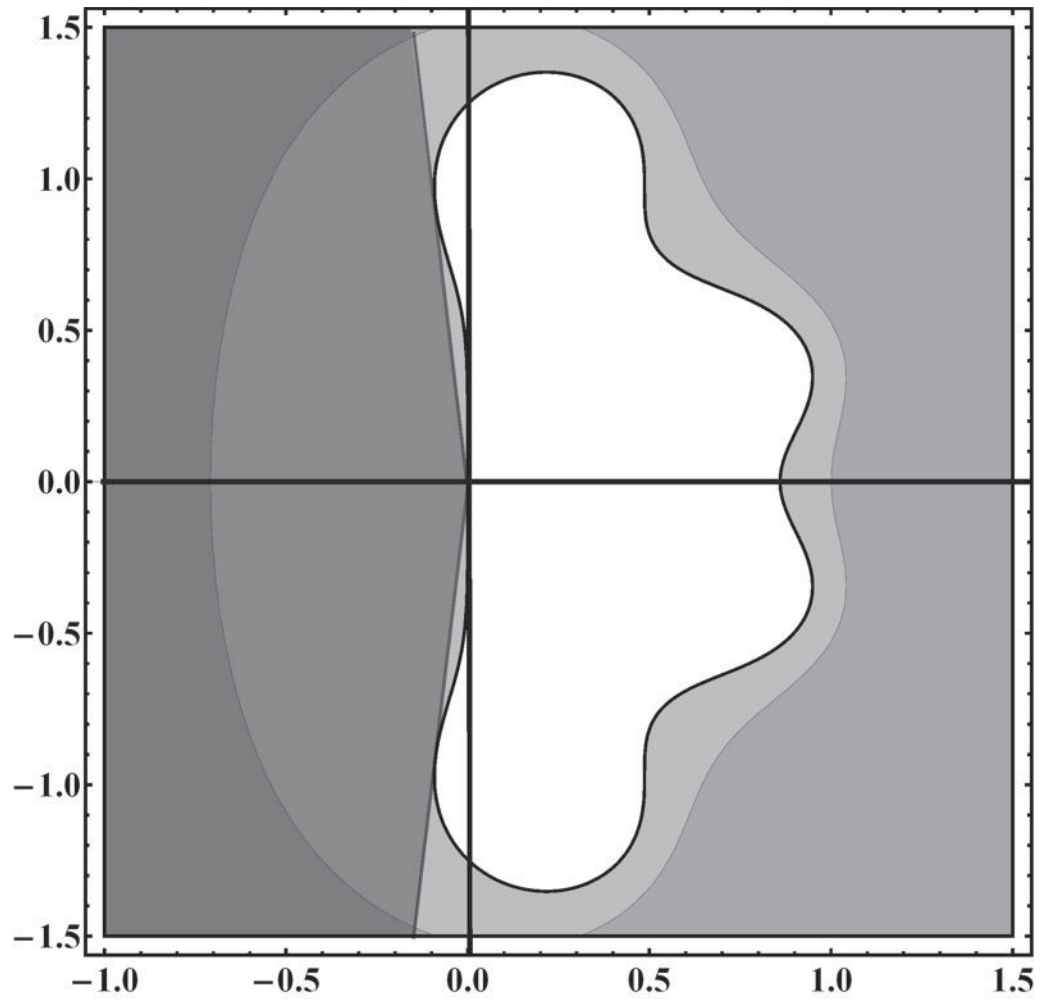


Figura 3.4: La region sombreada corresponde a L -estabilidad para $N = 6$.

Capítulo 4

Ecuación de calor en 1+1 dimensiones

Se considera resolver el problema de conducción del calor en 1+1 dimensiones, con condiciones no homogéneas en la frontera y condición inicial. El problema es del tipo:

$$c \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial f(x, t)}{\partial t}, \quad (4.1)$$

con sus respectivas condiciones de contorno o frontera

- $f(a, t) = f_a$ y $f(b, t) = f_b$, $t > 0$

y condiciones iniciales

- $f(x, 0) = F(x)$, $a \leq x \leq b$.

Durante los últimos tiempos se han desarrollado varios métodos para resolver las ecuaciones diferenciales parciales. El método de separación de variables es uno de los métodos sistemático más antiguos que durante el paso del tiempo a sido refinado y generalizado de modo considerable, y actualmente sigue siendo de gran

importancia y uso frecuente en la actualidad; se usa para resolver diferentes tipos de ecuaciones diferenciales en investigación de ondas y vibración, así como en el problema de conducción de calor para una barra recta de sección transversal uniforme en donde los extremos de la barra están perfectamente aislados, de modo que no pasa calor a través de ellos. La ecuación (4.1) se resolverá en su forma exacta y también con el método de matrices de diferenciación que se obtuvo mediante la interpolación algebraica. Se mostrará que el método propuesto produce resultados aproximados, a la solución analítica, de tal manera se obtendrá el error relativo respecto de la solución aproximada por la matrices de diferenciación algebraica y trigonométrica respecto a la solución analítica.

4.1. Solución exacta

La solución exacta al problema (4.1) se obtiene mediante la técnica del método de separación de variables pero con una pequeña modificación debido a que el problema tiene condiciones no homogéneas en la frontera. La idea principal es reducir el problema actual (4.1) a un problema con condiciones de frontera homogéneas

- $\frac{\partial f}{\partial t} = c \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$
- $f_a = 0$ y $f_b = 0$, $t > 0$
- $f(x, 0) = F(x)$, $a \leq x \leq b$.

El problema de conducción de calor anterior es lineal ya que f y sus derivadas sólo están elevadas a la primera potencia. Tanto la ecuación diferencial, como las condiciones de borde o frontera también son homogéneas. Para encontrar la solución a la ecuación anterior se comienza por usar separación de variables en la siguiente forma, se propone que el producto de una función dependiente de x y una función dependiente de t sea igual a la solución, como se muestra a continuación:

$$f(x, t) = X(x)T(t) \tag{4.2}$$

sustituyendo la función anterior en la ecuación de calor se tiene que

$$XT' = cX''T,$$

la ecuación anterior es equivalente a

$$\frac{T'}{T} = \frac{cX''}{X},$$

en donde se han separado las variables, es decir, el primer miembro sólo depende de t y el segundo, sólo de x . La ecuación anterior es válida para $a < x < b$, $t > 0$. Es necesario que los dos miembros de la ecuación anterior sean iguales a la misma constante, manteniendo la igualdad suponemos que

$$\frac{T'}{cT} = \frac{X''}{X} = k,$$

donde k es una constante de separación. De donde se obtienen dos ecuaciones diferenciales ordinarias,

$$X'' - kX = 0 \quad y \quad T' - kcT = 0.$$

Separando las ecuaciones para primeramente aplicar las condiciones de frontera evitando las soluciones triviales se obtienen los problemas con valores a la frontera en X :

$$X'' - kX = 0, \quad X(0) = 0 \quad y \quad X(L) = 0.$$

Suponemos que $k = -\mu^2$ donde $\mu \rightarrow \mu_n = \frac{n\pi}{b}$, $n=1,2, \dots$, y la solución para X es

$$X \rightarrow X_n = \sin \frac{n\pi}{b}x, \quad n = 1, 2, \dots$$

Por otra parte sustituyendo los valores de k en la ecuación diferencial para T , conseguimos una ecuación de primer orden como

$$T' + c\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 T = 0,$$

cuya solución general es

$$T_n = B_n e^{-\lambda_n^2 t}, \quad n = 1, 2, \dots$$

donde

$$\lambda_n = \sqrt{c} \left(\frac{n\pi}{b} \right)$$

sustituyendo tanto la solución de $T(t)$ y la de $X(x)$ en la ecuación (4.2) y usando el principio de superposición se obtiene

$$f(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n e^{-\lambda_n^2 t} \sin \frac{n\pi}{b} x. \quad (4.3)$$

El siguiente paso es determinar el coeficiente B_n que satisfaga la condición inicial $f(x, 0) = F(x)$, para esto se requiere usar series de Fourier para resolver la ecuación de calor para cuando $t = 0$, que es la condición inicial del problema,

$$f(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi}{b} x = F(x).$$

De la sumatoria se reconoce que es una expansión en series de $f(x, 0)$ de tal manera que podemos obtener el valor del coeficiente B_n

$$B_n = \frac{2}{b} \int_a^b (F(x)) \sin \frac{n\pi}{b} x dx.$$

Con lo cual obtenemos la solución exacta a nuestro problema (4.1), con condiciones homogéneas. Esto es tan sólo la primera parte de la solución buscada para la ecuación de calor con condiciones no homogéneas a la frontera, en donde los extremos de la barra se mantienen a temperatura constante.

Este problema es algo más difícil en virtud de las condiciones no homogéneas en la frontera, sin embargo ya que la ecuación de calor es lineal podemos escribir la solución en términos de dos soluciones $v(x)$ y $w(x, t)$ de la ecuación de calor en la forma,

$$f(x, t) = v(x) + w(x, t), \quad (4.4)$$

donde imponemos que la solución $v(x)$, mantenga las condiciones de frontera del problema (4.1)

$$v(a) = f_a \quad y \quad v(b) = f_b.$$

Por lo tanto las condiciones de frontera que satisfacen la solución $w(x, t)$ son homogéneas ya que

$$w(x, t) = f(x, t) - v(x).$$

Ya que hemos supuesto que $v(x)$ y $w(x, t)$ son solución de la ecuación de calor, $w(x, t)$ debe de tener la forma dada en la ecuación (4.3), ya que satisface condiciones de frontera homogéneas.

La forma de la solución restante $v(x)$ puede encontrarse sustituyendo en la ecuación de calor. Haciendo esto se obtiene la ecuación diferencial la ecuación diferencial resultante

$$v''(x) = 0$$

de manera que su solución es

$$v(x) = (f_b - f_a) \frac{x}{b} + f_a. \quad (4.5)$$

Por lo tanto la solución de la ecuación (4.1) es

$$f(x, t) = (f_a - f_b) \frac{x}{b} + f_a + \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 ct}{b^2}} \sin \frac{n\pi x}{b}. \quad (4.6)$$

4.2. Solución mediante el método de matrices de diferenciación.

La ecuación (4.1) es un problema con variables x y t , que vamos a discretizar tomando dos conjuntos de puntos arbitrarios (x_1, x_2, \dots, x_N) y (t_1, t_2, \dots, t_M) , que representaremos en el siguiente eje de coordenadas.

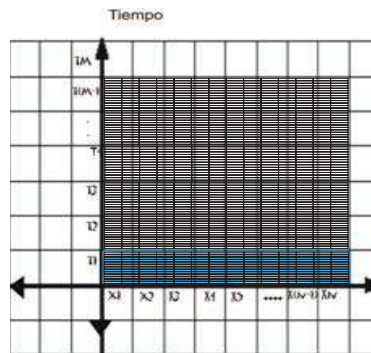


Figura 4.1: Malla.

Donde los puntos de la malla serán ordenados haciendo correr primero a los valores de x y después a los de t como se observa en la figura anterior donde por cada punto t en el tiempo se hace el recorrido total de los puntos en el espacio x . En donde D_x y D_t son las representaciones matriciales de d/dx y d/dt de dimensión $N \times N$ y $M \times M$ respectivamente. Como se observa en la figura (4.1) el recorrido espacial se hace primero por cada tiempo; y construirán las matrices de diferenciación de acuerdo con (2.10) y (2.21). Como el problema (4.1) es de varias variables, necesitamos usar el concepto de la derivada parcial. Recordemos que esta idea surge en Cálculo, para determinar la variación de una función f de más de una variable cuando una variable cambia y la otra (u otras) permanece(n) constante(s), así que requerimos de que f esté definida sobre una red de puntos en el plano.

Ya que nuestro interés es obtener una representación de $d/dx \rightarrow \partial/\partial x$ y $d/dt \rightarrow$

$\partial/\partial t$, definimos

$$\left. \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \right|_{(x_j, t_k)} = f_x(x_j, t_k), \quad (4.7)$$

en donde el lado derecho de la ecuación (4.7) toma la forma discreta vectorial

$$\begin{bmatrix} f_x(t_1, x_1) \\ f_x(t_1, x_2) \\ \vdots \\ f_x(t_1, x_N) \\ f_x(t_2, x_1) \\ \vdots \\ f_x(t_2, x_N) \\ \vdots \\ \vdots \\ f_x(t_M, x_N) \end{bmatrix} = f_x.$$

Ahora podemos usar las propiedades del producto tensorial de Kronecker, para definir una matriz que sea el equivalente a la derivada parcial. Para esto recordemos que el producto de Kronecker entre dos matrices A , B de tamaños $N \times N$, $M \times M$ respectivamente, es

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{N1}B & a_{N2} & \dots & a_{NN}B \end{bmatrix}_{\tilde{N} \times \tilde{N}}.$$

Ésta es una matriz de dimensiones $\tilde{N} \times \tilde{N}$, donde $\tilde{N} = NM$. Ahora podemos escribir la ecuación (4.7) en la siguiente forma

$$(I_t \otimes D_x)f = f_x,$$

donde I_t es la matriz identidad de $M \times M$. De manera que la representación discreta de $\partial/\partial x$ es la matriz $I_t \otimes D_x$. Ahora ya podemos obtener una representación discreta del problema (4.1), respecto a sus derivadas parciales.

Antes de aplicar las representaciones matriciales de las derivadas parciales, analicemos las formas de las derivadas unidimensionales en el tiempo y el espacio respectivamente. Comencemos por la matriz de diferenciación (2.10) respecto de t , para así obtener la representación de la derivada temporal,

$$D_t = \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & \cdots & \cdots & D_{1,M+1} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & \cdots & \cdots & D_{2,M+1} \\ D_{3,1} & D_{3,2} & \cdots & \cdots & D_{3,M+1} \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdots & \cdot \\ D_{M+1,1} & D_{M+1,2} & \cdots & \cdots & D_{M+1,M+1} \end{bmatrix},$$

y la matriz de diferenciación correspondiente al espacio la cual es elevada al cuadrado

para que así sustituya a la $\frac{d^2}{dx^2}$

$$D_x^2 = \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & \dots & \dots & D_{1,N+1} & D_{1,N+2} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & \dots & \dots & D_{2,N+1} & D_{2,N+2} \\ D_{3,1} & D_{3,2} & \dots & \dots & D_{3,N+1} & D_{3,N+2} \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ D_{N+2,1} & D_{N+2,2} & \dots & \dots & D_{N+2,N+1} & D_{N+2,N+2} \end{bmatrix}^2.$$

Al haber obtenido la representación matricial respecto de x y t , se aprecia por la condiciones del problema (4.1), que contamos con condiciones de borde o frontera en D_x^2 ,

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & \dots & D_{1,N+2} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & \dots & D_{2,N+2} \\ D_{3,1} & D_{3,2} & \dots & D_{3,N+2} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ D_{N+2,1} & D_{N+2,2} & \dots & D_{N+2,N+2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ f(x_1, t_1) \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x_n, t_n) \\ \beta \end{bmatrix}$$

y condiciones iniciales respecto a D_t .

$$\frac{df}{dt} = c \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & \dots & D_{1,M+1} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & \dots & D_{2,M+1} \\ D_{3,1} & D_{3,2} & \dots & D_{3,M+1} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ D_{M+1,1} & D_{M+1,2} & \dots & D_{M+1,M+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma \\ f(x_1, t_1) \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x_n, t_n) \end{bmatrix}$$

Tomando en cuenta dichas condiciones referentes al problema (4.1), es fácil determinar los vectores condicionales respecto de cada matriz y factorizarlos, así como las submatrices que discretizan el conjunto de puntos en x y t , que nos proporcionarán elementos necesarios para encontrar la solución al problema en cuestión. Primero factorizamos la submatriz correspondiente a D_t , como se realizó en la sección (3) en las ecuaciones (3.2)-(3.3),

$$\tilde{D}_t = \begin{bmatrix} D_{2,2} & \dots & \dots & D_{2,M+1} \\ D_{3,2} & \dots & \dots & D_{3,M+1} \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ D_{M+1,2} & \dots & \dots & D_{M+1,M+1} \end{bmatrix},$$

y obtenemos su vector correspondiente a la condición inicial (ecuación (4.1)),

$$f_\gamma = \begin{bmatrix} \gamma D_{2,1} \\ \gamma D_{3,1} \\ \vdots \\ \gamma D_{M+1,1} \end{bmatrix}.$$

De manera similar procedemos factorizando la matriz de diferenciación D_x^2 para obtener una submatriz correspondiente a la diferenciación en x ,

$$\tilde{D}_x = \begin{bmatrix} D_{1,2} & \dots & \dots & D_{1,N+1} \\ D_{2,2} & \dots & \dots & D_{2,N+1} \\ D_{3,2} & \dots & \dots & D_{3,N+1} \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ D_{N+1,2} & \dots & \dots & D_{N+1,N+1} \end{bmatrix},$$

y obtenemos dos vectores correspondientes a las condiciones de borde o frontera dados a continuación

$$f_\alpha = \begin{bmatrix} \alpha D_{2,1} \\ \alpha D_{3,1} \\ \vdots \\ \alpha D_{N+1,1} \end{bmatrix}, \quad f_\beta = \begin{bmatrix} \beta D_{2,N+2} \\ \beta D_{3,N+2} \\ \vdots \\ \beta D_{N+1,N+2} \end{bmatrix}.$$

Volviendo al problema de obtener las representaciones discretas de las derivadas parciales $\partial/\partial t$ y $\partial^2/\partial x^2$ recurrimos a usar el producto de Kronecker, entre la matriz identidad I_t de dimensión $M \times M$ y \tilde{D}_x de dimensión $N \times N$ para obtener la representación de $\partial^2 f/\partial x^2$ como

$$\tilde{\mathbf{D}}_{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{MM} \otimes \begin{bmatrix} D_{1,2} & \dots & \dots & D_{1,N+1} \\ D_{2,2} & \dots & \dots & D_{2,N+1} \\ D_{3,2} & \dots & \dots & D_{3,N+1} \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \dots & \cdot \\ D_{N+1,2} & \dots & \dots & D_{N+1,N+1} \end{bmatrix} = I_{MM} \otimes \tilde{D}_x = \partial^2 f / \partial x^2,$$

de manera similar obtenemos la representación discreta de $\partial f / \partial t$, usando la matriz identidad I_x de dimensión $N \times N$ y la submatriz \tilde{D}_t de dimensión $M \times M$, y usando el producto de Kroncker entre ambas obtenemos la matriz $\tilde{\mathbf{D}}_t = (\tilde{D}_t \otimes I_x)$. Los vectores relacionados con las condición inicial y con las condiciones de frontera.

Se obtienen aplicando el producto de Kronecker a los vectores formados por $\mathbf{1}_{M,1}$ y $\mathbf{1}_{N,1}$ con las que conforman las dos condiciones de frontera y el vector que conforma la condición inicial como se desarrolla a continuación. Para los vectores con condiciones de frontera,

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\alpha} = \mathbf{1}_{M,1} \otimes f_{\alpha} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{M,1} \otimes \begin{bmatrix} \alpha D_{2,1} \\ \alpha D_{3,1} \\ \vdots \\ \alpha D_{N+1,1} \end{bmatrix}, \tilde{\mathbf{f}}_{\beta} = \mathbf{1}_{M,1} \otimes f_{\beta} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{M,1} \otimes \begin{bmatrix} \beta D_{2,N+2} \\ \beta D_{3,N+2} \\ \vdots \\ \beta D_{N+1,N+2} \end{bmatrix},$$

de manera similar se obtiene $\tilde{\mathbf{f}}_{\gamma} = f_{\gamma} \otimes \mathbf{1}_{M,1}$.

Una vez que se tienen las matrices $\tilde{\mathbf{D}}_t$, $\tilde{\mathbf{D}}_x$ y los vectores $\tilde{\mathbf{f}}_\alpha$, $\tilde{\mathbf{f}}_\beta$ y $\tilde{\mathbf{f}}_\gamma$, se aplica el procedimiento de discretización para obtener una ecuación de calor discreta que con lleva las condiciones de frontera y las iniciales. Así obtenemos que

$$\tilde{\mathbf{D}}_x f + \tilde{\mathbf{f}}_\alpha + \tilde{\mathbf{f}}_\beta = c(\tilde{\mathbf{D}}_t f + \tilde{\mathbf{f}}_\gamma).$$

Es la discretización buscada. Agrupamos las matrices de la ecuación anterior del lado derecho y los vectores del lado izquierdo, para poder simplificar el problema,

$$\tilde{\mathbf{f}}_\alpha + \tilde{\mathbf{f}}_\beta - c\tilde{\mathbf{f}}_\gamma = c\tilde{\mathbf{D}}_t f - \tilde{\mathbf{D}}_x f.$$

La solución del problema se obtiene finalmente resolviendo la ecuación anterior para f mediante las técnicas estándares

$$f = (c\tilde{\mathbf{D}}_t - \tilde{\mathbf{D}}_x)^{-1}(\tilde{\mathbf{f}}_\alpha + \tilde{\mathbf{f}}_\beta - c\tilde{\mathbf{f}}_\gamma). \quad (4.8)$$

4.3. Problema propuesto.

Se han desarrollado los pasos a seguir para encontrar la solución de manera exacta y aproximada de la ecuación (4.1). Ahora sólo falta proporcionar los valores de las condiciones de frontera correspondientes y de la condición inicial, para definir el problema a resolver.

El problema a resolver consiste en encontrar la temperatura sobre una barra de longitud de 1 metro, durante el intervalo de $t = 0$ y $t = 0,3$. Las condiciones de frontera en los extremos de la barra son no homogéneas y son $\alpha = 20^\circ C$ y $\beta = 40^\circ C$. El valor inicial de la temperatura es $100^\circ C$; la barra tiene un coeficiente de difusión $C = 0,5$. La evolución temporal de este problema está determinada por la ecuación de calor (4.1) y su solución exacta está dada por (4.6).

Como ya hemos dicho, nos interesa probar el método descrito en las secciones [2.1,2.3] usando matrices de diferenciación algebraicas y trigonométricas para lo cual usaremos la solución exacta para así compararlas con las soluciones aproximadas que se desarrollaran a continuación

4.4. Implementación

A continuación se mostrara la implementación que se realizo en Matlab (versión 7.0.1), para resolver la ecuación de calor (4.1) en 1 + 1 dimensiones con sus respectivos valores condicionales, mediante el uso de matrices de diferenciación como se observa enseguida:

Algoritmo 4.4.1.

```
function[C, Ff, Fc] = Dif1(temp, long, n, n1, m, c);
```

Establecemos la condición inicial y las de frontera.

```
v=ones(m-2,1)*100; fa=20; fb=40;
```

Establecemos el conjunto de puntos de t y x, que confoman la malla del problema.

```
t=linspace(0,temp,n)'; x=linspace(0,long,m)';
```

Definimos el ciclo respecto a el número de puntos en t ya que tomaremos subintervalos de tiempo para discretizar el problema con matrices que tengan un paso de orden dos respecto al tiempo.

```
for i=1:n;
```

```
if i + 1 > n, break, end
```

```
subt=linspace(t(i),t(i+1),n1);
```

Discretizamos el tiempo con la matriz (Dt) y el espacio con (Dx²)

```
Dt = dmatc(subt); Dx = (dmatc(x))^2;
```

Factorizamos las matrices Dt y Dx para obtener la submatriz y los vectores correspondientes que daran la discretización del problema.

```
Dst = Dt(2 : n1, 2 : n1); Dsx = Dx(2 : m - 1, 2 : m - 1);
```


Se factorizan los vectores correspondientes a la condición inicial en el tiempo (dt) y la condiciones de frontera en el espacio (dxa, dxb)

$$dt = Dt(2 : n1, 1); dxa = Dx(2 : m - 1, 1) * fa; dxb = Dx(2 : m - 1, m) * fb;$$

Procedimiento para obtener la representación discreta de $\partial/\partial t$ y $\partial^2/\partial x^2$ equivalentes a Dmt y Dmx , definiendo las matrices identidad,

$$It = eye(n1-1); Ix = eye(m-2);$$

y usando el producto de Kronecker.

$$Dmt = kron(Dst, Ix); Dmx = kron(It, Dsx);$$

Condiciones de frontera

$$dfax = kron(ones(n1-1, 1), dxa); dfbx = kron(ones(n1-1, 1), dxb);$$

$$dvt = kron(dt, v); \text{ condición inicial}$$

$$Ma = (Dmt - (c * Dmx));$$

$$Vec = ((c * dfax + c * dfbx) - dvt);$$

Solución al problema.

$$f = (Ma) \setminus Vec;$$

$$v = f((n1-2)*(m-2)+1:(n1-1)*(m-2), 1);$$

Cambia el vector solución a la forma de matriz con $m-2$ renglones para diferentes temperaturas, donde cada renglon es un paso en el tiempo.

$$Fm = reshape(f, m-2, n1-1)';$$

$$C = zeros(n1, m);$$

$$C(2:n1, 1) = 20; C(2:n1, m) = 40;$$

$$C(1, 1:m) = 100;$$

$$C(2:n1, 2:m-1) = Fm;$$

Establecemos las condiciones de frontera y la condición inicial, en la matriz Fm que representa a la solución, de esta manera se graficará cada renglon de la matriz y se observará la difusión de la temperatura en cada tiempo.

$$ft(i, 1:(m-2)*(n1-1)) = f';$$

end

4.5. Resultados.

En esta sección se mostrarán los resultados obtenidos mediante las implementaciones en Matlab descritas anteriormente y se realizará una comparación entre la solución exacta (4.6) y las soluciones aproximadas que se producen de aplicar los dos tipos de matrices de diferenciación (2.10,2.21), al problema en cuestión (4.1) y se calculará el error relativo entre las soluciones aproximadas y la solución exacta.

Denotaremos con T_a y T_t a los vectores obtenidos mediante la técnica propuesta en las secciones [(4.1), (4.2)]. T_a indica los valores correspondientes a la solución aproximada obtenida al discretizar la ecuación de calor mediante las matrices de diferenciación algebraica. T_t contiene los valores correspondientes a la solución aproximada obtenida al discretizar la ecuación de calor mediante las matrices de diferenciación trigonométrica. También usaremos la notación T_e para el vector obtenido evaluando la solución exacta en los nodos (x_j, t_k) . De esta forma el error relativo se calculará de acuerdo a

$$\frac{\|T_a - T_e\|}{\|T_e\|} \quad y \quad \frac{\|T_t - T_e\|}{\|T_e\|}. \quad (4.9)$$

Así obtenemos tres soluciones al problema propuesto en forma vectorial que pueden reescribirse en forma matricial donde cada renglon representa el recorrido de todos los nodos en el espacio x para un solo tiempo t_k , tanto en la solución exacta como en las aproximaciones.

En las siguientes tablas se muestran los resultados obtenidos al discretizar (4.1) en un conjunto de 30 puntos en x y 30 puntos en t , con subintervalos temporales de dos puntos cada uno, es decir, de paso $h = 0,0052$.

	x_1	x_2	...	x_{j-2}	x_{j-1}	x_j	...	x_{m-1}	x_m
t_1	99.995	100.01	...	99.992	99.991	99.995	...	100.01	99.994
t_2	99.525	100	...	100	100	100	...	100	99.644
t_3	98.025	99.999	...	100	100	100	...	100	98.518
t_4	95.86	99.992	...	100	100	100	...	99.994	96.895
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{k-2}	45.596	67.241	...	98.874	99.455	99.122	...	75.43	59.197
t_{k-1}	45.461	67.031	...	98.828	99.427	99.085	...	75.274	59.096
t_k	45.328	66.825	...	98.781	99.397	99.047	...	75.119	58.996
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{n-1}	38.395	55.282	...	92.495	94.308	93.695	...	66.446	53.792
t_n	38.345	55.192	...	92.406	94.228	93.617	...	66.378	53.754

Cuadro 4.1: Valores de la solución exacta, en donde cada renglón en la tabla muestra las temperaturas en las posiciones x_j , $j = 1, \dots, m$, a un tiempo t_k , $k = 1, \dots, n$ tal como se ilustra en la figura (4.1).

	x_1	x_2	...	x_{j-2}	x_{j-1}	x_j	...	x_{m-1}	x_m
t_1	98.77	100.04	...	100	100	100	...	100.03	99.101
t_2	97.424	100.05	...	100	100	100	...	100.04	98.11
t_3	95.963	100.02	...	100	100	100	...	100.02	97.027
t_4	94.421	99.958	...	100	100	100	...	99.968	95.878
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{k-2}	45.548	67.25	...	98.873	99.455	99.121	...	75.431	59.151
t_{k-1}	45.416	67.038	...	98.828	99.427	99.084	...	75.273	59.054
t_k	45.286	66.83	...	98.781	99.397	99.047	...	75.117	58.958
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{n-1}	38.396	55.282	...	92.495	94.308	93.695	...	66.446	53.793
t_n	38.345	55.192	...	92.406	94.228	93.617	...	66.378	53.754

Cuadro 4.2: Solución aproximada obtenida mediante el método propuesto en (2.10), usando la matriz de diferenciación algebraica. El orden de las variables x y t es el mismo que el del cuadro (4.1).

	x_1	x_2	...	x_{j-2}	x_{j-1}	x_j	...	x_{m-1}	x_m
t_1	98.77	100.04	...	100	100	100	...	100.03	99.079
t_2	97.424	100.05	...	100	100	100	...	100.04	98.07
t_3	95.963	100.02	...	100	100	100	...	100.02	96.972
t_4	94.421	99.958	...	100	100	100	...	99.968	95.813
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{j-2}	45.548	67.25	...	98.874	99.455	99.121	...	75.436	59.164
t_{j-1}	45.416	67.038	...	98.828	99.427	99.084	...	75.278	59.065
t_j	45.286	66.83	...	98.781	99.398	99.047	...	75.122	58.967
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots	\vdots
t_{n-1}	38.396	55.282	...	92.494	94.308	93.695	...	66.446	53.792
t_n	38.345	55.192	...	92.406	94.228	93.617	...	66.378	53.754

Cuadro 4.3: Solución aproximada a la ecuación de calor en 1+1 dimensiones, que se obtiene mediante la interpolación trigonométrica (2.21). El orden de las variables x y t es el mismo que el del cuadro (4.2).

Se comparará la solución exacta con las soluciones aproximadas obtenidas con la matriz de diferenciación trigonométrica y algebraica, para observar cual de las dos matrices tiene mejor comportamiento en un problema como el de calor en $1 + 1$ dimensiones en una barra con fronteras no homogéneas.

Para visualizar nuestros resultados, graficaremos cada renglón de la tabla (4.1) correspondiente a la solución exacta contra cada renglón de la tabla (4.2) correspondiente la solución aproximada obtenida por el método algebraico y superpondremos ambas curvas correspondientes al mismo tiempo para así observar el comportamiento del método propuesto respecto a la solución exacta. El error relativo producido por el método en este caso se mostrara más adelante en la gráfica (4.5).

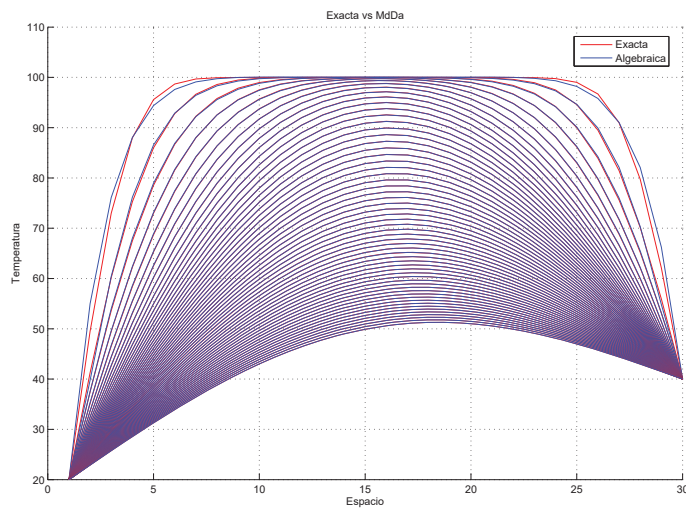


Figura 4.2: Exacta y Aproximada algebraica.

Hacemos lo mismo con los valores de la solución solución exacta representados en la tabla (4.1) y los valores del método propuesto con la matriz de diferenciación trigonométrica utilizando los valores de la tabla (4.3) y de igual manera el error relativo producido por el método se mostrara más adelante en la gráfica (4.5).

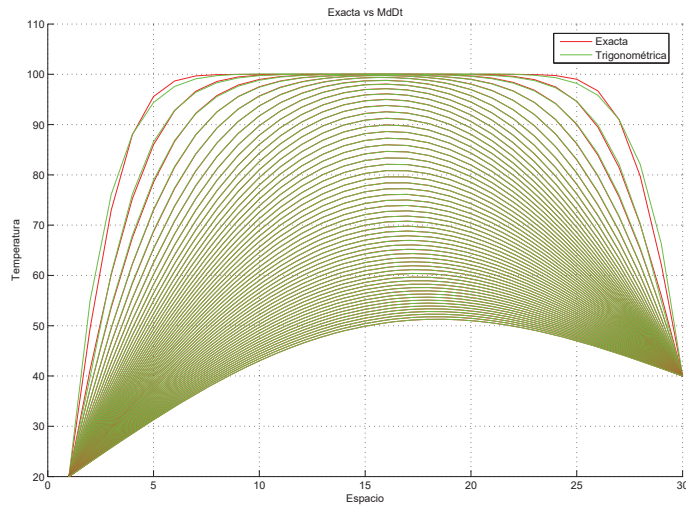


Figura 4.3: Exacta y Aproximada trigonométrica

Por último se sobrepondrán las 3 curvas correspondientes a la solución analítica y a las soluciones aproximadas que se representaron en las gráficas (4.2,4.3) y que ahora se visualizará en la gráfica (4.4).

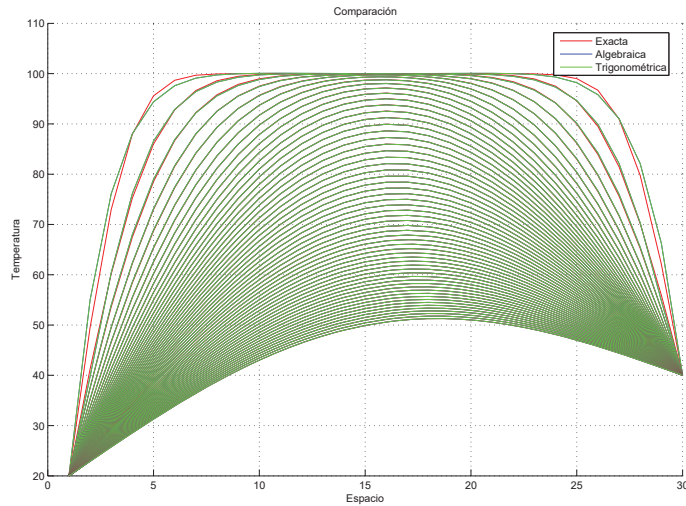


Figura 4.4: Exacta, aproximada algebraica, aproximada trigonométrica

Una manera de obtener un error relativo punto a punto, es restando la solución exacta a la aproximada renglón a renglón, es decir a cada tiempo t_k , y dividirla entre la norma euclídeana de la solución exacta punto a punto, obteniendo un arreglo en forma de matriz, que se expresa a continuación.

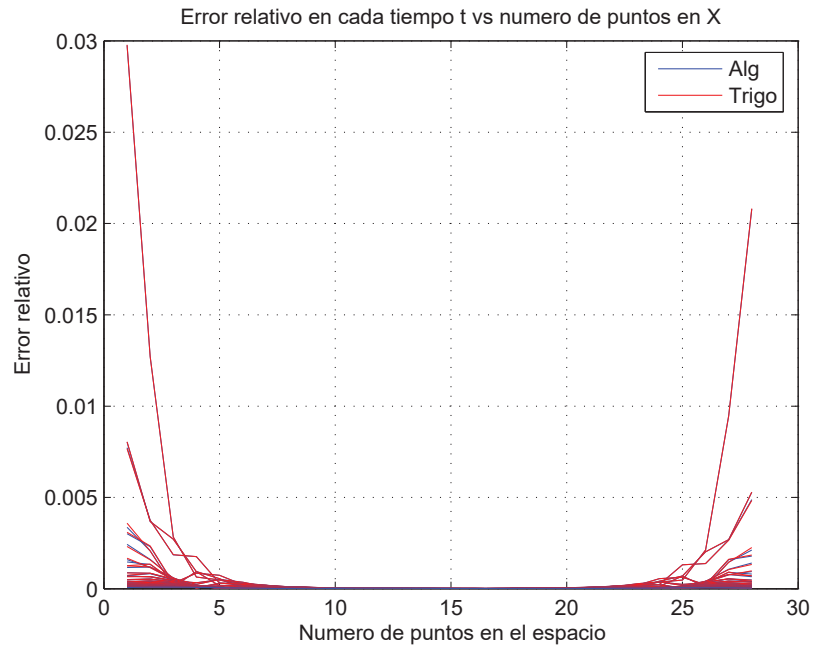


Figura 4.5: Error relativo punto a punto donde cada curva representa el error respecto al recorrido completo en el conjunto de puntos en x para un tiempo.

Otra manera de describir el desempeño del método propuesto en este trabajo consiste en graficar el error relativo para todos los tiempos, es decir, para todos los renglones, en los dos casos: el algebraico y el trigonométrico. Para calcular el error relativo se procedera en la forma estándar tal como se hizo en la figura (4.5).

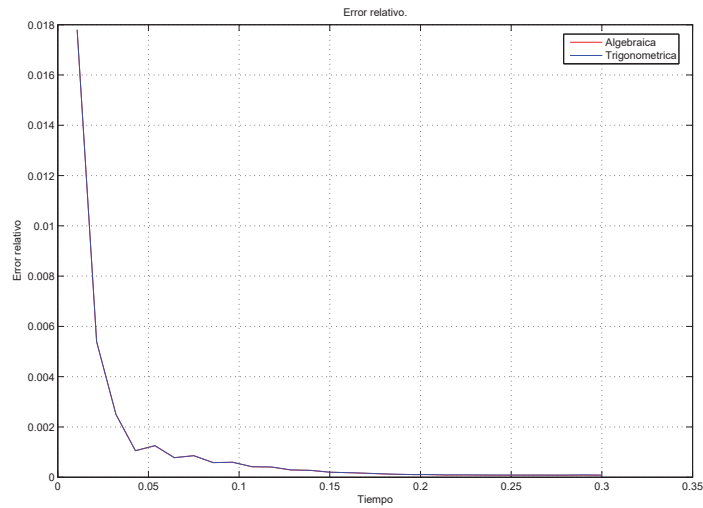


Figura 4.6: Error relativo algebraico y trigonométrico.

Nótese que la diferencia del error representado en la gráfica (4.6) no es apreciable gráficamente, lo cual indica que el desempeño del método es similar en los dos casos algebraico y trigonométrico.

Capítulo 5

Conclusiones.

Es importante enfatizar que dentro de la tesis se desarrolló una manera diferente a la presentada en las referencias [7] para obtener las matrices de diferenciación trigonométricas, y que en el desarrollo del método presentado en este trabajo para encontrar la solución a la ecuación de calor en $1 + 1$ dimensiones se hizo la inclusión, en la sección (3), del método super convergente aplicado a problemas de valor inicial que usa matrices de diferenciación, presentado en [8]. Este método super convergente se aplicó a la ecuación de calor sólo a las matrices temporales, lo cual permite que el método general, es decir el que incluye también matrices de diferenciación espaciales y se aplicó en esta tesis a resolver la ecuación de calor, usando matrices de tamaño pequeño ya que las matrices temporales fueron de tamaño 2×2 y las espaciales de 28×28 . El hecho de que las soluciones aproximadas obtenidas coincidan con la solución exacta usando matrices de tamaño tan pequeño es notable. Esto se debe a la super convergencia en la parte temporal. Además esto agiliza el desempeño y disminuye el número de procesos al poder usar matrices más pequeñas para el recorrido en el tiempo.

Se aprecia que el método introducido en esta tesis puede ser implementado

de manera rápida y sencilla, además, como se muestra en las figuras (4.6,4.5) de la sección (4.5), la diferencia entre los errores relativos obtenidos mediante este método, no es apreciable indicando que el desempeño del método es similar si se usa un tipo de matriz u otra. Además como se nota en la figura (4.5) el error producido por el método es más grande en los puntos frontera y cerca del valor inicial como se aprecia en las graficas (4.2,4.3).

El hecho de que el error decaiga rápidamente respecto al tiempo, como se muestra en la figura (4.6), es atribuible a que el método de diferenciación para la parte temporal es L -estable mientras que el método de diferenciación para la parte espacial en las fronteras no tiene esta propiedad. Es posible que una selección de puntos adaptiva pueda producir mejores resultados.

Bibliografía

- [1] Boyce. DiPrima, “*Ecuaciones diferenciales y problemas con valores iniciales en la frontera*”, Cuarta edición, Editorial Limusa Wiley 2001.
- [2] George F. Carrier, “*Partial Differential Equations*”, Second edition, Editorial Academic Press, 1988.
- [3] Nakhlé H. Asmar “*Partial differential equations and boundary value problems*”, Editorial Prentice Hall 2000.
- [4] F. Calogero, “*Lagrangian interpolation and differentiation*”, Lett. Nuovo Cimento 35, 1983, 273-278.
- [5] F. Calogero, “*Interpolation, differentiation and solution of eigenvalue problems in more than one dimension*”, Lett. Nuovo Cimento 38, 1983, 453-459.
- [6] M. Bruschi, R.G. Campos and E. Pace, “*On a method for computing eigenvalues and eigenfunctions of linear differential operators*”, Nuovo Cimento B105 (1990) 131-163.
- [7] R.G. Campos and Claudio Meneses, “*Differentiation matrices for meromorphic functions*”, Bol. Soc. Mat. Mexicana 12 (2006) 121-132.
- [8] R.G. Campos and F. Domínguez-Mota, “*A superconvergent solver for initial value problems*”, (2010).

-
- [9] A. Maskusevich, “*Teoría de las funciones Analíticas*”, Tomo I, Editorial Mir, Moscú,(1978)
- [10] Hairer, E., Lubich, C., Wanner, G...: “*Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*”, Springer-Verlag, New York, USA (2006).
- [11] Butcher, J.C.: “*Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*”, 2nd edition, John Wiley, NJ USA (2008).

Bibliografía

- [1] F. Calogero. Lagrangian interpolation and differentiation. *Lett. Nuovo Cimento* 35, 35:273–278., 1983.