

La investigación reportada en esta tesis es parte de los programas de investigación del CICESE (Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California).

La investigación fue financiada por el CONAHCYT (Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías).

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México). El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo o titular de los Derechos de Autor.

CICESE © 2024, Todos los Derechos Reservados, CICESE

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California



Maestría en Ciencias en Ciencias de la Computación

Estudio numérico de ecuaciones diferenciales de tercer orden con valores en la frontera

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
Maestro en Ciencias

Presenta:

Cristian Alfredo Candelario Aguilar

Ensenada, Baja California, México

2024

Tesis defendida por

Cristian Alfredo Candelario Aguilar

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal
Director de tesis

Dr. Ubaldo Ruiz López

Dr. César Cruz Hernández



Dr. Pedro Gilberto López Mariscal
Coordinador del Posgrado en Ciencias de la Computación

Dra. Ana Denise Re Araujo
Directora de Estudios de Posgrado

Resumen de la tesis que presenta Cristian Alfredo Candelario Aguilar como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Ciencias de la Computación.

Estudio numérico de ecuaciones diferenciales de tercer orden con valores en la frontera

Resumen aprobado por:

Dr. Pedro Gilberto López Mariscal
Director de tesis

En la mayoría de los casos, la solución de ecuaciones diferenciales no siempre es fácil de obtener de forma analítica y la aproximación de soluciones mediante el uso de métodos numéricos es una práctica común ante esta problemática. Las propiedades y efectividad de distintos métodos para la resolución de ecuaciones de segundo y cuarto orden son bien conocidas; no así para las ecuaciones diferenciales de tercer orden. En esta tesis se presenta la efectividad para aproximar la solución a ecuaciones diferenciales de tercer orden con condiciones de frontera de los métodos de splines, diferencias finitas y el método espectral de matriz de diferenciación de Chebyshev utilizando los nodos de Gauss-Lobato. De especial interés es el problema del espectro de un operador diferencial de tercer orden. En este trabajo, se demuestra que la cantidad de valores propios no espurios encontrados para este operador, se estanca a partir de cierta cantidad de nodos. Los resultados presentados cuestionan algunas afirmaciones en la literatura sobre la naturaleza de los eigenvalores para este problema.

Palabras clave: métodos numéricos, splines, diferencias finitas, métodos espectrales, eigenvalores, eigenfunciones, ecuaciones diferenciales, tercer orden

Abstract of the thesis presented by Cristian Alfredo Candelario Aguilar as a partial requirement to obtain the Master of Science degree in Computer Science.

Numerical study of third order differential equations with boundary values

Abstract approved by:

PhD Pedro Gilberto López Mariscal
Thesis Director

In most cases, the solution of differential equations is not always easy to obtain analytically and the approximation of solutions using numerical methods is a common practice in this problem. The properties and effectiveness of different methods for the solution of second and fourth order equations are well known; not so for third order differential equations. In this thesis the effectiveness of the spline, finite difference and Chebyshev differentiation matrix spectral methods using Gauss-Lobato nodes to approximate the solution of third order differential equations with boundary conditions is presented. Of special interest is the problem of the spectrum of a third-order differential operator. In this work, it is shown that the number of non-spurious eigenvalues found for this operator, stagnates from a certain number of nodes. The results presented question some assertions in the literature about the nature of the eigenvalues for this problem.

Keywords: numerical methods, splines, finite differences, spectral methods, eigenvalues, eigenfunctions, differential equations, third order

Dedicatoria

A Luis...

El hermano pequeño al que quiero y extraño.

Agradecimientos

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California, por la oportunidad de superarme realizando mis estudios de posgrado.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCyT) por brindarme el apoyo económico para realizar mis estudios de maestría.

A mi Director de Tesis, el Dr. Pedro Gilberto López Mariscal, por creer en mis capacidades más que nadie, por su excelente disposición, cariño, amistad y sobre todo, paciencia pues me queda más que claro que en el límite, ésta tiende al infinito.

A mi comité de tesis, el Dr. Ubaldo Ruiz López y el Dr. César Cruz Hernández por sus acertados comentarios y observaciones que ayudaron a lograr este trabajo, gracias por su paciencia para la culminación de este trabajo al igual que en esas presentaciones de avance que por más cortas que quería que fueran, parecían ser interminables.

A mis compañeros y a los miembros Departamento de Ciencias de la Computación en general por la excelente hospitalidad que brindan tanto para los estudiantes locales como los foráneos; hacen que todos se sientan cómodos y generan mucha confianza con lo amable y servicial que son con todos nosotros. La paciencia y ayuda de Karla, Jules, George, Conchita y todos los profesores que hicieron que esto fuese muy cómodo para todos nosotros.

A mi familia y amigos por motivarme a seguir adelante a pesar de ser tan distraído; a mis abuelos por la gran ayuda que me han brindado al confiar y permitirme seguir creciendo académicamente sin pero alguno.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
Lista de figuras	viii
Lista de tablas	ix
Capítulo 1. Introducción	
1.1. Antecedentes	2
1.2. Preguntas de investigación	4
1.3. Objetivos	5
1.3.1. Objetivo general	5
1.3.2. Objetivos específicos	5
1.4. Metodología	6
1.5. Estructura de la tesis	6
Capítulo 2. Preliminares	
2.1. Forma general de una ecuación diferencial	7
2.1.1. Operadores diferenciales lineales	8
2.2. Resolución de ecuaciones diferenciales	9
2.2.1. Solución analítica	9
2.2.2. Problemas con valor en la frontera	9
2.2.3. Solución numérica	9
2.3. Tipos de errores	10
2.4. Precisión y exactitud	10
2.5. Convergencia y orden de convergencia	11
2.5.1. Convergencia	11
2.5.2. Orden de convergencia	12
Capítulo 3. Método de splines	
3.1. Construcción de las Splines	14
3.2. Splines en la resolución de ecuaciones diferenciales	15
3.3. Splines quinticas	16
3.3.1. Polinomios cúbicos de Hermite $Q_k(x)$	18
3.3.2. Los polinomios $P_k(x)$	21
3.3.3. Las splines $S_k(x)$	23
3.4. Operadores diferenciales	24
3.5. Solución de ecuaciones diferenciales de tercer orden utilizando splines quinticas ..	26
3.5.1. Condiciones en los extremos	27
3.6. Implementación del método	31
3.6.1. Resultados y problemas en la literatura	33
3.6.2. Resultados de la implementación	35

3.6.3.	Aproximación a la solución de problemas no lineales	37
3.6.4.	Ejemplos numéricos propuestos	38
Capítulo 4.	Método de diferencias finitas	
4.1.	Definición y construcción del método	44
4.1.1.	Solución al problema de Khan & Aziz (2002)	46
4.2.	Implementación y comparativa con el método de splines	47
4.2.1.	Ventajas y desventajas del método de diferencias finitas	50
Capítulo 5.	Métodos semiespectrales de colocación	
5.1.	Interpolación polinómica de Lagrange y nodos de Chebyshev	53
5.2.	La matriz de diferenciación de Chebyshev	55
5.3.	Obtención de la matriz numéricamente	60
5.4.	Método de colocación de Chebyshev para ecuaciones diferenciales	66
Capítulo 6.	Problema de eigenvalores y eigenfunciones	
6.1.	Eigenvalores y eigenfunciones	73
6.2.	Eigenvalores y eigenfunciones en ecuaciones diferenciales	75
6.3.	Problema espectral para ecuaciones de tercer orden	79
6.3.1.	Solución analítica	82
6.3.2.	Aproximación mediante métodos espectrales	86
6.3.3.	Solución mediante Diferencias Finitas	91
6.3.4.	Eigenvalores mediante splines	93
Capítulo 7.	Conclusiones	
Literatura citada		98

Lista de figuras

Figura	Página
1. Gráficas de comparación en la aproximación de la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 2$	62
2. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 8$	62
3. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 32$. . .	63
4. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 38$	64
5. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 36$	64
6. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 32$	65

Lista de tablas

Tabla	Página	
1.	Solución analítica y aproximada utilizando splines quínticas en Khan & Aziz (2002)	34
2.	Máximos errores absolutos para mallas de tamaño de paso $\frac{1}{2^k}$	35
3.	Resultados del estudio de la metodología, donde Y_i es el valor analítico, y_i es el valor obtenido por Khan & Aziz (2002), u_i los valores obtenidos tras la implementación y ϵ_i la diferencia absoluta entre aproximaciones.	35
4.	Valores aproximados de y_i del problema 113 para 3 mallas con tamaño de paso h de $1/8, 1/16$ y $1/32$.	36
5.	Tabla de errores absolutos del problema 113 para las 3 mallas.	36
6.	Resultados de la implementación al incorporar el método de Newton-Raphson para la solución de sistemas no lineales, donde Y_i es el valor analítico, y_i los valores obtenidos tras la implementación y ϵ_i el error absoluto.	38
7.	Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 115.	39
8.	Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 125.	41
9.	Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 136.	42
10.	Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 146.	43
11.	Errores obtenidos al aproximar la solución al problema 164 utilizando diferencias finitas junto a la técnica de punto fantasma y diferencias finitas desfasadas de para una malla de $n = 100$ nodos.	47
12.	Comparación de soluciones y errores obtenidos con el método de diferencias finitas y el método de splines para la resolución del problema 165 para $N = 10$ nodos.	48
13.	Error obtenido con el método de diferencias finitas para mallas de $N = 10, 100$ y 1000 nodos.	48
14.	Máximo error absoluto obtenido al aproximar la tercera derivada de cada función en mallas de $4, 8, 16$ y 32 nodos.	65
15.	Máxima cantidad de valores propios reales encontrados para \mathbf{D}^3 . *: Incluyendo valores con parte imaginaria tan pequeña que se catalogaron como real para $ \text{Im} < 10^{-8}$	89
16.	Valores reales propios no espurios obtenidos al incorporar la condición $u'(-1) = 0$ en el renglón j -ésimo de \mathbf{D}^3 .	89
17.	Valores propios reales encontrados utilizando diferencias finitas en comparación con los obtenidos para métodos espectrales de la tabla 15.	92
18.	Valores propios reales encontrados utilizando metodología de splines añadidos a la tabla 17.	94
19.	Valores propios analíticos generados utilizando la identidad 363	95

Capítulo 1. Introducción

Los modelos matemáticos permiten ver más allá de la realidad para conectar, de manera abstracta, distintos campos de estudio (Lin & Erfan, 2016). Hoy en día, vivimos en una época en la que la tecnología está tan avanzada que afortunadamente es posible modelar prácticamente cualquier fenómeno cuyo comportamiento sea predecible.

La modelación ha sido una herramienta de investigación necesaria para explorar sistemas complejos, las técnicas matemáticas pueden explicar cómo funciona el mundo y mejorarlo debido a que si un fenómeno se expresa mediante un modelo matemático y el sistema resultante asociado es resuelto, se pueden estimar resultados de un fenómeno bajo ciertas parametrizaciones o condiciones predefinidas en la situación real del evento y por ello, solucionar ecuaciones que representen un fenómeno resulta natural e intuitivamente importante. Lin & Erfan (2016) sostienen que sin el modelado matemático el mundo probablemente no sería como lo conocemos hoy en día.

Los modelos matemáticos ayudan en la toma de decisiones, e incluso son capaces de salvaguardar la vida misma; una prueba de ello es la aplicación de las matemáticas ante el fenómeno pandémico reciente (COVID-19) con el objetivo de estudiar el comportamiento de la propagación del virus en función del tiempo y aislamiento del individuo (Zeb et al., 2020).

Por lo general, las ecuaciones resultantes de un modelado matemático son diferenciales y, a pesar de que se pueden representar muchos fenómenos de la naturaleza a través de este tipo de ecuaciones, el verdadero reto radica en encontrar la solución del sistema resultante. En la mayoría de los casos, el modelo es tan complejo que no es posible encontrar una solución analítica, es decir, no es sencillo o en ocasiones es imposible encontrar una expresión algebraica que represente la solución exacta de una ecuación (Beccar-Varela et al., 2019). Una alternativa para esta problemática es intentar aproximar la solución mediante el uso de métodos numéricos.

El problema de resolver ecuaciones diferenciales con valores en la frontera ha sido atacado con distintas implementaciones numéricas a lo largo de muchos años. Cuestiones teóricas y aproximaciones numéricas de las ecuaciones diferenciales de primero, segundo e inclusive de cuarto orden se han estudiado extensivamente debido a la gran cantidad de fenómenos donde se presentan.

La resolución de ecuaciones diferenciales de tercer orden es de interés matemático ya que carece de la simetría del problema de segundo orden (Weideman & Trefethen, 1988). Es también de interés físico ya que este tipo de operador aparece en ecuaciones diferenciales que modelan algunos fenómenos como la

dinámica del frente de llamas (Kudryashov, 1990) o los niveles de temperatura en reactores nucleares (Vreeke & Sandquist, 1970).

Desafortunadamente, los estudios sobre ecuaciones diferenciales de tercer orden no son tan numerosos como lo son en ecuaciones de orden inferior debido a la complejidad natural de las ecuaciones. A diferencia de las ecuaciones de primer y segundo orden, que tienen métodos de resolución bien establecidos y ampliamente aplicados, las ecuaciones de tercer orden no tienen métodos de resolución estándar y directos. Esto significa que a menudo se requiere creatividad y habilidades avanzadas de álgebra para encontrar soluciones analíticas. De lo anterior, podemos plantear la analogía con relación al problema de encontrar n raíces de un polinomio de grado n , aunque existen expresiones conocidas comúnmente como fórmulas generales para encontrar raíces de polinomios arbitrarios de hasta cuarto orden, por el teorema de Abel–Ruffini¹, sabemos que no es posible encontrar una para polinomios de grado mayor a 4.

En esta tesis se muestra el desarrollo teórico detrás de algunos de los trabajos en la literatura más relevantes en cuanto a solución numérica de ecuaciones diferenciales de tercer orden con valores en la frontera. Se utilizarán distintos métodos para aproximar numéricamente soluciones a ciertos problemas. Entre estos métodos están el de splines (Khan & Aziz, 2002), diferencias finitas (Salama & Mansour, 2005) y matriz de diferenciación de Chebyshev (Baltensperger & Trummer, 2003), un método de colocación de la rama de los métodos espectrales.

La finalidad principal de este trabajo es presentar los resultados numéricos obtenidos mediante comparaciones entre los métodos, construcción, error y orden de convergencia con la finalidad de estimar bajo qué criterios un método puede o no ser más eficiente que otro según los parámetros expuestos concluyendo con la solución numérica del problema de eigenvalores con cada uno de los métodos estudiados. En el capítulo 6 se presentan los resultados del estudio de este último problema y se demuestran algunas inconsistencias encontradas en la literatura.

1.1. Antecedentes

A lo largo de los años, implementaciones numéricas y el desarrollo de diferentes métodos para aproximar la solución a un problema de ecuaciones diferenciales han ido surgiendo y evolucionando.

¹**Teorema (Abel-Ruffini).** La ecuación general de grado igual o mayor a 5 no es soluble por radicales. Es decir, no existe una fórmula para expresar las raíces de dicha ecuación, en términos de los coeficientes, por medio de la combinación finita de sumas, restas, multiplicaciones, divisiones y radicales.

Partiendo con la introducción del método de diferencias finitas por el gran matemático Brook Taylor en 1715, hasta los métodos más sofisticados que aprovechan la tecnología actual como la solución de ecuaciones diferenciales de orden superior basado en deep learning (Han et al., 2017).

Es muy común que a partir de métodos establecidos en la literatura, se hagan modificaciones o generalizaciones con el fin de implementar nuevas ideas; un ejemplo de esto, es el método de elemento finito, basado en el método de Richard Courant y publicado por primera vez en 1943 por Richard Courant, mismo que desde principios de 1922 ya daba muestras de poner en práctica esta idea (Williamson, 1980).

Salama & Mansour (2005) proponen un esquema de diferencias finitas de cuarto orden de convergencia para la solución de problemas de tercer orden con condiciones en la frontera. Los autores comparan la solución aproximada de la ecuación de Falkner–Skan (Falkner & Skan, 1931) obtenida con su método con el método estándar de diferencias finitas de segundo orden y el método de splines quíntuples. La ecuación de Falkner-Skan describe un problema de condiciones de frontera de tercer orden no lineal y tiene la característica de no tener solución cerrada (Asaithambi, 2005).

Por otra parte, Khan & Aziz (2002) presentan una solución al mismo problema de condiciones de frontera de tercer orden mediante el método de trazadores o splines de quinto orden demostrando una mejora en cuanto a orden de efectividad con respecto al método de splines con las mismas características propuesto por Caglar et al. (1999).

Los métodos de principal interés para este trabajo son los conocidos como métodos espectrales y, en particular, los métodos pseudoespectrales o también llamados métodos de colocación. Estudios teóricos y numéricos han confirmado que en problemas con una solución suave, los métodos de colocación convergen más rápido a la solución que los métodos de diferencias finitas o de elemento finito (Hussaini & Zang, 1987). Una de las grandes ventajas de estos métodos es que no se presenta dificultad alguna ante la falta de linealidad de las ecuaciones involucradas.

La popularidad de los métodos pseudoespectrales creció al final de la década de los 80's y, rápidamente, se comenzaron a implementar en distintas aplicaciones (Boyd, 2001). En este tipo de métodos, cada variable dependiente en el sistema de ecuaciones es aproximada por un polinomio de grado finito.

Como es de esperarse, es bien conocido que los métodos de colocación pueden ser correctamente aplicados a problemas de segundo o cuarto orden con una buena precisión. Weideman & Trefethen (1988) trabajaron en la obtención de eigenvalores de un problema de segundo orden con condiciones de frontera de tipo Dirichlet y hacen mención de como es que, para la fecha de publicación, se estaban descubriendo

las propiedades y la efectividad de los métodos espectrales para la solución de problemas de segundo orden que conocemos hoy en día.

A pesar de las distintas aplicaciones de los métodos espectrales en sistemas de segundo y cuarto orden, (inclusive cuando se trata de problemas no lineales) no se ha realizado un estudio extensivo en problemas de tercer orden.

Uno de los primeros objetivos aplicados a la metodología espectral, fue la idea propuesta por Huang & Sloan (1992) de construir reglas de cuadraturas Gaussianas generalizadas que facilitarían la elección de puntos de colocación para la aproximación pseudoespectral de ecuaciones diferenciales de cualquier orden. De tener éxito, estas reglas serían utilizadas para la construcción de métodos pseudoespectrales para problemas de valor de límite de tercer orden o de valor de límite inicial.

De la Garza & Mariscal (2008) utilizan los polinomios de Chebyshev como funciones de prueba para encontrar la solución del problema de eigenvalores de tercer orden.

1.2. Preguntas de investigación

Del trabajo de De la Garza & Mariscal (2008) se rescata la observación de un posible vacío analítico en el trabajo de Huang & Sloan (1992) en la cual los autores no demuestran formalmente el planteamiento de una aseveración² para el problema de eigenvalores de tercer orden dejando abierta la posibilidad a un análisis a fondo para posibles aportes.

La incógnita anterior sobre la veracidad de la premisa, en combinación con el hecho de que esta haya sido contemplada como cierta en trabajos posteriores (Renaut & Su, 1997) y la dificultad del problema de ecuaciones diferenciales de tercer orden son algunas de las motivaciones principales para la realización de este estudio.

De lo anterior, surgen las siguientes preguntas de investigación como lineamiento de la tesis:

- ¿Cómo se comparan los métodos reportados en la literatura con los métodos espectrales de colocación en la solución de problemas diferenciales de tercer orden con valores en la frontera?

²El autor afirma que, para el problema de eigenvalores $u''' = \lambda u$ con condiciones homogéneas en $[-1, 1]$, los eigenvalores λ son todos reales negativos.

- ¿Qué comportamiento tienen los diferentes métodos numéricos en la búsqueda del espectro del problema?
- ¿Es correcta la aseveración sobre que los eigenvalores del problema simple son reales no negativos?

1.3. Objetivos

Con lo mencionado anteriormente sobre la complejidad de obtener la solución analítica de ecuaciones diferenciales de tercer orden, en conjunto con las preguntas de investigación planteadas, se tiene el siguiente objetivo general y los siguientes objetivos específicos para el presente trabajo de tesis.

1.3.1. Objetivo general

Realizar un estudio numérico para aproximar la solución de ecuaciones diferenciales de tercer orden y con ello obtener una métrica comparativa y clasificatoria de los métodos utilizados ante problemas específicos.

1.3.2. Objetivos específicos

- Implementar los métodos de splines, diferencias finitas y el método de colocación pseudoespectral de Chebyshev para operadores diferenciales de tercer orden con condiciones en la frontera.
- Comparar las aproximaciones de dichas implementaciones en diferentes problemas, para identificar ventajas específicas y las limitaciones de cada uno de ellos.
- Aplicar los métodos implementados a problemas de eigenvalores en operadores diferenciales de tercer orden.
- Caracterizar y solventar algunos de los problemas reportados en la literatura cuando se aplica el método de colocación de Chebyshev al problema de eigenvalores de tercer orden con condiciones homogéneas.

- Construir un contraejemplo de la aseveración en (Mulholland, 1995) estudiando los casos particulares para los eigenvalores λ .

1.4. Metodología

Con el fin de cumplir con los objetivos planteados para esta tesis y, al tratarse de un estudio numérico con enfoque tanto computacional como matemático, la metodología empleada era relativamente sencilla estructuralmente hablando; desarrollar toda la teoría matemática detrás de cada artículo con la finalidad de entender correctamente el trabajo de los autores, poder recuperar los resultados e implementar comparaciones con métodos adicionales. Se tenía como objetivo realizar las demostraciones omitidas en artículos relevantes al estudio para posteriormente dar paso a implementaciones computacionales. En estas implementaciones se utilizaron distintos métodos para solucionar ecuaciones diferenciales de tercer orden con condiciones de frontera. Se tomaron en cuenta distintas técnicas al definir condiciones de frontera adicionales en el sistema. Los resultados obtenidos fueron para intervalos discretizados en distintas mallas de $n = 2^k$ nodos.

1.5. Estructura de la tesis

El resto del contenido de esta tesis se encuentra organizado de la siguiente manera: en el capítulo 2 se abordan los fundamentos teóricos, conceptos preliminares y definiciones que serán utilizadas a lo largo de la tesis con el fin de tener un texto rico en auto contenido. En los capítulos 3, 4 y 5 se muestra la definición, construcción, implementación y resultados numéricos de solucionar ecuaciones diferenciales de tercer orden utilizando los métodos de splines, diferencias finitas y matriz de diferenciación de Chebyshev, respectivamente. En el capítulo 6 se estudia el problema específico de eigenvalores y se discuten algunas afirmaciones encontradas en la literatura. Posteriormente se muestra la efectividad de los distintos métodos estudiados en este trabajo aplicados a la resolución de este problema. Finalmente, en el capítulo 7 se exponen las conclusiones, observaciones y el trabajo a futuro.

Capítulo 2. Preliminares

En este capítulo se muestran algunos elementos teóricos que es conveniente formalizar con el propósito de facilitar la comprensión de términos y notaciones que se presentarán a lo largo de este trabajo de tesis. Partiremos con la construcción formal de una ecuación diferencial ordinaria (EDO) con valores en la frontera. Posteriormente se explican algunos conceptos relacionados con la solución numérica de una EDO como son los distintos tipos de errores, y convergencia de la solución aproximada.

2.1. Forma general de una ecuación diferencial

Una ecuación diferencial ordinaria en un dominio \mathcal{D} , es una relación funcional entre una función $u(x)$ y sus derivadas

$$F(u(x), u'(x), u''(x), \dots, u^{(n)}(x)) = f(x), \quad x \in \mathcal{D} = (a, b), \quad (1)$$

en donde la función $f(x)$ que aparece en el lado derecho de 1 es una función conocida de la variable independiente x . Decimos entonces, que la ecuación diferencial ordinaria (EDO) es del orden de la derivada más alta que aparece en 1. Además, decimos que es homogénea si $f(x) = 0$.

En muchas ocasiones y para los propósitos de esta tesis, la relación funcional que aparece del lado derecho de la ecuación 1, es tal, que se puede extraer la n -ésima derivada de $u(x)$. En este caso, la ecuación 1 toma la forma explícita,

$$u^{(n)}(x) + F(u(x), u'(x), u''(x), \dots, u^{(n-1)}(x)) = f(x), \quad x \in \mathcal{D}. \quad (2)$$

De esta manera, encontrar la solución a la ecuación 2 consiste en encontrar $u(x)$ que satisface la EDO $\forall x \in \mathcal{D}$.

Generalmente, la EDO 2 se complementa con ciertas condiciones en la función $u(x)$ y en sus $n - 1$ primeras derivadas en uno, dos o más puntos en la frontera o en el interior de \mathcal{D} . Cuando se trata de una EDO con n condiciones en el punto inicial de la frontera del dominio \mathcal{D} , decimos que se trata de un problema con valores iniciales. Si por otra parte, tenemos algunas condiciones en un extremo del dominio y otras en el otro, hablaremos de un problema con condiciones en la frontera.

En esta tesis, se busca realizar un estudio numérico de ecuaciones diferenciales de tercer orden con

valores en la frontera y, de esta manera, el objeto de estudio del trabajo queda explícitamente dado por,

$$\frac{d^3 u(x)}{dx^3} = u'''(x) = F(u(x), u'(x), u''(x), f(x)), \quad x \in (a, b) \quad (3)$$

sujeta a las condiciones de frontera,

$$\alpha_0 u(a) + \alpha_1 u'(a) + \alpha_2 u''(a) = \alpha_3, \quad (4)$$

$$\beta_0 u(a) + \beta_1 u'(a) + \beta_2 u''(a) = \beta_3, \quad (5)$$

$$\gamma_0 u(b) + \gamma_1 u'(b) + \gamma_2 u''(b) = \gamma_3, \quad (6)$$

en donde las α_s, β_s y γ_s son números reales dados. Si $\alpha_3 = \beta_3 = \gamma_3 = 0$, decimos que las condiciones de frontera son homogéneas. En el caso en que tanto la ecuación diferencial como las condiciones de frontera sean homogéneas, diremos que estamos ante un problema homogéneo.

2.1.1. Operadores diferenciales lineales

En ocasiones, nos referimos a la relación funcional que aparece en el lado izquierdo de la ecuación 1 como un operador diferencial de orden n y escribimos

$$M[u(x)] = F(u(x), u'(x), u''(x), \dots, u^{(n)}(x)) = f(x), \quad x \in \mathcal{D} \quad (7)$$

De especial interés, son los operadores diferenciales en donde $F(u(x), u'(x), u''(x), \dots, u^{(n)}(x))$ es lineal con respecto a la función $u(x)$ y sus n derivadas. Generalmente, se denota por $L[u(x)]$ a un operador diferencial lineal. De manera explícita, el operador diferencial lineal de tercer orden queda de la siguiente manera

$$L[u(x)] = p(x)u'''(x) + q(x)u''(x) + r(x)u'(x) + s(x)u(x). \quad (8)$$

Si se tiene un operador diferencial homogéneo $M[u(x)] = 0$, sujeto a condiciones de frontera homogéneas, tenemos un problema homogéneo. Evidentemente, un problema lineal homogéneo tiene la solución trivial $u = 0$. Bajo ciertas condiciones sobre los coeficientes $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$ y $s(x)$, la solución trivial al problema lineal homogéneo es única.

Consideremos ahora la ecuación diferencial lineal homogénea escrita de la siguiente manera,

$$L[u(x)] = p(x)u'''(x) + q(x)u''(x) + r(x)u'(x) + s(x)u(x) = \lambda w(x)u(x), \quad (9)$$

en el problema lineal homogéneo de tercer orden. Al buscar valores de λ para los cuales existan soluciones diferentes de la trivial, tenemos lo que se conoce como un problema de eigenvalores o valores propios. Estos valores λ , si es que existen, son conocidos como los valores propios y la función o funciones que satisfacen el problema de eigenvalores son conocidas como la(s) eigenfunción(es) correspondientes a dicho eigenvalor. La función $w(x)$, que aparece en la ecuación 9 se le conoce como función peso. Al conjunto de todas las parejas de eigenvalores y sus correspondientes eigenfunciones se le conocen como el espectro del operador diferencial $L[u(x)]$.

2.2. Resolución de ecuaciones diferenciales

2.2.1. Solución analítica

Dada la ecuación diferencial 1 sujeta a ciertas condiciones iniciales o de frontera, solucionar analíticamente implica encontrar, de forma cerrada, mediante desarrollo matemático una función $y(x)$ que satisface la ecuación diferencial exactamente; es decir, al sustituir tanto la función $y(x)$ como sus derivadas, la ecuación diferencial debe cumplirse íntegramente.

2.2.2. Problemas con valor en la frontera

En problemas de valor en la frontera, se buscan soluciones $y(x)$ que además de satisfacer la ecuación diferencial, también deben cumplir con las condiciones de frontera dadas en el problema. Con esto, se pasa de tener una solución general a una solución explícita para dicho problema.

2.2.3. Solución numérica

En ocasiones, encontrar una solución analítica de una ecuación diferencial no es posible, por esto se recurre a realizar una aproximación a la solución mediante el uso de métodos numéricos. La esencia de estos métodos consiste en discretizar el dominio de la variable independiente x , aproximando la función desconocida $y(x)$ en cada nodo.

2.3. Tipos de errores

Si bien es posible encontrar soluciones exactas mediante una aproximación numérica si el problema se presta para ello, en la mayoría de los casos se presentará una diferencia entre el valor real y el aproximado. A esto lo conocemos como error absoluto (E_{abs}) y se define por la expresión:

$$E_{\text{abs}} = |y(x_n) - y_n| \quad (10)$$

donde $y(x_n)$ representa el valor real de la función en el nodo x_n y y_n el valor aproximado en el mismo. Se utiliza el valor absoluto de la diferencia pues buscamos conocer la distancia o rango entre las soluciones.

Mientras que la ecuación 10 nos indica la diferencia exacta entre soluciones, en algunos casos este indicador es inmensurable por si solo puesto que dependerá de la naturaleza del problema. Por ejemplo, si quisiéramos estimar la distancia entre el sol y la tierra con un error absoluto de 1 metro, y en cambio quisiéramos estimar la distancia entre un auto y una persona con error absoluto de 1 metro, a pesar de tener un error absoluto igual, la diferencia en cuanto a contexto es abismal. Por ello, para tener un mejor indicador sobre qué tan eficiente es una aproximación se da uso del error relativo que es, por así decirlo, proporcional al tamaño del problema. El error relativo (E_{rel}) se define como:

$$E_{\text{rel}} = \frac{|y(x_n) - y_n|}{|y(x_n)|} \quad (11)$$

Los errores de redondeo (E_{rd}) surgen debido a la limitación en la representación de números en una computadora. Estos errores se acumulan durante los cálculos numéricos; por ejemplo, al sumar números pequeños a números grandes, los dígitos menos significativos pueden perderse debido a la limitación de precisión de la propia herramienta de cómputo.

2.4. Precisión y exactitud

En muchas disciplinas científicas y técnicas, es fundamental comprender y evaluar la calidad de las mediciones y los resultados. Dos conceptos clave en este contexto son la precisión y la exactitud. La precisión se refiere a cuán consistente o repetible es un conjunto de mediciones o resultados cuando se realiza la misma medición o cálculo de forma repetida. Por otra parte, la precisión está relacionada con la dispersión de los datos; cuanto menor sea la dispersión de las mediciones, mayor será la precisión. Esto

es de interés debido a que si se trabaja con un método numérico en específico, deseamos ver cómo se comporta ante ecuaciones diferenciales cuyas estructuras o propiedades sean similares como por ejemplo linealidad, suavidad en las soluciones, periodicidad, etc.

Finalmente, la exactitud se refiere a cuán cerca está una medición o un resultado del valor verdadero o del valor teóricamente correcto. Es decir, la exactitud no es otra cosa más que el resultado del error absoluto de 10.

2.5. Convergencia y orden de convergencia

Numéricamente hablando, la convergencia es un aspecto que permite evaluar de la eficacia y la precisión de los métodos. Si un método funciona para una ecuación dada y encuentra la aproximación al problema dado diremos que el método es convergente. Por otra parte, si quisiéramos comparar dos métodos entre sí, que ya sabemos que convergen, utilizamos el orden de convergencia para diferenciar la rapidez con la que devuelven la solución correcta.

2.5.1. Convergencia

Un método numérico es convergente si, para un tamaño de paso h que tiende a cero, el error entre la aproximación numérica y_n y la solución exacta $y(x_n)$ tiende a cero. Matemáticamente, un método numérico es convergente si:

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_{\text{abs}} = \lim_{h \rightarrow 0} E_{\text{rel}} = 0 \quad (12)$$

La convergencia asegura que a medida que refinamos la discretización (usando tamaños de paso más pequeños), la aproximación numérica se acerca cada vez más a la solución exacta de la ecuación diferencial.

El análisis de convergencia es fundamental en la solución numérica de ecuaciones diferenciales, ya que nos garantiza que las soluciones obtenidas son útiles y precisas a medida que mejoramos la resolución del método empleado. Sin convergencia, no podríamos confiar en que el método nos proporcione resultados cercanos a la solución real, independientemente de cuánto esfuerzo pongamos en la computación.

2.5.2. Orden de convergencia

El orden de convergencia se utiliza para cuantificar la velocidad a la que un algoritmo numérico se acerca a la solución deseada a medida que se realizan iteraciones sucesivas, es decir, describe cuan rápido disminuyen los errores de las ecuaciones 10 y 11. El orden de convergencia se expresa generalmente como un número real y puede tomar valores positivos.

Un algoritmo tiene convergencia lineal cuando el error de aproximación en cada iteración disminuye en un factor constante. Matemáticamente, se expresa como:

$$|y_{n+1} - \xi| \leq C|y_n - \xi| \quad (13)$$

Donde ξ es la solución exacta, y_n es la aproximación en la n -ésima iteración, y C es una constante positiva menor que 1.

Decimos que un algoritmo tiene convergencia cuadrática cuando el error de aproximación disminuye en un factor cuadrático en cada iteración, es decir,

$$|y_{n+1} - \xi| \leq C|y_n - \xi|^2, \quad (14)$$

Donde nuevamente ξ es la solución exacta, y_n es la aproximación en la n -ésima iteración, y C es una constante positiva.

Algunos algoritmos pueden tener un orden de convergencia mayor que 2, lo que significa que disminuyen el error de aproximación aún más rápido. De manera general, el orden de convergencia está dado por el límite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^q} = C, \quad (15)$$

donde el exponente q es el número que representa el orden de convergencia.

De lo anterior, se puede deducir que el orden de convergencia es un indicador clave de la eficiencia de un algoritmo numérico y que algoritmos con un orden de convergencia más alto requerirán menos iteraciones para alcanzar la precisión deseada en comparación con aquellos con un orden de convergencia más bajo. Sin embargo, no todos los problemas admiten algoritmos con convergencia cuadrática o de mayor orden, por lo que la elección del algoritmo adecuado depende de la naturaleza del problema y la facilidad de implementación.

Capítulo 3. Método de splines

En muchas áreas del conocimiento, como física, ingeniería, finanzas y el cómputo en general, la cantidad de datos que se generan tras un fenómeno, experimento o proceso estadístico puede llegar a ser muy grande (Erdogan, 2013). El uso de esquemas de interpolación para los datos obtenidos es una práctica común para realizar representaciones continuas y significativas de los datos. La interpolación es una herramienta con muchas aplicaciones que permite hacer estimaciones para valores intermedios, predicciones y generar curvas suaves entre puntos.

En el proceso de interpolación, se busca que las funciones crucen por cada uno de los puntos o nodos en donde se conoce el valor de la variable dependiente. Una de las implementaciones más sencillas es la de usar funciones polinomiales. Evidentemente, un polinomio interpolante de grado n , requiere al menos $n+1$ nodos. Sin embargo, el uso de polinomios de alto grado, puede generar inestabilidades y oscilaciones no deseadas. En particular, se pueden buscar funciones polinomiales por tramos, que se conectan entre sí de manera suave, comúnmente conocidas como splines.

Una spline es una función polinómica a trozos que se utiliza para interpolar o aproximar conjuntos de datos entre nodos adyacentes. Se construyen dividiendo el dominio de la función en segmentos más pequeños y representando la función como un polinomio de bajo grado en cada uno de estos segmentos. Estos polinomios se combinan de manera continua en los puntos de unión, creando una función suave y continua en todo el dominio (Haghighi et al., 2020).

Para el caso de splines lineales, se tiene un conjunto de segmentos de rectas que unen los nodos a interpolar, formando así una función que, si bien sería continua, en general, su primera derivada sería discontinua en cada uno de los nodos debido a que la unión de ambos segmentos formaría un vértice o pico. Una situación similar a la que se presenta con la función $f(x) = |x|$ que tiene una primera derivada indeterminada en $x = 0$. Debido a su simplicidad, las splines lineales no son objeto de estudio más allá de su interés didáctico e introductorio a polinomios interpolantes y regresión lineal. A diferencia de las splines lineales, las cuadráticas cuentan con primera derivada continua, las cúbicas con primera y segunda derivada continua, y así sucesivamente. La elección del grado de la spline que se va a utilizar depende, en gran medida de la naturaleza de los datos y de los requisitos específicos del problema que se va a estudiar. Se busca que sean suficientemente suaves y que a la vez sean flexibles para adaptarse a variaciones en los datos, pero no tan oscilantes como polinomios de grados altos. Independientemente del grado de las splines, las funciones a trozos que se pretenden obtener deben de cumplir con ciertas propiedades fundamentales para su correcta implementación.

Las splines se utilizan en una amplia variedad de campos debido a su versatilidad para representar curvas y superficies suaves. Son una buena herramienta en muchos campos de la ciencia al aproximar e interpolar datos, asistiendo a representar resultados utilizando curvas. Se distinguen por su papel en el diseño de gráficos por computadora. De especial interés en esta tesis, es el uso de splines para la integración numérica de ecuaciones diferenciales.

En este capítulo se muestra la construcción y algunas de las propiedades fundamentales de las splines y de sus derivadas en los nodos interpolantes. Se presenta la construcción de splines de quinto orden para resolver ecuaciones diferenciales de tercer orden con el propósito de reproducir algunos resultados de la literatura. Finalmente, se muestran los resultados numéricos obtenidos.

3.1. Construcción de las Splines

Consideremos un conjunto de $n + 1$ puntos (o nodos) x_0, x_1, \dots, x_n , en donde se conocen los valores y_0, y_1, \dots, y_n , ya sea de un conjunto de datos o de una cierta función $y(x)$, en cuyo caso escribimos,

$$y_k = y(x_k), \quad k = 0, \dots, n.$$

Los puntos x_0, x_1, \dots, x_n , definen n intervalos de longitud

$$h_k = x_{k+1} - x_k, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (16)$$

Comúnmente, se utilizan puntos equiespaciados $h = h_k$ constante, práctica que se adoptará en esta tesis.

El término spline originalmente se refería a una tira flexible que se utiliza para dibujar curvas suaves. Construir splines, implica crear n polinomios de grado p ,

$$S_k(x) = a_p x^p + a_{p-1} x^{p-1} + \dots + a_1 x + a_0, \quad (17)$$

en cada uno de los intervalos dados por 16 que interpolen al conjunto de puntos f_0, f_1, \dots, f_n ,

$$S_1(x_0) = y_0, \quad S_k(x_k) = y_k, \quad k = 1, \dots, n. \quad (18)$$

Las propiedades de flexibilidad y suavidad son heredadas a la curva resultante pidiendo continuidad entre splines adyacentes,

$$S_k(x_k) = S_{k+1}(x_k) = y_k, \quad (19)$$

y continuidad entre las primeras $p - 1$ derivadas

$$\begin{aligned} S'_k(x_k) &= S'_{k+1}(x_k), \\ S''_k(x_k) &= S''_{k+1}(x_k), \\ &\vdots \\ S_k^{(p-1)}(x_k) &= S_{k+1}^{(p-1)}(x_k), \end{aligned} \quad (20)$$

en cada uno de los nodos interiores, es decir que las p condiciones 19-20, son válidas para $k = 1, \dots, n - 1$.

Las condiciones de continuidad para las primeras $p - 1$ derivadas vistas en 20, implican que la función $y(x)$ que se pretende interpolar debe ser al menos tipo C^{p-1} .

Para cada uno de los n polinomios dados por 17 se tienen un total de $p + 1$ coeficientes, es decir un total de $n(p + 1)$ cantidades que se tienen que determinar. Por otra parte, de la propiedad de interpolación 18, se tienen $n + 1$ condiciones. Las condiciones de continuidad entre splines 19 y las primeras $p - 1$ derivadas 20 en los nodos interiores, proporcionan $(n - 1)p$ condiciones adicionales. De esta manera, se tienen un total de $n + 1 + (n - 1)p = np + n + 1 - p = n(p + 1) + 1 - p$ relaciones. Usualmente, las $p - 1$ condiciones faltantes, se obtienen imponiendo condiciones en los extremos del intervalo. El uso de splines de grado impar, requiere un número par de condiciones que se pueden repartir equitativamente en cada uno de los extremos.

3.2. Splines en la resolución de ecuaciones diferenciales

Considérese una ecuación diferencial de orden q definida en un intervalo (a, b) de la recta real

$$\frac{d^q y(x)}{dx^q} = y^{(q)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(q-1)}), \quad x \in (a, b) \quad (21)$$

que cumple con q condiciones de frontera repartidas en los extremos $x = a$ y $x = b$. Resolver 21 utilizando splines, implica construir n polinomios de cierto orden p ($p \geq q$) $S_k(x)$, que satisfacen la

ecuación diferencial 21 en los nodos interiores. Tomando una malla equiespaciada,

$$x_0 = a, \quad x_k = kh, \quad , k = 1, \dots, n, \quad (22)$$

con $h = (b - a) / n$, tenemos que,

$$S_k^{(q)}(x_k) = f((x_k), S_k(x_k), S_k'(x_k), S_k''(x_k), \dots, S_k^{(q-1)}(x_k)), \quad k = 1, \dots, n - 1. \quad (23)$$

Al tratar de utilizar splines para aproximar la solución de una ecuación diferencial no conocemos explícitamente el valor de la función $y(x)$, en los $n + 1$ nodos x_0, x_1, \dots, x_n . Sin embargo, la ecuación 23 arroja un total de $n - 1$ relaciones, que junto con las condiciones de frontera suman un total de $n + q - 1$ ecuaciones. Como antes, la condiciones de continuidad entre splines 19 y entre las primeras $p - 1$ derivadas 20 en los nodos interiores, arrojan $(n - 1)p$ relaciones adicionales para dar un total de $n + q - 1 + np - p = n(p + 1) + q - p - 1$. En este caso, el total de relaciones faltantes, será de $p + 1 - q$.

Para el caso de ecuaciones diferenciales de tercer orden, se tienen $p - 2$ condiciones adicionales que se tienen que imponer. Como se ha mencionado anteriormente, usualmente estas condiciones se implementan en los puntos extremos. En este trabajo se seguirá la implementación de Khan & Aziz (2002), en donde se aproximan las soluciones a ecuaciones diferenciales de tercer orden utilizando splines de quinto grado.

3.3. Splines quínticas

Las ideas generales que se expusieron en la sección 3.1 se aplican explícitamente a la construcción de splines de grado cinco. Se buscan n polinomios de quinto grado $S_k(x)$ ($k = 1, \dots, n$), cada uno de ellos definidos en el intervalo $[x_{k-1}, x_k]$ que cumplen con las condiciones 18-20. Estas condiciones se muestran explícitamente para splines quínticas, lo cual permite, además, adoptar una notación para los valores de las primeras cuatro derivadas en los nodos.

De la continuidad entre splines adyacentes,

$$S_k(x_k) = S_{k+1}(x_k) = y_k, \quad k = 1, \dots, n - 1, \quad (24)$$

$$S_1(x_0) = y_0, \quad S_n(x_n) = y_n, \quad (25)$$

mientras que de la continuidad en la primera derivada,

$$S'_k(x_k) = S'_{k+1}(x_k) = m_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (26)$$

$$S'_1(x_0) = m_0, \quad S'_n(x_n) = m_n. \quad (27)$$

En general, los valores de m_0, m_1, \dots, m_n , son desconocidos. Similarmente, para la segunda, tercera y cuarta derivada, tenemos que,

$$S''_k(x_k) = S''_{k+1}(x_k) = \Omega_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (28)$$

$$S''_1(x_0) = \Omega_0, \quad S''_n(x_n) = \Omega_n. \quad (29)$$

$$S'''_k(x_k) = S'''_{k+1}(x_k) = \Theta_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (30)$$

$$S'''_1(x_0) = \Theta_0, \quad S'''_n(x_n) = \Theta_n. \quad (31)$$

$$S_k^{(4)}(x_k) = S_{k+1}^{(4)}(x_k) = \Phi_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (32)$$

$$S_1^{(4)}(x_0) = \Phi_0, \quad S_n^{(4)}(x_n) = \Phi_n. \quad (33)$$

Como se mencionó anteriormente, si conocemos los valores de la función en los $n+1$ puntos, tendríamos $6n-4$ condiciones y las 4 relaciones faltantes se determinan por algún tipo de condiciones en los puntos extremos. Si se utiliza splines para aproximar la solución a una ecuación diferencial de tercer orden, la ecuación se enforza en los $n-1$ puntos interiores; esto, junto con las 3 condiciones de frontera, y las de continuidad entre splines y primeras dos derivadas da un total de $6n-3$. Nuevamente, las 3 relaciones faltantes se determinan por algún tipo de condiciones en los puntos extremos.

Existen diversas maneras de calcular las splines quinticas, el método que se presenta aquí, además de simplificar los cálculos, permite encontrar splines cúbicas como un caso particular.

Se escribe al polinomio de quinto grado $S_k(x)$ como la suma de dos polinomios, uno de tercer grado $Q_k(x)$ y otro de quinto grado $P_k(x)$,

$$S_k(x) = Q_k(x) + P_k(x), \quad (34)$$

donde además, le pediremos a $Q_k(x)$ ser un polinomio de Hermite, es decir un polinomio que interpola

a la función y a la primera derivada en cada uno de los nodos. De esta manera, $Q_k(x)$ es un polinomio de tercer grado que coincide con la función en x_{k-1} y en x_k ,

$$Q_k(x_k) = Q_{k+1}(x_k) = S_k(x_k) = S_{k+1}(x_k) = y_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (35)$$

$$Q_1(x_0) = S_1(x_0) = y_0, \quad Q_n(x_n) = S_n(x_n) = y_n, \quad (36)$$

es decir, las mismas condiciones de continuidad en la función que cumplen las splines de quinto grado. De esta manera, las n cúbicas $Q_1(x), Q_2(x), \dots, Q_n(x)$ cumplen con 24 y 25.

Por otra parte, el polinomio de quinto grado $P_k(x)$, cumple con

$$P_k(x_k) = P_{k+1}(x_k) = 0, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (37)$$

$$P_1(x_0) = P_n(x_n) = 0. \quad (38)$$

Similarmemente, al tomar la derivada,

$$Q'_k(x_k) = Q'_{k+1}(x_k) = S'_k(x_k) = S'_{k+1}(x_k) = m_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (39)$$

$$Q'_1(x_0) = S'_1(x_0) = m_0, \quad Q'_n(x_n) = S'_n(x_n) = m_n. \quad (40)$$

Mientras que $P_k(x)$, cumple con

$$P'_k(x_k) = P'_{k+1}(x_k) = 0, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (41)$$

$$P'_1(x_0) = P'_n(x_n) = 0. \quad (42)$$

3.3.1. Polinomios cúbicos de Hermite $Q_k(x)$

Es conveniente escribir los n polinomios cúbicos de Hermite $Q_k(x)$ de la siguiente manera,

$$Q_k(x) = a_k(x - x_k)^2(x - x_{k-1}) + b_k(x - x_k)(x - x_{k-1}) + c_k(x - x_k) + d_k \quad (43)$$

Al evaluar 43 en los nodos x_k ($k = 1, \dots, n$),

$$d_k = y_k. \quad (44)$$

Similarmemente,

$$Q_k(x_{k-1}) = -c_k h + d_k = -c_k h = f_{k-1}.$$

Resolviendo para c_k ,

$$c_k = \frac{y_k - y_{k-1}}{h}. \quad (45)$$

válida para $k = 1, \dots, n$.

Tomando la derivada de 43 y agrupando términos,

$$Q'_k(x) = a_k(x - x_k)(3x - x_k - 2x_{k-1}) + b_k(2x - x_k - x_{k-1}) + c_k. \quad (46)$$

Evaluando 46 en los nodos x_k ($k = 1, \dots, n$),

$$Q'_k(x_k) = b_k h + c_k = m_k, \quad (47)$$

de lo cual tenemos que,

$$b_k = \frac{m_k}{h} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h^2}. \quad (48)$$

Al evaluar la derivada de $Q_k(x)$ en el punto x_{k-1} , tenemos que,

$$m_{k-1} = Q'_k(x_{k-1}) = a_k h^2 - b_k h + c_k,$$

resolviendo para a_k

$$a_k = \frac{1}{h^2}(m_{k-1} + b_k h - c_k) = \frac{1}{h^2}(m_{k-1} + m_k - 2c_k). \quad (49)$$

Sustituyendo los valores de b_k y de c_k dados por 45 y 48, respectivamente,

$$a_k = \frac{m_k + m_{k-1}}{h^2} - 2\frac{y_k - y_{k-1}}{h^3}. \quad (50)$$

Tomando ahora la segunda derivada de 43,

$$Q''_k(x) = 2a_k(3x - 2x_k - x_{k-1}) + 2b_k, \quad (51)$$

y evaluando en los nodos x_k

$$Q_k''(x_k) = 2a_k h + 2b_k. \quad (52)$$

Mientras que,

$$Q_k''(x_{k-1}) = -4a_k h + 2b_k. \quad (53)$$

Al sustituir los valores de a_k y b_k , dados por 48 y 50 en estas relaciones, tenemos que,

$$Q_k''(x_k) = 2 \frac{m_{k-1} + 2m_k}{h} - 6 \frac{y_k - y_{k-1}}{h^2}, \quad (54)$$

Mientras que

$$Q_k''(x_{k-1}) = 2a_k(2x_{k-1} - 2x_k) + 2b_k = -4a_k h + 2b_k,$$

con lo que obtenemos,

$$Q_k''(x_{k-1}) = -2 \frac{m_k + 2m_{k-1}}{h} + 6 \frac{y_k - y_{k-1}}{h^2}$$

Notemos que el salto en la segunda derivada del polinomio cúbico $Q_k(x)$ en el punto x_{k-1} está dado por,

$$Q_k''(x_{k-1}) - Q_{k-1}''(x_{k-1}) = -2[(2a_k + a_{k-1})h - (b_k - b_{k-1})],$$

que al utilizar 48 y 50, y simplificar, la expresión toma la forma,

$$Q_k''(x_{k-1}) - Q_{k-1}''(x_{k-1}) = -2 \frac{m_k + 4m_{k-1} + m_{k-2}}{h} + 6 \frac{y_k - y_{k-2}}{h^2}. \quad (55)$$

La tercera derivada es constante,

$$Q_k'''(x) = 6a_k,$$

de tal manera que el salto en la tercera derivada de $Q_k(x)$ en el punto x_{k-1} es

$$Q_k'''(x_{k-1}) - Q_{k-1}'''(x_{k-1}) = 6(a_k - a_{k-1}),$$

que al utilizar 50 toma la forma

$$Q_k'''(x_{k-1}) - Q_{k-1}'''(x_{k-1}) = 6 \frac{m_k - m_{k-2}}{h^2} - 12 \frac{y_k - 2y_{k-1} + y_{k-2}}{h^2}. \quad (56)$$

Se puede convertir al polinomio $Q_k(x)$ en una spline de tercer grado, haciendo que 55 se anule, lo que nos daría $n-1$ relaciones lineales para las $n+1$ pendientes en los puntos de la malla m_0, m_1, \dots, m_n con

los $n+1$ valores de la función y_0, y_1, \dots, y_n en esos puntos. Si se conocen los valores de y_0, y_1, \dots, y_n , las splines $Q_k(x)$ ($k = 1, \dots, n$), se calculan tomando condiciones en cada uno de los dos puntos extremos (e.g. splines naturales en donde $Q_1''(x_0) = Q_n''(x_n) = 0$), resolviendo para m_0, m_1, \dots, m_n y calculando los coeficientes de cada spline con 44, 45, 48 y 50.

3.3.2. Los polinomios $P_k(x)$

Dado que los polinomios $P_k(x)$ de quinto grado, cumplen que, $P_k(x_{k-1}) = P_k(x_k) = 0$ y que $P_k'(x_{k-1}) = P_k'(x_k) = 0$ para $n = 1, 2, \dots, n$, los escribimos de la siguiente manera,

$$P_k(x) = e_k(x - x_k)^3(x - x_{k-1})^2 + g_k(x - x_k)^2(x - x_{k-1})^2, \quad (57)$$

La segunda derivada de $P_k(x)$ está dada por,

$$P_k''(x) = 2e_k(x - x_k) \left((2x - x_k - x_{k-1})^2 + 2(x - x_k)(x - x_{k-1}) + 2(x - x_{k-1})(2x - x_k - x_{k-1}) \right) + 2g_k \left((2x - x_k - x_{k-1})^2 + 2(x - x_k)(x - x_{k-1}) \right). \quad (58)$$

Evalutando en $x = x_k$,

$$P_k''(x_k) = 2g_k h^2,$$

mientras que al hacerlo en $x = x_{k-1}$

$$P_k''(x_{k-1}) = 2h^2(g_k - e_k h) = P_k''(x_k) - 2e_k h^3.$$

Con lo que tenemos que el salto de la segunda derivada de $P_k(x)$ en el punto x_{k-1} , está dada por,

$$P_k''(x_{k-1}) - P_{k-1}''(x_{k-1}) = 2h^2(g_k - g_{k-1}) - 2e_k h^3. \quad (59)$$

Calculando ahora la tercera derivada,

$$P_k'''(x) = 12(2x - x_k - x_{k-1})(e_k(x - x_k) + g_k) + 6e_k(2x - x_k - x_{k-1})^2 + 12e_k(x - x_k)(x - x_{k-1}), \quad (60)$$

y evaluando en los puntos $x = x_k$ y $x = x_{k-1}$,

$$P_k'''(x_k) = 6h(e_k h + 2g_k),$$

$$P_k'''(x_{k-1}) = 6h(3e_k h - 2g_k).$$

De lo anterior, tenemos que el salto de la tercera derivada de $P_k(x)$ en el punto x_{k-1} , está dada por,

$$P_k'''(x_{k-1}) - P_{k-1}'''(x_{k-1}) = 6h^2(3e_k - e_{k-1}) - 12h(g_k + g_{k-1}). \quad (61)$$

Calculando ahora la cuarta derivada,

$$P_k^{(4)}(x) = 24e_k(5x - 3x_k - 2x_{k-1}) + 24g_k, \quad (62)$$

se obtiene que,

$$P_k^{(4)}(x_k) = 24(2he_k + g_k), \quad (63)$$

$$P_k^{(4)}(x_{k-1}) = -24(3he_k - g_k). \quad (64)$$

Notando que $Q_k^{(4)}(x) = 0$, de 32 y 34 se tiene que,

$$P_k^{(4)}(x_{k-1}) = S_k^{(4)}(x_{k-1}) = S_{k-1}^{(4)}(x_{k-1}) = P_{k-1}^{(4)}(x_{k-1}) = \Phi_{k-1}.$$

Es decir que $P_k^{(4)}(x_{k-1}) = P_{k-1}^{(4)}(x_{k-1})$, explícitamente,

$$\Phi_{k-1} = 24(2e_{k-1}h + g_{k-1}) = -24(3e_k h - g_k) \quad (65)$$

Utilizando 63 y el lado derecho de 65, podemos eliminar g_k para encontrar e_k .

En términos de las cuartas derivadas de splines adyacentes, esto se puede reescribir como

$$e_k = \frac{\Phi_k - \Phi_{k-1}}{120h}. \quad (66)$$

Similarmente, se tiene que,

$$g_k = \frac{3\Phi_k + 2\Phi_{k-1}}{120}. \quad (67)$$

3.3.3. Las splines $S_k(x)$

Las splines quínticas están dadas por,

$$S_k(x) = Q_k(x) + P_k(x).$$

Explícitamente,

$$\begin{aligned} S_k(x) = & e_k(x - x_k)^3(x - x_{k-1})^2 + g_k(x - x_k)^2(x - x_{k-1})^2 \\ & + a_k(x - x_k)^2(x - x_{k-1}) + b_k(x - x_k)(x - x_{k-1}) + c_k(x - x_k) + d_k, \end{aligned}$$

en donde los coeficientes a_k, b_k, c_k, d_k , están dados por, 44-50, en términos de los valores de la función y de su primera derivada en los nodos. Por su parte, los e_k y g_k están dados por 66 y 67, en términos de las cuartas derivadas de splines adyacentes.

Teniendo en cuenta que

$$\Theta_k = P_k'''(x_k) + Q_k'''(x_k),$$

y utilizando los saltos de $Q_k'''(x)$ y $P_k'''(x)$, en $x = x_{k-1}$ (relaciones 56 y 61), la condición 30 de continuidad en la tercera derivada de $S_k(x)$ se puede expresar de la siguiente manera,

$$(3e_k - e_{k-1})h^2 - 2(g_k + g_{k-1})h + a_k - a_{k-1} = 0. \quad (68)$$

Al sustituir los valores los coeficientes 50, 66 y 67, resulta en la siguiente relación entre los valores de la función, la primera y cuarta derivadas de 3 splines consecutivas,

$$(3\Phi_{k-2} + 14\Phi_{k-1} + 3\Phi_k)h^4 + 120(m_{k-2} - m_k)h + 240(y_{k-2} - 2y_{k-1} + y_k) = 0. \quad (69)$$

Se aplica ahora la condición de continuidad en la segunda derivada de $S_k(x)$ entre splines adyacentes 28,

$$\Omega_{k-1} = P_k''(x_{k-1}) + Q_k''(x_{k-1}) = P_{k-1}''(x_{k-1}) + Q_{k-1}''(x_{k-1}).$$

Utilizando el salto en la segunda derivada de los polinomios $Q_k(x)$ y $P_k(x)$ (relaciones 55 y 59), se

obtiene la siguiente relación,

$$h^2 (g_k - g_{k-1}) - e_k h^3 - (2a_k + a_{k-1}) h + (b_k - b_{k-1}) = 0. \quad (70)$$

En este caso, al sustituir los valores de los coeficientes 48, 50, 66 y 67 en 70, se obtiene una nueva relación entre los valores de la función, la primera y cuarta derivadas de 3 splines consecutivas,

$$(\Phi_{k-2} - \Phi_k) h^4 + 60 (m_{k-2} + 4m_{k-1} + m_k) h + 180 (y_{k-2} - y_k) = 0. \quad (71)$$

De las relaciones de recurrencia que expresan la continuidad en la tercera y en la segunda derivada de las splines $S_k(x)$ en el punto x_{k-1} 69-71, válidas para $k = 2, \dots, n$, se puede encontrar el valor de m_k en términos de Φ_k y f_k en cuatro puntos adyacentes,

$$m_k = (2\Phi_{k-1} + 33\Phi_k + 24\Phi_{k+1} + \Phi_{k+2}) \frac{h^3}{720} - (2y_{k-1} + 3y_k - 6y_{k+1} + y_{k+2}) \frac{h^2}{6}. \quad (72)$$

En este momento, es conveniente definir el operador

$$\Lambda P_k = P_{k-2} + 26P_{k-1} + 66P_k + 26P_{k+1} + P_{k+2}. \quad (73)$$

al sustituir 72 en 71, utilizando 73, tenemos que,

$$\Lambda \Phi_k = \frac{120}{h^4} (y_{k-2} - 4y_{k-1} + 6y_k - 4y_{k+1} + y_{k+2}). \quad (74)$$

La relación 74 representa una relación entre el valor de la función en cinco puntos consecutivos y sus correspondientes valores de la cuarta derivada. Finalmente, se utilizan las relaciones 44, 45, 48, 50, 66 y 67 para encontrar los coeficientes de cada spline. De esta manera, se tiene una función interpolante que consiste de polinomios de grado cinco en cada uno de los intervalos de la malla conectados entre sí.

3.4. Operadores diferenciales

La relación 74 además de servir para construir las splines quínticas, representa un operador que sirve para aproximar la cuarta derivada en el punto $x = x_k$. Aplicando ahora el operador Λ a 72, se obtiene,

$$\Lambda m_k = -\frac{5}{h} (f_{k-2} + 10f_{k-1} - 10f_{k+1} + f_{k+2}). \quad (75)$$

Ahora, la relación 75 es un operador que sirve para aproximar la primera derivada en el punto $x = x_k$.

Si ahora aplicamos el operador Λ a la segunda derivada,

$$\begin{aligned}\Omega_k &= S_k''(x_k) = 2g_k h^2 + 2a_k h + 2b_k \\ &= (2\Phi_{k-1} + 3\Phi_k) \frac{h^2}{60} + (m_{k-1} + 2m_k) \frac{2}{h} + (y_{k-1} - y_k) \frac{6}{h^2},\end{aligned}$$

y utilizamos 74 y 75, tenemos que,

$$\Lambda\Omega_k = \frac{20}{h^2} (y_{k-2} + 2y_{k-1} - 6y_k + 2y_{k+1} + y_{k+2}). \quad (76)$$

Similarmente, para la tercera derivada de la spline késima en el punto $x = x_k$

$$\begin{aligned}\Theta_k &= S_k'''(x_k) = 6h^2 e_k + 2hg_k + 6a_k \\ &= \frac{h}{20} (3\Phi_{k-1} + 7\Phi_k) + \frac{6}{h^2} (m_{k-1} + m_k) + \frac{12}{h^3} (y_{k-1} - y_k),\end{aligned}$$

tenemos que

$$\Lambda\Theta_k = -\frac{60}{h^3} (y_{k-2} - 2y_{k-1} + 2y_{k+1} - y_{k+2}). \quad (77)$$

Inclusive, se puede encontrar una relación para el valor de la quinta derivada, notando que

$$\Psi_k = S_k^{(5)}(x_k) = 120e_k = \frac{\Phi_k - \Phi_{k-1}}{h}.$$

Sin embargo, en este caso, al aplicar el operador Λ , se introduce el valor de y_{k-3} ,

$$\Lambda\Psi_k = -\frac{1}{h} (y_{k-3} - 5y_{k-2} + 10y_{k-1} - 10y_k + 5y_{k+1} - y_{k+2}). \quad (78)$$

Las relaciones 74, 75, 76 77 y 78, permiten resolver ecuaciones diferenciales de hasta orden 5. Sin embargo, solo se pueden resolver ecuaciones diferenciales en donde las derivadas aparecen de forma lineal. El interés en este trabajo, es el de recuperar los resultados que aparecen en el trabajo de Khan & Aziz (2002), en donde se resuelven cierto tipo de ecuaciones diferenciales de tercer orden utilizando splines quínticas. En este trabajo, se muestran la construcción de las Splines y las condiciones adicionales al sistema que fueron implementadas. Sin embargo, algunas partes importantes son omitidas y fueron desarrolladas a lo largo de este trabajo. En el capítulo siguiente, se muestra la construcción de las splines utilizando este esquema para encontrar la solución a ecuaciones diferenciales. e muestran algunas de las demostraciones omitidas por los autores y finalmente los resultados obtenidos tras la implementación.

3.5. Solución de ecuaciones diferenciales de tercer orden utilizando splines quínticas

Se busca aproximar la solución a

$$y'''(x) = f(x, y), \quad a < x < b, \quad (79)$$

sujeta a las condiciones de frontera,

$$y(a) = \alpha_0, \quad y'(a) = \alpha_1, \quad y(b) = \beta \quad (80)$$

utilizando splines quínticas. La implementación del método es similar al que se desarrolla en el trabajo de Khan & Aziz (2002).

De esta manera, se define una malla equiespaciada en $[a, b]$ de grosor $h = (b - a) / n$ y adoptando la notación habitual,

$$x_k = x_0 + kh, \quad y_k = y(x_k), \quad k = 0, \dots, n,$$

con $\Theta_k = y'''(x_k)$ y $f_k = f(x_k, y_k)$. En Khan & Aziz (2002), los autores hacen una distinción clara entre problemas lineales y no lineales, sin embargo, aquí la distinción se hará hasta que se muestre la implementación final, en donde el caso lineal

$$f(x, y) = p(x)y(x) + q(x), \quad (81)$$

que en forma discreta toma la forma

$$f_k = p(x_k)y(x_k) + q(x_k) = p_k y_k + q_k. \quad (82)$$

De esta manera, la forma discreta de 79, toma la forma,

$$\Theta_k = f_k, \quad k = 1, \dots, n - 1, \quad (83)$$

mientras que las condiciones de frontera 80 se ven de la siguiente manera,

$$y_0 = \alpha_0, \quad m_0 = y'(x_0) = \alpha_1, \quad y_n = \beta. \quad (84)$$

Al aplicar el operador Λ dado por la relación 73 en la forma discreta de la ecuación diferencial 83 y

después utilizar la ecuación 77 se tiene que

$$-\frac{60}{h^3}(y_{k-2} - 2y_{k-1} + 2y_{k+1} - y_{k+2}) = f_{k-2} + 26f_{k-1} + 66f_k + 26f_{k+1} + f_{k+2}. \quad (85)$$

La relación 85 se puede enforzar directamente solo para $k = 2, \dots, n - 2$. Para enforzarla en $k = 1$ y $k = n - 1$, no basta utilizar las condiciones de frontera 84, ya que y_{k-2} y f_{k-2} son valores fuera de la malla.

3.5.1. Condiciones en los extremos

Al enforzar la ecuación diferencial en su forma discreta 85 en el punto $x = x_1$,

$$-\frac{60}{h^3}(y_{-1} - 2y_0 + 2y_2 - y_3) = f_{-1} + 26f_0 + 66f_1 + 26f_2 + f_3. \quad (86)$$

Similarmemente, en el punto $x = x_{n-1}$ se tiene que,

$$-\frac{60}{h^3}(y_{n-3} - 2y_{n-2} + 2y_n - y_{n+1}) = f_{n-3} + 26f_{n-2} + 66f_{n-1} + 26f_n + f_{n+1}. \quad (87)$$

Las relaciones 86-87 involucran puntos fuera de la malla, de tal manera, que se necesita extrapolar información de puntos de la malla para calcularlos.

Aquí, se utiliza un polinomio de grado n , que interpola a una cierta función $u(x)$ en los $n + 1$ puntos equiespaciados $x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}$,

$$\mathcal{P}_n(x) = u_j + s\Delta u_j + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 u_j + \dots + \frac{s(s-1)\dots(s-n+1)}{n!}\Delta^n u_j, \quad (88)$$

en donde $u(x_i) = u_i$ y

$$s = \frac{x - x_j}{h}. \quad (89)$$

Mientras que el operador que aparece en 88 Δ está dado por

$$\Delta u_i = u_{i+1} - u_i, \quad (90)$$

de tal manera que,

$$\Delta^m u_k = \sum_{l=0}^m (-1)^l \frac{m!}{l!(m-l)!} f_{k+m-l}. \quad (91)$$

Al polinomio interpolador 88 es conocido como el polinomio de Newton-Gregory.

El error asociado al proceso de interpolación es,

$$E(x) = \frac{1}{(n+1)!} u^{(n+1)}(\xi) h^{n+1} s(s-1) \cdots (s-n), \quad (92)$$

donde ξ es un punto en el intervalo mas pequeño que contiene a los puntos $x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}$ y x .

Como se describe en Khan & Aziz (2002), la aproximación a la solución a la ecuación diferencial 79 utilizando splines quínticas es $O(h^7)$, de tal manera que se busca que las aproximaciones de y_{-1}, f_{-1}, y_{n+1} y f_{n+1} sean también $O(h^7)$. Esto se podría lograr aplicando directamente el polinomio 88, y utilizando las condiciones de frontera. Sin embargo, en el trabajo de Khan & Aziz (2002), optaron por imponer la estructura pentadiagonal que resulta de aplicar la ecuación diferencial en su forma discreta 83. Con esto, podremos verificar que lo que afirman los autores en su trabajo.

Se calcula ahora la derivada del polinomio 88 que interpola en los puntos y_{-1}, y_0, y_1, y_2 y y_3 para calcular $y'(x_0) = m_0$

$$m_0 = -\frac{3y_{-1} + 10y_0 - 18y_1 + 6y_2 - y_3}{12h} + O(h^4)$$

y de esta manera tener una expresión para y_{-1}

$$y_{-1} = -4m_0h - \frac{10}{3}y_0 + 6y_1 - 2y_2 + \frac{1}{3}y_3 + O(h^5) \quad (93)$$

que al sustituir del lado izquierdo de 86 se tiene que,

$$-\frac{60}{h^3}(y_{-1} - 2y_0 + 2y_2 - y_3) = -\frac{40}{h^3}(6hm_0 + 8y_0 - 9y_1 + y_3) + O(h^5). \quad (94)$$

Para poder lograr que la expresión 86 sea $O(h^7)$, pero a la vez, el sistema mantenga la estructura pentadiagonal, se iguala 86 a una combinación lineal de valores de la tercera derivada en y_0, y_1, y_2 y y_3 .

$$-40(6hm_0 + 8y_0 - 9y_1 + y_3) = h^3(a_0\Theta_0 + a_1\Theta_1 + a_2\Theta_2 + a_3\Theta_3). \quad (95)$$

En esta relación, se utilizó la notación que se había utilizado anteriormente en 30, $y'''(x_k) = \Theta_k$. Los coeficientes que aparecen en 86 se determinan aproximando las derivadas $\Theta_0, \Theta_1, \Theta_2, \Theta_3$ y m_0 utilizando

un polinomio de sexto grado que interpola en y_0, y_1, \dots, y_6 ,

$$m_0 = -\frac{1}{420h} (1029 y_0 - 2520 y_1 + 3150 y_2 - 2800 y_3 + 1575 y_4 - 504 y_5 + 70 y_6) + O(h^6), \quad (96)$$

$$\begin{aligned} \Theta_k = & \frac{1}{24h^3} [(4y_0 - 24y_1 + 60y_2 - 80y_3 + 60y_4 - 24y_5 + 4y_6) k^3 + \\ & (-42y_0 + 240y_1 - 570y_2 + 720y_3 - 510y_4 + 192y_5 - 30y_6) k^2 \\ & + (140y_0 - 744y_1 + 1644y_2 - 1936y_3 + 1284y_4 - 456y_5 + 68y_6) k \\ & - (147y_0 - 696y_1 + 1383y_2 - 1488y_3 + 921y_4 - 312y_5 + 45y_6)] + O(h^3). \end{aligned} \quad (97)$$

Al sustituir 96 y 97 en 95, cada uno de los coeficientes de las y_k s, se anulan independientemente, de lo cual se llega al siguiente sistema de ecuaciones para los coeficientes a_0, a_1, a_2 y a_3 ,

$$\begin{aligned} -49 a_0 - 15 a_1 - a_2 + a_3 &= 2144, \\ 29 a_0 + 7 a_1 - a_2 - a_3 &= -1080, \\ -461 a_0 - 83 a_1 + 35 a_2 + 13 a_3 &= 14400, \\ 62 a_0 + 8 a_1 - 6 a_2 &= -1640; \end{aligned} \quad (98)$$

cuya solución es,

$$a_0 = -16, a_1 = -90, a_2 = -12, a_3 = -2. \quad (99)$$

Al sustituir el valor de los coeficientes en 95,

$$-20(6hm_0 + 8y_0 - 9y_1 + y_3) = -h^3(8f_0 + 45f_1 + 6f_2 + f_3). \quad (100)$$

en donde ahora los valores f_k suplen a las terceras derivadas. Finalmente, se sustituye el valor de las condiciones de frontera en $x = a$,

$$180y_1 - 20y_3 = 160\alpha_0 + 120h\alpha_1 - h^3(8f_0 + 45f_1 + 6f_2 + f_3). \quad (101)$$

Un desarrollo similar se sigue en el otro extremo, en donde ahora, se aproxima el valor de y_{n+1} que aparece en 87 mediante un polinomio de grado 3 que interpola en $y_{n-3}, y_{n-2}, y_{n-1}$ y y_n

$$y_{n+1} = -y_{n-3} + 4y_{n-2} - 6y_{n-1} + 4y_n + O(h^4). \quad (102)$$

Sustituyendo en el lado derecho de 87,

$$-\frac{60}{h^3} (y_{n-3} - 2y_{n-2} + 2y_n - y_{n+1}) = -\frac{60}{h^3} (2y_{n-3} - 6y_{n-2} + 6y_{n-1} - 2y_n). \quad (103)$$

Como antes, para poder lograr que la expresión 86 sea $O(h^7)$, tenemos que,

$$-60(y_{n-3} - 6y_{n-2} + 6y_{n-1} - 2y_n) = h^3 (a_{n-3}\Theta_{n-3} + a_{n-2}\Theta_{n-2} + a_{n-1}\Theta_{n-1} + a_n\Theta_n), \quad (104)$$

Ahora, los coeficientes se determinan aproximando las derivadas $\Theta_{n-3}, \Theta_{n-2}, \Theta_{n-1}$ y Θ_n utilizando un polinomio de sexto grado que interpola en $y_{n-3}, y_{n-2}, \dots, y_n$. Recogiendo los coeficientes de las y_k s, se llega ahora al siguiente sistema,

$$\begin{aligned} -a_{n-3} + a_{n-2} + 15a_{n-1} + 49a_n &= -960, \\ a_{n-3} + a_{n-2} - 7a_{n-1} - 29a_n &= 360, \\ 13a_{n-3} - 35a_{n-2} + 83a_{n-1} + 461a_n &= -2880, \\ 6a_{n-2} - 8a_{n-1} - 62a_n &= 120, \end{aligned}$$

cuya solución es,

$$a_n = 0, a_{n-1} = -60, a_{n-2} = -60, a_{n-3} = 0.$$

Sustituyendo en 104, agrupando términos, sustituyendo los valores de las funciones por los de las terceras derivadas y utilizando la condición de frontera en $x = b$, llegamos a la condición requerida en el punto $x = x_{n-1}$,

$$2y_{n-3} - 6y_{n-2} + 6y_{n-1} = 2\beta + h^3 (\Theta_{n-2} + \Theta_{n-1}), \quad (105)$$

Las relaciones definidas en 85, junto con las relaciones en los extremos 101-105 definen el sistema de n ecuaciones dado por Splines. Aquí se ha seguido con el desarrollo que se presenta en el trabajo de Khan & Aziz (2002), se construyeron las splines utilizando el seguimiento del trabajo de los autores, agregando los polinomios cúbicos de Hermite con intención de encontrar splines cúbicas de manera particular. Pues se podría interpolar la función y su primera derivada en cada nodo de la malla. Los operadores diferenciales obtenidos al final coinciden con los presentados en el trabajo de Khan & Aziz (2002) y el sistema a resolver resultante posee una estructura pentadiagonal. Esto se mostrará más adelante, tras los resultados de la implementación en el capítulo siguiente.

3.6. Implementación del método

Para las implementaciones computacionales se utilizó la herramienta de cómputo numérico MATLAB⁵, software con el cual se tenía como objetivo codificar la metodología planteada en la sección anterior para verificar el rendimiento del mismo y emular los resultados en la literatura.

De la ecuación 85, el enforzamiento en $x = x_1$ y $x = x_{n-1}$ de 86 y 87, junto a las relaciones 101 y 105, se obtiene el sistema a resolver.

Por simplicidad, se reescribe la identidad 85 redefinida ahora para $j = 1, \dots, N - 1$, pues se tienen relaciones para y_{-1} y y_{n+1}

$$Ay_{j+2} - By_{j+1} - Cy_j + Dy_{j-1} - Ey_{j-2} = \alpha_j + O(h^7) \quad (106)$$

donde,

$$A = 60 - h^3 g_{j+2}, \quad B = 120 + 26h^3 g_{j+1}, \quad C = 66h^3 g_j, \quad D = 120 - 26h^3 g_{j-1},$$

$$E = 60 + h^3 g_{j-2}, \quad \alpha_j = h^3 (q_{j+2} + 26q_{j+1} + 66q_j + 26q_{j-1} + q_{j-2})$$

Puesto que A, B, C, D, E, α son conocidos, se tiene un sistema pentadiagonal con $n-1$ ecuaciones y “ $n+2$ ” incógnitas porque en realidad se conocen, $y_0 = \alpha_0, y_n = \beta$ por las condiciones de frontera dadas en el problema, esto resulta en $n - 1$ ecuaciones y n incógnitas. Finalmente, como se conoce $y'_0 = \alpha_1$ también de las condiciones.

Como observación al lector, un punto muy importante a considerar, y que causó problemas a la hora de obtener los resultados correctos tras la implementación, es tomar en cuenta el comportamiento del cambio de las variables A, B, C, D, E y α_j vistas en 106.

Puesto que a pesar de que estas variables son conocidas, al tratarse de un sistema resultante pentadiagonal estas variables tienen una posición desfasada en cada iteración, es decir, para cada iteración de los valores de j es necesario realizar un desplazamiento de coeficientes al momento de codificar, esto porque en realidad se cuenta con un sistema Δ de ecuaciones de $n - 1$ por $n - 1$ y podríamos entonces decir que cada uno de los coeficientes de 106 están en función de j .

⁵MATLAB, Versión [2018a]. The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, Estados Unidos. [2018]. es un entorno de programación y software de cálculo numérico ampliamente utilizado en campos como la ingeniería, la ciencia de datos y la investigación. Es desarrollado y distribuido por The MathWorks, Inc.

Este razonamiento se explicará más adelante de forma más clara mediante un diagrama que muestre el desarrollo y el desfase de los coeficientes iteración tras iteración al construir el sistema pentadiagonal.

Por último, recordando que los valores y_i que no aparecen en cada iteración, tienen coeficiente nulo y que los valores y_0, y_n al ser conocidos, suman su valor real a α_j .

Como en este problema en particular, el valor de la función en la frontera es 0, es irrelevante pero estudiaremos el caso para condiciones distintas de cero más adelante y es necesario no olvidar realizar dicha suma al momento de implementar el método.

Tras implementar el desarrollo teórico mostrado en la sección anterior, se obtuvo el algoritmo 1 que se muestra a continuación:

Algoritmo 1 Aproximación por Splines

Entrada: $a, b, n, g(x), q(x), k_1, k_2, k_3$

Salida: vector $y_i, i = 1, \dots, n - 1$

$$h \leftarrow \frac{b-a}{n}$$

$$x_i \leftarrow a + ih, \text{ for } i = 0, \dots, n$$

Sea α un vector de tamaño $|n - 1|$

Sea Δ una matriz de orden $n - 1$

$$i \leftarrow 1$$

for $j = 2$ to $n-2$ **do**

$$\Delta_{i,j+2} \leftarrow 60 - h^3 g_{j+2}$$

$$\Delta_{i,j+1} \leftarrow -(120 + 26h^3 g_{j+1})$$

$$\Delta_{i,j} \leftarrow -(66h^3 g_j)$$

$$\Delta_{i,j-1} \leftarrow 120 - 26h^3 g_{j-1}$$

$$\Delta_{i,j-2} \leftarrow -(60 + h^3 g_{j-2})$$

$$\alpha_j \leftarrow h^3 (q_{j+2} + 26q_{j+1} + 66q_j + 26q_{j-1} + q_{j-2})$$

$$i \leftarrow i + 1$$

end for

$$\Delta_{1,3} \leftarrow 40$$

$$\Delta_{1,1} \leftarrow -360$$

$$\Delta_{n-1,n-1} \leftarrow -360$$

$$\Delta_{n-1,n-2} \leftarrow 360$$

$$\Delta_{n-1,n-3} \leftarrow -120$$

$$\alpha_1 \leftarrow -240hk_2 - 320k_1 + 2h^3(8q_0 + 45q_1 + 6q_2 + q_3);$$

$$\alpha_{n-1} \leftarrow 60h^3(q_n + q_{n-1}) - 120k_3;$$

Resolver el sistema $\Delta Y = \alpha$ para Y

▷ Δ Alojará el sistema pentadiagonal

▷ Ingresamos A,B,C,D,E a Δ

▷ Asignar los coeficientes de 106

Observemos que al final, el algoritmo 1 devuelve un sistema Δ de ecuaciones que hay que solucionar para concluir con la aproximación.

Khan & Aziz (2002) resuelven el sistema resultante utilizando un algoritmo para sistemas pentadiagonales estudiado en Jain (1983).

Para propósitos de esta tesis, al no tener relevancia el coste computacional y debido a la linealidad del problema, el sistema fue resuelto mediante el uso de álgebra lineal con proceso de inversión dando uso de las herramientas de MATLAB para sistemas lineales.

3.6.1. Resultados y problemas en la literatura

Del trabajo de Tirmizi (1991) se realizan las comparaciones en dos ejemplos numéricos específicos, uno lineal y otro no lineal en los cuales los autores destacan su metodología ante las propuestas por Caglar et al. (1999), trabajo en el cuál se da uso de una metodología basada en una categoría de Splines denominada basis Splines o simplemente B-Splines, las cuáles a diferencia de las splines usuales, toman puntos específicos y poseen una función soporte. Toda spline se puede expresar como combinación de B-Splines del mismo grado (De Boor, 2001), es decir, forman una base y cumplen con las características de continuidad mencionadas previamente.

El problema lineal ejemplificado en Khan & Aziz (2002) y por consecuente en Tirmizi (1991) está dado por la ecuación diferencial

$$y'''(x) = xy + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (107)$$

Con las condiciones de frontera

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad y(1) = 0, \quad (108)$$

y cuya solución analítica es $y(x) = x(1 - x)e^x$.

Corroborando esta aseveración, se tiene que $y(x)$ y la primera derivada

$$y'(x) = -(x^2 + x - 1)e^x \quad (109)$$

satisfacen las condiciones de frontera 114. La segunda y tercera derivada están dadas por

$$y''(x) = -x(x + 3)e^x \quad y'''(x) = -(x^2 + 5x + 3)e^x \quad (110)$$

Luego, al sustituir en 113

$$-(x^2 + 5x + 3)e^x = x(x(1 - x)e^x) + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x \quad (111)$$

Se satisface la igualdad de la ecuación diferencial

$$-x^2 - 5x - 3 = x^2 - x^3 + x^3 - 2x^2 - 5x - 3 = -x^2 - 5x - 3 \quad (112)$$

Recordemos que, a diferencia de resolver la ecuación de forma analítica, la aproximación por medio de splines no consiste en obtener como tal una función $\hat{y}(x)$ tal que $\hat{y}(x) \approx y(x)$ para toda x . Se busca que la función aproximada, que consiste en una función a trozos formada por las n splines $S_k(x_k)$ cumpla con las condiciones de continuidad 24 en los nodos x_i de la malla.

La efectividad de una aproximación está entonces en función de qué tanto se cumplen estas condiciones. Esto se puede representar en una tabla comparativa entre la solución analítica y los valores $y(x_i) = y_i$ para $i = 0, 1, \dots, n$ obtenidos con las relaciones presentadas en este capítulo y la solución al sistema penta diagonal.

En primera instancia, Khan & Aziz (2002) comparan sus resultados con los de Caglar et al. (1999) para el problema 113 de una forma muy directa; utilizando diferencias absolutas. Dada una malla de 11 nodos, con tamaño de paso $h = 1/10$ tabulan el valor real o analítico Y_i , el valor estimado por su metodología y_i , la diferencia absoluta entre estos valores y el error absoluto que se presentó en Caglar et al. (1999).

Tabla 1. Solución analítica y aproximada utilizando splines quínticas en Khan & Aziz (2002)

x_i	y_i	Y_i	Error en Khan & Aziz (2002)	Error en Caglar et al. (1999)
0.0	0	0	0	0
0.1	0.0994654	0.0994653	0.0000001	0.000
0.2	0.1954246	0.19542244	0.0000002	0.002
0.3	0.2834706	0.2834703	0.0000003	0.005
0.4	0.3580384	0.3580379	0.0000005	0.007
0.5	0.4121809	0.4121803	0.0000006	0.008
0.6	0.4373092	0.4373085	0.0000007	0.008
0.7	0.4228887	0.4228880	0.0000007	0.007
0.8	0.3560872	0.3560865	0.0000007	0.006
0.9	0.2213646	0.2213642	0.0000004	0.004
1	0	0	0	0.014

Tabla 2. Máximos errores absolutos para mallas de tamaño de paso $\frac{1}{2^k}$

h	Khan & Aziz (2002)	Caglar et al. (1999)
1/8	$1.84x10^{-6}$	$0.836x10^{-1}$
1/16	$1.04x10^{-7}$	$0.422x10^{-1}$
1/32	$6.32x10^{-9}$	$0.214x10^{-1}$

En la tabla 1, se puede observar que la metodología de Khan & Aziz (2002) tiene un orden de error de tamaño $O(h^7)$ mientras que el de Caglar et al. (1999) es de apenas $O(h^3)$. Se puede incluso apreciar que el error en el extremo final no es nulo; recordemos que en el problema a resolver, las condiciones de frontera son conocidas, y por tanto no hay error.

Como información complementaria, en la tabla 2 se muestran los máximos errores absolutos obtenidos tras variar el tamaño de paso con $h = 1/8$, $h = 1/16$ y $h = 1/32$.

3.6.2. Resultados de la implementación

En esta sección, se muestran las tablas obtenidas tras la reproducción de resultados utilizando el ejemplo numérico del problema 113. Los resultados de la implementación que se muestran en la tabla 3 fueron los que se esperaban obtener; estos resultados eran prueba de que la implementación y sobre todo la construcción de la matriz del sistema de ecuaciones era el correcto. Por otra parte, los errores más pequeños que se muestran en la tabla 3 se deben principalmente a redondeo y truncamiento natural del uso de MATLAB, y por trabajar con números irracionales y la función exponencial e^x .

Tabla 3. Resultados del estudio de la metodología, donde Y_i es el valor analítico, y_i es el valor obtenido por Khan & Aziz (2002), u_i los valores obtenidos tras la implementación y ϵ_i la diferencia absoluta entre aproximaciones.

x_i	Y_i	y_i	u_i	$\epsilon_i = y_i - u_i $
0.0	0	0	0	0
0.1	0.0994653	0.0994654	0.0994591331603379	0.000006
0.2	0.19542244	0.1954246	0.1953059990543944	0.0001
0.3	0.2834703	0.2834706	0.2833756211454965	0.00009
0.4	0.3580379	0.3580384	0.3578608912313498	0.0001
0.5	0.4121803	0.4121809	0.4120567630700752	0.0001
0.6	0.4373085	0.4373092	0.4371322480685134	0.0001
0.7	0.4228880	0.4228887	0.4227946809225241	0.00009
0.8	0.3560865	0.3560872	0.3559696063845907	0.0001
0.9	0.2213642	0.2213646	0.2213591346834573	0.000005
1	0	0	0	0

En la tabla 3 se muestra el error absoluto $\epsilon_i = |y_i - u_i|$ con respecto a la tabla 1, donde y representa los valores obtenidos por los autores, y u los valores que se obtuvieron tras la implementación. El error máximo obtenido es de 10^{-4} .

En cuanto al análisis de los errores absolutos máximos obtenidos para distintas mallas, vistos en la tabla 2, se realizó la tarea de desplegar los valores completos para $h = 1/8, 1/16$ y $1/32$ comparando los nodos de intersección en las 3 mallas como se muestra en la tabla 4.

Tabla 4. Valores aproximados de y_i del problema 113 para 3 mallas con tamaño de paso h de $1/8, 1/16$ y $1/32$.

x_i	$h = 1/8$	$h = 1/16$	$h = 1/32$
0	0	0	0
1/8	0.12393386	0.123913	0.123934
2/8	0.24052757	0.240712	0.240748
3/8	0.34085889	0.34096	0.341005
4/8	0.41187901	0.412123	0.412172
5/8	0.43771713	0.437817	0.437862
6/8	0.39671298	0.396895	0.396931
7/8	0.26237504	0.262352	0.262373
1	0	0	0

En la tabla 4 se muestra para cada una de las 3 mallas, el valor u_i aproximado. Se calculan los valores para los 8, 16 y 32 nodos pero se despliegan los valores con los nodos en común con el propósito de obtener la diferencia.

Tabla 5. Tabla de errores absolutos del problema 113 para las 3 mallas.

x_i	$h = 1/8$	$h = 1/16$	$h = 1/32$
0	0	0	0
1/8	0.000004	0.000025	0.000004
2/8	0.000227	0.000043	0.000007
3/8	0.000155	0.000054	0.000008
4/8	0.000301	0.000057	0.000009
5/8	0.000153	0.000054	0.000008
6/8	0.000225	0.000043	0.000006
7/8	0.000002	0.000025	0.000004
1	0	0	0

En la tabla 5 se muestra la diferencia exacta en cada uno de los nodos x_i con respecto a la solución analítica de la ecuación diferencial no lineal de 113. El procedimiento para resolver una ecuación no lineal es análogo al no lineal, se tiene la estructura $y'''(x) = f(x, y)$, con las mismas condiciones de frontera y condiciones adicionales en los extremos en su forma discreta, y se concluye resolviendo el sistema no lineal utilizando algún método a fin, para este estudio se utilizó el método de Newton-Raphson.

3.6.3. Aproximación a la solución de problemas no lineales

Consideremos el problema no lineal

$$y'''(x) = -2e^{-y^3} + 4(1+x)^{-3} \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (113)$$

Con las condiciones de frontera

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad y(1) = \ln 2, \quad (114)$$

y cuya solución analítica es $y(x) = \ln(1+x)e^x$.

Para aproximar una ecuación no lineal mediante este método, de nueva cuenta, de la ecuación 85, el enforzamiento en $x = x_1$ y $x = x_{n-1}$ de 86 y 87, junto a las relaciones 101 y 105, se obtiene el sistema a resolver. Obviamente esta vez no resulta lineal y se requiere el uso de otra técnica para resolver el sistema. En métodos numéricos es usual utilizar el método de Newton-Raphson, el busca iterativamente la raíz de una función no lineal a partir de una suposición inicial. Este método no forma parte de la paquetería en MATLAB por lo cual se tuvo que implementar. En el algoritmo 2 se muestra en el pseudocódigo.

Algoritmo 2 Método de Newton-Raphson para sistemas no lineales

Entrada: Función F , Jacobiano J , vector inicial x_0 y Cierta tolerancia tol .

Salida: Solución x_{sol} , número de iteraciones realizadas $iter$

```

1:  $iter \leftarrow 0$ 
2:  $x \leftarrow x_0$ 
3:  $Error \leftarrow tol + 1$ 
4: while  $Error > tol$  and  $iter < max\_iter$  do
5:   Calcular  $f_{val} = F(x)$ 
6:   Calcular  $J_{val} = J(x)$ 
7:   Resolver  $J(x) \cdot \Delta x = -F(x)$  para  $\Delta x$  usando eliminación Gaussiana u otro método
8:   Actualizar  $x \leftarrow x + \Delta x$ 
9:   Calcular  $Error = \|\Delta x\|$ 
10:  Incrementar  $iter$ 
11: end while
12: if  $Error \leq tol$  then
13:   Convergencia alcanzada
14: else
15:   El método no converge dentro del número máximo de iteraciones
16: end if
17:  $x_{sol} \leftarrow x$ 

```

Tabla 6. Resultados de la implementación al incorporar el método de Newton-Raphson para la solución de sistemas no lineales, donde Y_i es el valor analítico, y_i los valores obtenidos tras la implementación y ϵ_i el error absoluto.

x_i	Y_i	y_i	$\epsilon_i = Y_i - y_i $
0.0	0	0	0
0.1	0.0953102	0.095789	4.788×10^{-4}
0.2	0.1823215	0.185710	5.05×10^{-5}
0.3	0.2623643	0.2623611	2.768×10^{-4}
0.4	0.3364722	0.3364547	1.75×10^{-5}
0.5	0.4054650	0.4061271	6.621×10^{-4}
0.6	0.4700036	0.4569740	1.1938×10^{-3}
0.7	0.5306282	0.5302824	3.458×10^{-4}
0.8	0.5877867	0.5877816	6.98×10^{-5}
0.9	0.6418538	0.6418512	2.6×10^{-6}
1	0.6931471	0.6931471	0

En la tabla 6 se muestran los resultados de la implementación. Para algunos nodos se preserva el quinto orden de exactitud y los nodos cerca del centro de la malla tienen mayor error que los que están en los extremos. Esto resalta que las implementaciones para las condiciones en los extremos son favorables. Por otra parte el error de truncamiento y acarreo se multiplica lo cual puede estar provocando la pérdida de 1 o más cifras significativas.

3.6.4. Ejemplos numéricos propuestos

El método resulta eficaz al resolver problemas lineales es de la forma $y'''(x) = g(x)y(x) + q(x)$. En esta sección se resuelven algunas ecuaciones propuestas de este tipo sujetas a condiciones de frontera, y cuya solución analítica es conocida y corroborada para verificar la estabilidad y funcionalidad del método. Posteriormente, para cada problema se tabulan los resultados desplegando el valor analítico, el valor aproximado y el error absoluto.

Problema 1

$$y'''(x) = xy - e^x(x^3 - 7x - 9), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (115)$$

sujeto a las condiciones,

$$y(0) = 0, \quad (116)$$

$$y'(0) = 1 \quad (117)$$

$$y(1) = 2e. \quad (118)$$

y cuya solución exacta es

$$y(x) = e^x(x^2 + x) \quad (119)$$

Claramente, la función 119 satisface las condiciones de frontera 116 y 118. Al derivar $y(x)$ en tres ocasiones, se tiene que

$$y'(x) = e^x(x^2 + 3x + 1) \quad (120)$$

$$y''(x) = e^x(x^2 + 5x + 4) \quad (121)$$

$$y'''(x) = e^x(x^2 + 7x + 9) \quad (122)$$

y se verifica que $y'(0)$ satisface la condición 117. Luego, al sustituir la función y la tercera derivada en la ecuación 115 se tiene que

$$y'''(x) = e^x(x^2 + 7x + 9) = x(e^x(x^2 + x)) - e^x(x^3 - 7x - 9) \quad (123)$$

Factorizando e^x en el lado derecho de la igualdad y sumando términos semejantes,

$$y'''(x) = e^x(x^2 + 7x + 9) = e^x(x^2 + 7x + 9) \quad (124)$$

se concluye que la igualdad se preserva y por tanto la solución es correcta.

Los resultados obtenidos al resolver la ecuación 115 con la metodología se aprecian en la tabla 7. Nótese que el error en los extremos debe ser 0 por propiedad de las condiciones de frontera del problema.

Tabla 7. Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 115.

x_i	Y_i	y_i	ϵ_i
0	0	0	0
1/10	0.1215688	0.12141866	0.00015014
2/10	0.29313666	0.29146073	0.00167594
3/10	0.52644493	0.525041	0.00140393
4/10	0.83542183	0.83291373	0.0025081
5/10	1.23654095	1.23472548	0.00181548
6/10	1.74923405	1.74673338	0.00250067
7/10	2.39636572	2.39497464	0.00139108
8/10	3.20477894	3.2031172	0.00166173
9/10	4.20592132	4.20578149	0.00013983
1	5.43656366	5.43656366	0

Problema 2

$$y'''(x) = xy + e^x(2x^3 - 3x^2 - 12x - 8), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (125)$$

sujeto a las condiciones,

$$y(0) = 0, \quad (126)$$

$$y'(0) = 2 \quad (127)$$

$$y(1) = 0. \quad (128)$$

y cuya solución exacta es

$$y(x) = -e^x(2x^2 - x - 1) \quad (129)$$

Observemos que las condiciones de frontera 126 y 128 se cumplen con la función 129.

Al derivar $y(x)$ en tres ocasiones, se tiene que

$$y'(x) = -e^x(2x^2 + 3x - 2) \quad (130)$$

$$y''(x) = -e^x(2x^2 + 7x + 1) \quad (131)$$

$$y'''(x) = -e^x(2x^2 + 11x + 8) \quad (132)$$

y se verifica que $y'(0)$ satisface la condición 127.

Luego, al sustituir la función 129 en la ecuación 125 se tiene que

$$y'''(x) = x(-e^x(2x^2 - x - 1)) + e^x(2x^3 - 3x^2 - 12x - 8) \quad (133)$$

Factorizando $-e^x$ en el lado derecho de la igualdad,

$$y'''(x) = -e^x(2x^3 - x^2 - x - 2x^3 + 3x^2 + 12x + 8) \quad (134)$$

y sumando términos semejantes, se obtiene la ecuación

$$y'''(x) = -e^x(2x^2 + 11x + 8) \quad (135)$$

que coincide con la expresión 132 y por lo tanto la solución es correcta.

Los resultados obtenidos al resolver la ecuación 125 con la metodología se aprecian en la tabla 8.

Tabla 8. Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 125.

x_i	Y_i	y_i	ϵ_i
0	1	1	0
1/10	1.1935845915216996	1.1936021797971388	0.0000175882754392
2/10	1.3679710891393904	1.3676594626310890	0.0003116265083014
3/10	1.5118418644851237	1.5116265734472139	0.0002152910379098
4/10	1.6111706734525721	1.6107047327688722	0.0004659406837000
5/10	1.6487212707001282	1.6484299543394609	0.0002913163606673
6/10	1.6034645443436479	1.6030004567830094	0.0004640875606385
7/10	1.4499019493787433	1.4496898753921217	0.0002120739866216
8/10	1.1572812828160828	1.1569732444435892	0.0003080383724936
9/10	0.6886888711239457	0.6887090989340806	0.0000202278101349
1	0	0	0

Problema 3

$$y'''(x) = xy + e^x(x^2 - 2x - 2), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (136)$$

$$y(0) = 1, \quad (137)$$

$$y'(0) = 0 \quad (138)$$

$$y(1) = 0. \quad (139)$$

y cuya solución exacta es

$$y(x) = -e^x(x - 1) \quad (140)$$

La función 140 satisface 137 y 139. Al derivar $y(x)$ en tres ocasiones, se tiene que

$$y'(x) = -xe^x \quad (141)$$

$$y''(x) = -e^x(x + 1) \quad (142)$$

$$y'''(x) = -e^x(x + 2) \quad (143)$$

De 141, $y'(0)$ satisface la condición 138. Sustituyendo la función 140 en la ecuación 136 se tiene que

$$y'''(x) = -xe^x(x - 1) + e^x(x^2 - 2x - 2) \quad (144)$$

Factorizando $-e^x$ en el lado derecho de la igualdad y sumando términos semejantes,

$$y'''(x) = -e^x(x + 2) \quad (145)$$

que coincide con la expresión 143 para la tercera derivada y por lo tanto la solución es correcta.

En la tabla 9, se despliegan los valores aproximados con la metodología para el problema 136.

Tabla 9. Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 136.

x_i	Y_i	y_i	ϵ_i
0	1	1	0
1/10	0.9946538262680830	0.9946839134764629	0.0000300872083799
2/10	0.9771222065281360	0.9770474645222992	0.0000747420058368
3/10	0.9449011653032021	0.9448753311562194	0.0000258341469828
4/10	0.8950948185847621	0.8949829503061705	0.0001118682785917
5/10	0.8243606353500641	0.8243164281993088	0.0000442071507553
6/10	0.7288475201562036	0.7287359606459808	0.0001115595102228
7/10	0.6041258122411430	0.6041005135470717	0.0000252986940713
8/10	0.4451081856984935	0.4450340316744066	0.0000741540240868
9/10	0.2459603111156949	0.2459908295671656	0.0000305184514706
1	0	0	0

Problema 4

$$y'''(x) = xy + (x^3 - x^2 + 24x - 12) \cos(2x) - 4(2x^2 - 2x - 3) \sin(2x), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (146)$$

sujeto a las condiciones,

$$y(0) = 0, \quad (147)$$

$$y'(0) = 1 \quad (148)$$

$$y(1) = 0. \quad (149)$$

y cuya solución exacta es

$$y(x) = -(x^2 - x) \cos(2x) \quad (150)$$

Puesto que el factor $(x^2 - x)$ en la función 150 se anula en $x = 0$ y en $x = 1$ se cumplen las condiciones 147 y 149.

Al derivar $y(x)$ en tres ocasiones, se tiene que

$$y'(x) = (1 - 2x) \cos(2x) + 2(x^2 - x) \sin(2x) \quad (151)$$

$$y''(x) = (8x - 4) \sin(2x) + (4x^2 - 4x - 2) \cos(2x) \quad (152)$$

$$y'''(x) = (-8x^2 + 8x + 12) \sin(2x) + (24x - 12) \cos(2x) \quad (153)$$

Verificamos que la condición 148 se cumple puesto que

$$y'(0) = (1 - 0) \cos(0) + 2(0) \sin(0) = 1. \quad (154)$$

Sustituyendo la función 150 en la ecuación 146 se tiene que

$$y'''(x) = x(-(x^2 - x) \cos(2x)) + (x^3 - x^2 + 24x - 12) \cos(2x) - 4(2x^2 - 2x - 3) \sin(2x) \quad (155)$$

Factorizando $\cos(x)$,

$$y'''(x) = \cos(x)(x^2 - x^3 + x^3 - x^2 + 24x - 12) - \sin(2x)(8x^2 - 4x - 12) \quad (156)$$

Al sumar los términos semejantes se obtiene la ecuación:

$$y'''(x) = \cos(x)(24x - 12) - \sin(2x)(8x^2 - 4x - 12) \quad (157)$$

que coincide con la expresión 153 para la tercera derivada y por lo tanto la solución es correcta. Los resultados obtenidos al resolver el problema 146 con la metodología se aprecian en la tabla 10.

Tabla 10. Solución aproximada mediante splines para problema propuesto 146.

x_i	Y_i	y_i	ϵ_i
0	0	0	0
1/10	0.0882059920057117	0.0882108735754665	0.0000048815697547
2/10	0.1473697590404616	0.1473821721363383	0.0000124130958766
3/10	0.1733204791310324	0.1733331378371867	0.0000126587061542
4/10	0.1672096102433197	0.1672254025242231	0.0000157922809034
5/10	0.1350755764670349	0.1350877402347961	0.0000121637677612
6/10	0.0869658610744017	0.0869780568721699	0.0000121957977682
7/10	0.0356931000090506	0.0356995327741783	0.0000064327651277
8/10	-0.0046719235682062	-0.0046664976366375	0.0000054259315687
9/10	-0.0204481885223778	-0.0204484158200409	0.0000002272976630
1	0	0	0

De los 4 ejemplos numéricos propuestos, notamos que el error absoluto obtenido es de orden 10^{-5} en el mejor de los casos y 10^{-3} en el peor a pesar de ser una malla relativamente pequeña. El método es efectivo para ecuaciones cuyas soluciones sean suaves debido a la naturaleza de los polinomios interpoladores.

Capítulo 4. Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas es un método numérico utilizado para resolver ecuaciones diferenciales en cualquier orden. Es un método muy sencillo de comprender e implementar y se basa directamente en la aproximación de las derivadas de una función en puntos discretos en un dominio dado.

De manera análoga al capítulo de splines, comenzaremos este capítulo mostrando la definición del método de diferencias finitas y explicaremos los distintos esquemas que existen de este método. Luego, se presentan los resultados de la implementación computacional y se tabulan los valores obtenidos al resolver ecuaciones diferenciales de tercer orden así como la comparativa con el método de splines estudiado en el capítulo previo retomando el problema de la ecuación 113 presentada en Khan & Aziz (2002) con el propósito de observar el comportamiento y convergencia para la metodología de diferencias finitas. Para concluir, se provee el algoritmo implementado en MATLAB para el cálculo de las aproximaciones y se discuten algunas observaciones de los resultados así como ventajas y desventajas del método de diferencias finitas frente al método de splines.

4.1. Definición y construcción del método

El método de diferencias finitas es una técnica numérica ampliamente utilizada en la aproximación a la solución de ecuaciones diferenciales. El método consiste en aproximar las derivadas de polinomios interpolantes en nodos generalmente equiespaciados $x_i = x_0 + ih$ ($i = 0, \dots, N$), donde h es la distancia entre puntos adyacentes. El método se basa en aproximar las derivadas de la función $y(x)$ en cada uno de estos puntos.

Consideremos una función $f(x)$ y el polinomio interpolante de Newton-Gregory

$$\mathcal{P}_n(x) = f_j + s\Delta f_j + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f_j + \dots + \frac{s(s-1)\cdots(s-n+1)}{n!}\Delta^n f_j, \quad (158)$$

en donde $f(x_i) = f_i$,

$$s = \frac{x - x_j}{h} \quad (159)$$

y Δ es el operador de diferencias hacia adelante visto en el capítulo 3.

De esta manera, si se quiere encontrar la m -ésima derivada evaluada en el punto x_k , se tiene la expresión

$$\left. \frac{df}{dx^m} \right|_{x=x_k} = \frac{1}{h^m} \left. \frac{\mathcal{P}_n(s)}{ds^m} \right|_{s=k} \quad (160)$$

De particular interés es cuando se utiliza un polinomio de grado par y se evalúa en el punto intermedio ya que, en este caso, en la fórmula para la derivada no aparece dicho punto central. A esto se le conoce como diferencias centrales.

Existen varias fórmulas disponibles para aproximar las derivadas por diferencias finitas, como la aproximación hacia adelante, la aproximación hacia atrás y la aproximación central ya mencionada (Burden & Faires, 2011).

Una de las formas más básicas de aproximar la primera derivada de $y(x)$ en x_i , es utilizar la fórmula de diferencias finitas hacia adelante

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad (161)$$

Para el caso de la segunda derivada de $y(x)$, se puede utilizar la fórmula de diferencias finitas centrada

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \quad (162)$$

Para aproximar y''' en el interior de la malla se utilizó la fórmula de diferencias finitas centrales la cual se define como:

$$y'''(x_i) \approx \frac{-y_{i-2} + 2y_{i-1} + 0y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{2h^2} \quad (163)$$

Para el caso de los extremos derivada de $y(x)$ en x_i existen distintas formas de aproximación.

Consideremos la siguiente ecuación diferencial de tercer orden

$$y'''(x) = f(x, y, y', y'') \quad (164)$$

En la ecuación diferencial 164 se reemplazan y' , y'' y y''' por las fórmulas de diferencias centrales que se mostraron anteriormente y se resuelve el sistema resultante. En los extremos se necesitan hacer consideraciones especiales. Más adelante mostraremos la implementación en la aproximación de la tercera derivada en los extremos utilizando 4 nodos internos.

4.1.1. Solución al problema de Khan & Aziz (2002)

Las discretizaciones de las derivadas vistas de 161 a 163 junto al sistema resultante de ecuaciones pueden ser utilizados para resolver ecuaciones diferenciales. Consideremos la ecuación diferencial lineal planteada en Khan & Aziz (2002) estudiada en el capítulo anterior definida como

$$y'''(x) = xy + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (165)$$

Con las condiciones de frontera

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad y(1) = 0 \quad (166)$$

y cuya solución analítica está dada por $y(x) = x(1-x)e^x$, corroborado en las ecuaciones 109 a 112.

Para resolver la ecuación diferencial 165 mediante el método de diferencias finitas lo primero es discretizar el intervalo $[0, 1]$ en $N + 1$ puntos de tamaño de paso $h = 1/N$. Entonces el i -ésimo punto es $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \dots, N$.

Para aproximar la tercera derivada, podemos utilizar la fórmula de diferencias finitas centradas de cinco puntos, que nos permite obtener la derivada de orden tres de una función $y(x)$ en el punto x_i de la siguiente manera:

$$y'''(x_i) \approx \frac{-y_{i-2} + 2y_{i-1} + 0y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{2h^2} \quad (167)$$

Sustituyendo 167 para reescribir la ecuación diferencial 165 como un sistema de ecuaciones se tiene que

$$\frac{-y_{i-2} + 2y_{i-1} - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{2h^2} \approx x_i y_i + (x_i^3 - 2x_i^2 - 5x_i - 3)e^{x_i} \quad (168)$$

Para $i = 2, \dots, N - 2$.

Luego, multiplicando la ecuación 168 por $2h^2$ y agrupando los términos conocidos o evaluables de un lado de la ecuación y los términos que involucran a y del otro, se reordena 168 de la siguiente manera,

$$-y_{i-2} + 2y_{i-1} - x_i h^2 y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2} = 2h^2(x_i^3 - 2x_i^2 - 5x_i - 3)e^{x_i} \quad (169)$$

Notemos que, la expresión 168 solo es válida hasta $N - 2$ y por tanto, para completar el sistema de ecuaciones se requieren 5 ecuaciones adicionales, de las cuales, 3 se obtienen de las condiciones de

frontera 166. Para estabilizar el sistema, una de las técnicas utilizadas para el análisis del método de diferencias finitas es la técnica de los nodos fantasma, la cual consiste en agregar nodos externos a la malla de forma antisimétrica a los ya existentes. Otro intento fue el de intercambiar la aproximación por diferencias centrales por una aproximación que involucrara nodos internos en los extremos de la malla. De esto último se tiene la aproximación que da uso de 4 nodos hacia atrás y uno hacia adelante para obtener una aproximación del valor de $y'''(x)$ en el nodo x_{n-1}

$$y'''_{n-1} \approx \frac{3y_n - 10y_{n-2} + 12y_{n-3} - 6y_{n-4} + y_{n-5}}{2h^3} + O(h^2) \quad (170)$$

Tabla 11. Errores obtenidos al aproximar la solución al problema 164 utilizando diferencias finitas junto a la técnica de punto fantasma y diferencias finitas desfasadas de para una malla de $n = 100$ nodos.

x_i	Valor Analítico	Error Técnica 1	Error Técnica 2
0.0	0	0	0
0.1	0.0994653	1.30×10^{-4}	1.99×10^{-4}
0.2	0.19542244	6.49×10^{-4}	7.78×10^{-4}
0.3	0.2834703	1.52×10^{-3}	1.7×10^{-3}
0.4	0.3580379	2.96×10^{-3}	2.87×10^{-3}
0.5	0.4121803	3.73×10^{-3}	4.13×10^{-3}
0.6	0.4373085	2.66×10^{-4}	5.21×10^{-3}
0.7	0.4228880	1.58×10^{-2}	5.75×10^{-3}
0.8	0.3560865	5.45×10^{-2}	5.34×10^{-3}
0.9	0.2213642	1.30×10^{-1}	3.55×10^{-3}
1	0	0	0

Como se puede apreciar en la tabla 11, los resultados obtenidos por la aproximación 170 fueron los predominantes. Se replicaron las pruebas para mallas de tamaño superior y los resultados eran semejantes. Por tanto se optó por descartar la primera técnica y conservar únicamente las aproximaciones de diferencias finitas desfasadas para los futuros experimentos.

4.2. Implementación y comparativa con el método de splines

En el capítulo anterior, en la sección 3.6.1 se mostraron las tablas 1 y 2 con los valores aproximados y errores máximos obtenidos tras la implementación del método de splines para la solución de ecuaciones de tercer orden. Posteriormente, en la tabla 3 de la misma sección se desplegaron los resultados en comparativa con los mostrados en Khan & Aziz (2002).

De la tabla 3, tomaremos los valores de la metodología de splines y realizamos la comparativa con las aproximaciones para 10 nodos con el método de diferencias finitas. Esto se puede apreciar en la tabla 12, en donde se despliega el valor analítico, el aproximado con ambos métodos y sus respectivos errores.

Tabla 12. Comparación de soluciones y errores obtenidos con el método de diferencias finitas y el método de splines para la resolución del problema 165 para $N = 10$ nodos.

x_i	Valor Analítico	Diferencias Finitas	Error Absoluto	Método de Splines	Error Absoluto
0.0	0	0	0	0	0
0.1	0.0994653	0.0979082	0.00155723	0.0994591331603379	0.000006
0.2	0.19542244	0.192858	0.002434	0.1953059990543944	0.0001
0.3	0.2834703	0.279639	0.00383126	0.2833756211454965	0.00009
0.4	0.3580379	0.352375	0.00633762	0.3578608912313498	0.0001
0.5	0.4121803	0.405341	0.0116097	0.4120567630700752	0.0001
0.6	0.4373085	0.433676	0.0242709	0.4371322480685134	0.0001
0.7	0.4228880	0.43512	0.0501719	0.4227946809225241	0.00009
0.8	0.3560865	0.406784	0.098172	0.3559696063845907	0.0001
0.9	0.2213642	0.347254	0.189314	0.2213591346834573	0.000005
1	0	0	0	0	0

En la tabla 12 se aprecia que el error absoluto obtenido en el método de splines es razonablemente pequeño cuando la malla es pequeña. Por el contrario, para el método de diferencias finitas se despliega un error absoluto que presenta un comportamiento creciente, esto podría indicar que el método de splines es más eficiente o que las condiciones de frontera implementadas no son las adecuadas. En la tabla 13 se muestra la comparativa entre el valor aproximado obtenido utilizando diferencias finitas y el valor analítico para $N = 10, 100$ y 1000 nodos. El pseudocódigo de la implementación del método de diferencias finitas se aprecia en el algoritmo 3.

Tabla 13. Error obtenido con el método de diferencias finitas para mallas de $N = 10, 100$ y 1000 nodos.

x_i	Valor Analítico	N = 10	Error	N = 100	Error	N = 1000	Error
0.0	0	0	0	0	0	0	0
0.1	0.0994653	0.0979082	1.56×10^{-3}	0.0993350	1.30×10^{-4}	0.09796087	1.50×10^{-3}
0.2	0.19542244	0.192858	2.56×10^{-3}	0.1947735	6.49×10^{-4}	0.19297409	2.45×10^{-3}
0.3	0.2834703	0.279639	3.83×10^{-3}	0.2819528	1.52×10^{-3}	0.28007990	3.39×10^{-3}
0.4	0.3580379	0.352375	5.66×10^{-3}	0.3550822	2.96×10^{-3}	0.3524933	5.54×10^{-3}
0.5	0.4121803	0.405341	6.84×10^{-3}	0.4084552	3.73×10^{-3}	0.40446595	7.71×10^{-3}
0.6	0.4373085	0.433676	3.63×10^{-3}	0.4370420	2.66×10^{-4}	0.4294207	7.89×10^{-3}
0.7	0.4228880	0.43512	1.22×10^{-2}	0.4386650	1.58×10^{-2}	0.4230712	1.83×10^{-4}
0.8	0.3560865	0.406784	5.07×10^{-2}	0.4105472	5.45×10^{-2}	0.3821553	2.61×10^{-2}
0.9	0.2213642	0.347254	1.26×10^{-1}	0.3512311	1.30×10^{-1}	0.30318233	8.18×10^{-2}
1	0	0	0	0	0	0	0

Algoritmo 3 Método de diferencias finitas

 Entrada: Cantidad de nodos N , Ecuación $f(x)$, Condiciones, Solución Analítica $Y(X)$

$$a \leftarrow 0, b \leftarrow 0, h \leftarrow \frac{b-a}{N}$$

$$x_i \leftarrow a + ih, \text{ for } i = 0, \dots, N$$

Sea \mathbf{S} una matriz de orden $N + 2$

▷ Matriz del sistema de ecuaciones

Sea \mathbf{B} un vector de dimensión $N + 2$

$$Sol \leftarrow x(1-x)e^x$$

$$y_0 \leftarrow 0, y_N \leftarrow 0, dy_0 \leftarrow 1$$

▷ Condiciones de frontera 166

$$S(1,2) \leftarrow 1, S(N+2, N+2) \leftarrow 1$$

$$B(1) \leftarrow y_0, B(N+2) \leftarrow y_0$$

▷ Agregar las condiciones al sistema

$$S(2,1) \leftarrow -1, S(2,3) \leftarrow 1$$

$$B(2) \leftarrow 2 * h * dy_0,$$

for $i = 1$ to $N-2$ **do**

$$S(i+2, i) \leftarrow -1, S(i+2, i+1) \leftarrow 2$$

$$S(i+2, i+2) \leftarrow x_{i+1} * h^3 \quad \triangleright \text{Coeficientes para el método de diferencias finitas centrales de 161}$$

$$S(i+2, i+3) \leftarrow -2, S(i+2, i+4) \leftarrow 1$$

$$B(i+2) \leftarrow 2 * h^3 * f(x_{i+1})$$

end for

$$S(N+1, N+2) \leftarrow 3, S(N+1, N+1) \leftarrow -10 + 2 * h^3 * x_N$$

$$S(N+1, N) \leftarrow 12 \quad \triangleright \text{Condición de frontera utilizando 4 nodos hacia atrás y 1 hacia adelante de 170}$$

$$S(N+1, N-2) \leftarrow -6, S(N+1, N-2) \leftarrow 1$$

$$B(N+1) \leftarrow 2 * h^3 * f(x_N)$$

Sea $\mathbf{U} = \mathbf{S}/\mathbf{B}$

▷ Matriz de aproximaciones

for $i = 1$: $N/10$: $N+1$ **do**

$$E_i \leftarrow \text{abs}(Sol(X_i) - U_{i+1})$$

▷ i-ésimo error absoluto

$$\text{print } X_i, Sol_i, U_{i+1}, E_i$$

end for

4.2.1. Ventajas y desventajas del método de diferencias finitas

De las principales ventajas del método de diferencias finitas son su simplicidad y facilidad de implementación. Es un método que en general puede ser utilizado para resolver ecuaciones diferenciales de cualquier orden y en cualquier dominio, siempre y cuando este se pueda discretizar en una malla de puntos equidistantes.

Sin embargo, hemos observado que una de las principales desventajas del método es que la precisión de la solución depende en gran medida del tamaño de la malla utilizada para la discretización tal como se pudo apreciar en la tabla 13. Para obtener una solución precisa, se requiere una malla fina, lo que puede aumentar significativamente el costo computacional.

Por otra parte, a diferencia del método de diferencias finitas, el método de splines se basa en la interpolación de la función $y(x)$ utilizando polinomios suaves de bajo grado. Como se concluyó en el capítulo anterior, el método de splines es especialmente útil cuando la función $y(x)$ es suave y no presenta cambios abruptos en su derivada ya que depende más de esta suavidad de la función que el tamaño de la malla como lo es para el método de diferencias finitas.

En cuanto a la aproximación para el problema 165 al tratarse de una solución polinomial y exponencial, se obtiene una convergencia y error más que aceptable desde iteraciones con tan solo 10 nodos tal como se desplegaron los resultados en la tabla 12 mientras que para el método de diferencias finitas se requiere un tamaño de paso mucho más pequeño para lograr una convergencia y orden de error aceptable.

En general, el método de splines puede ser más preciso que el método de diferencias finitas para resolver ecuaciones diferenciales en dominios irregulares o con condiciones de borde no bien definidas. Sin embargo, su implementación puede ser más complicada que la del método de diferencias finitas, y su costo computacional también puede ser mayor en algunos casos si la función no es tan suave.

En resumen, tanto el método de diferencias finitas como el método de splines son métodos numéricos útiles para resolver ecuaciones diferenciales y la elección del método depende en gran medida del dominio y las condiciones de frontera del problema, así como de la precisión y eficiencia requeridas para la solución.

Para concluir, se presenta un esquema de ventajas y desventajas del método de diferencias finitas sobre el método de splines encontradas hasta ahora.

Ventajas

- Es relativamente fácil de implementar y entender. En general, es un método numérico que puede ser utilizado para resolver ecuaciones diferenciales en cualquier orden.
- Puede ser utilizado para resolver ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera complejas, como condiciones mixtas o condiciones de Neumann ⁶. De igual manera, puede ser aplicado en distintos dominios y geometrías, incluyendo dominios irregulares, como esferas debido a la naturaleza de la discretización (Kreyszig, 2018).

Desventajas

- El método de diferencias finitas tiene una mayor complejidad computacional en comparación del método de splines (Burden & Faires, 2011).
- Requiere de una malla uniforme y densa para obtener resultados precisos tal como se aprecia en las tablas 2 y 3. Esto puede ser difícil de lograr en algunos casos.
- El método de diferencias finitas puede ser más sensible a errores de redondeo que otros métodos numéricos, particularmente al de splines (Chapra & Canale, 2017).

⁶En matemáticas, una condición de Neumann es un tipo de condición de frontera o contorno en el que se especifican los valores que tomará la derivada de la solución en la frontera del dominio. Es llamada así en alusión a Carl Neumann. Cheng, A. y D. T. Cheng (2005). "Heritage and early history of the boundary element method", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 29, 268–302.

Capítulo 5. Métodos semiespectrales de colocación

La interpolación de Lagrange es una técnica fundamental en la teoría de aproximación de funciones. Consiste en la construcción de una función polinomial que pase exactamente por un conjunto de puntos (Kincaid & Cheney, 2002). Esto resulta muy útil en la resolución de problemas prácticos y de especial interés, la resolución de ecuaciones diferenciales. Sin embargo, la interpolación de Lagrange puede presentar complicaciones cuando se utiliza un número elevado de puntos, como la aparición de oscilaciones o la inestabilidad numérica debido a la proximidad de los nodos a interpolar (Quarteroni et al., 2006). Una manera de evitar estas dificultades es utilizar nodos especiales de polinomios ortogonales. De especial interés resultan ser los polinomios de Chebyshev aplicados en los puntos de Gauss-Lobato, que son puntos distribuidos de forma no uniforme en el intervalo $[-1, 1]$. El usar estos nodos permite obtener polinomios interpolantes mucho más estables y precisos que utilizar los nodos uniformes.

Formalmente, los nodos de Chebyshev son las raíces de los polinomios de Chebyshev de tipo 1 y están comprendidos en el intervalo $[-1, 1]$. La clave detrás de la eficacia ante el uso de estos nodos es la densidad de su distribución, los nodos están más concentrados en los extremos del intervalo y no tanto en el centro del mismo lo que minimiza el error de interpolación y reduce la tendencia de los polinomios a oscilar, en especial en los densos extremos (Trefethen, 2000).

En este capítulo, se estudiará una herramienta muy útil en la resolución numérica de ecuaciones diferenciales la cual consiste en construir una matriz de diferenciación basada en los nodos de Gauss-Lobato. La ventaja de esta matriz es que permite transformar una ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones algebraicas mediante un proceso de discretización de las distintas derivadas que componen la ecuación diferencial a resolver, lo que en la mayoría de los casos, facilita su resolución (Gustafsson, 2017).

Posteriormente, se construye la matriz, se muestran sus propiedades, ventajas y cómo es que son especialmente útiles en la resolución de ecuaciones diferenciales.

Finalmente, se muestra la eficacia ante la aproximación de la matriz de diferenciación para ciertas funciones dadas cuya solución analítica es conocida y se presentan los resultados de error y convergencia de esta metodología en comparativa con los métodos de splines y diferencias finitas vistos anteriormente en la resolución de ecuaciones diferenciales de tercer orden. Los resultados obtenidos en este capítulo serán de gran utilidad para entender la construcción y efectividad de los métodos espectrales al aproximar la solución de ecuaciones diferenciales de tercer orden, esto con el propósito de utilizar esta metodología, en conjunto con los otros métodos estudiados a lo largo de este trabajo, para resolver el problema de interés principal sobre eigenvalores y eigenfunciones.

5.1. Interpolación polinómica de Lagrange y nodos de Chebyshev

Consideremos una malla de $N + 1$ puntos de Chebyshev que se definen de la forma

$$x_j = \cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (171)$$

El objetivo es utilizar los puntos de Chebyshev para construir una matriz de diferenciación que será empleada para aproximar derivadas a funciones. En esta sección se muestran los pasos detallados para la construcción de esta matriz.

Sea P el polinomio de grado m menor o igual a N tal que

$$P(x_j) = f_j, \quad j = 0, 1, \dots, m \quad (172)$$

Lo que se desea es encontrar una matriz \mathbf{D} tal que al multiplicarla por la malla de puntos, f_j se aproxime la derivada, es decir,

$$\mathbf{W} = \mathbf{D} * \mathbf{Y} \quad (173)$$

donde \mathbf{Y} es el vector de nodos f_j y \mathbf{W} es el vector de derivadas P'_j .

Dado un conjunto de $N + 1$ puntos distintos $(x_0, y_0), \dots, (x_N, y_N)$ se define el polinomio interpolador de Lagrange como

$$L(x) = \sum_{j=0}^N l_j(x) y_j \quad (174)$$

donde $l_j(x)$ es llamado el j -ésimo coeficiente de interpolación de Lagrange y está definido por

$$l_j(x) = \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} \quad (175)$$

De la expresión 175, Si $x = x_j$, entonces

$$l_j(x_j) = \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x_j - x_m}{x_j - x_m} = 1 \quad (176)$$

Si x es algún punto $x_i \neq x_j$ de la malla, se tendrá que el factor $x - x_m$ será 0 cuando $m = i$ y por tanto

$$l_j(x_i) = \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x_i - x_m}{x_j - x_m} = 0 \quad (177)$$

Se puede entonces caracterizar el coeficiente de interpolación como una función a trozos de la siguiente manera

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (178)$$

Para comprobar que está interpolación es correcta y que efectivamente $L(x_j) = y_j$ en todos los puntos en la malla, basta con evaluar el interpolador L de 174, para $i = 0, 1, \dots, N$, de lo cual se obtienen las siguientes expresiones

$$L(x_0) = \sum_{j=0}^N l_j(x_0)y_j \quad (179)$$

$$L(x_1) = \sum_{j=0}^N l_j(x_1)y_j \quad (180)$$

$$\vdots$$

$$L(x_N) = \sum_{j=0}^N l_j(x_N)y_j \quad (181)$$

Desarrollando 181 término a término

$$L(x_0) = l_0(x_0)y_0 + l_1(x_0)y_1 + \dots + l_N(x_0)y_N \quad (182)$$

$$L(x_1) = l_0(x_1)y_0 + l_1(x_1)y_1 + \dots + l_N(x_1)y_N \quad (183)$$

$$\vdots$$

$$L(x_N) = l_0(x_N)y_0 + l_1(x_N)y_1 + \dots + l_N(x_N)y_N \quad (184)$$

Utilizando la caracterización 178 en las expresiones 182 al 184,

$$L(x_0) = 1y_0 + 0y_1 + \dots + 0y_N = y_0 \quad (185)$$

$$L(x_1) = 0y_0 + 1y_1 + \dots + 0y_N = y_1 \quad (186)$$

$$\vdots$$

$$L(x_N) = 0y_0 + 0y_1 + \dots + 1y_N = y_N \quad (187)$$

comprobando así que se satisface la interpolación.

5.2. La matriz de diferenciación de Chebyshev

En la ecuación 173, la matriz \mathbf{D} es cuadrada de orden $(N + 1)$, es decir, está en función del número de nodos. Sea \mathbf{D}_N la matriz de diferenciación de Chebyshev asociada al conjunto de $N+1$ nodos.

Antes de generalizar la estructura de \mathbf{D}_N se obtendrán las matrices \mathbf{D}_1 y \mathbf{D}_2 con fin de tener una mejor interpretación del proceso de interpolación y el álgebra recurrente.

Con $N = 1$, se tendrán los nodos x_0 y x_1 los cuales por definición de los puntos de Chebyshev dado por la expresión 171, son

$$x_0 = \cos\left(\frac{0\pi}{1}\right) = \cos(0) = 1 \quad (188)$$

y

$$x_1 = \cos\left(\frac{1\pi}{1}\right) = \cos(\pi) = -1 \quad (189)$$

Obteniendo el polinomio interpolante de Lagrange dado por 174, con $N = 1$

$$P(x) = \sum_{j=0}^1 l_j(x)y_j = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 \quad (190)$$

y desarrollando el j -ésimo coeficiente de interpolación visto en 175, para $j = 0, 1$

$$l_0(x) = \prod_{m=0, m \neq 0}^1 \frac{x - x_m}{x_0 - x_m} = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad l_1(x) = \prod_{m=0, m \neq 1}^1 \frac{x - x_m}{x_1 - x_m} = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \quad (191)$$

Puesto que m debe ser distinto de j y $N = 1$, solo se tiene un factor en cada producto.

Sustituyendo los valores de los nodos x_0 y x_1 de 188, y 189, en los coeficientes de interpolación obtenidos en 191, se obtienen los valores

$$l_0(x) = \frac{x - (-1)}{1 - (-1)} = \frac{x + 1}{2}, \quad l_1(x) = \frac{x - 1}{(-1) - 1} = \frac{1 - x}{2} \quad (192)$$

y el polinomio resultante al sustituir l_0 y l_1 en 190, es

$$P(x) = \left(\frac{x + 1}{2}\right)y_0 + \left(\frac{1 - x}{2}\right)y_1 \quad (193)$$

Al derivar $P(x)$ de 193, se obtiene la expresión

$$P'(x) = \frac{1}{2}y_0 - \frac{1}{2}y_1 \quad (194)$$

De la ecuación 173

$$\mathbf{W} = \mathbf{D} * \mathbf{Y} \quad (195)$$

Recordando que \mathbf{W} es el vector cuyas componentes son los valores de la función derivada evaluada en cada uno de los nodos, para $N = 1$, \mathbf{W} tiene entradas constantes y $\mathbf{D} = \mathbf{D}_1$. Luego

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P'(x_0) \\ P'(x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}y_0 - \frac{1}{2}y_1 \\ \frac{1}{2}y_0 - \frac{1}{2}y_1 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_1 \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad (196)$$

Desarrollando la matriz \mathbf{D}_1 , multiplicando e igualando términos

$$\mathbf{D}_1 \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ay_0 + by_1 \\ cy_0 + dy_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}y_0 - \frac{1}{2}y_1 \\ \frac{1}{2}y_0 - \frac{1}{2}y_1 \end{pmatrix} \quad (197)$$

Se concluye que la forma de la matriz \mathbf{D}_1 es

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (198)$$

Con el proceso análogo al anterior y de manera más directa, para $N = 2$ se tendrán los nodos

$$x_0 = \cos\left(\frac{0\pi}{2}\right) = \cos(0) = 1 \quad (199)$$

$$x_1 = \cos\left(\frac{1\pi}{2}\right) = \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (200)$$

$$x_2 = \cos\left(\frac{2\pi}{2}\right) = \cos(\pi) = -1 \quad (201)$$

El polinomio interpolante será cuadrático esta vez y tiene la estructura siguiente

$$P(x) = \sum_{j=0}^2 l_j(x)y_j = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2 \quad (202)$$

Por consecuente, los coeficientes de interpolación también son de grado 2; l_0, l_1 y l_2 quedan definidos

como

$$l_0(x) = \prod_{m=0, m \neq 0}^2 \frac{x - x_m}{x_0 - x_m} = \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right) \left(\frac{x - x_2}{x_0 - x_2} \right) = \left(\frac{x - 0}{1 - 0} \right) \left(\frac{x - (-1)}{1 - (-1)} \right) \quad (203)$$

$$l_1(x) = \prod_{m=0, m \neq 1}^2 \frac{x - x_m}{x_1 - x_m} = \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right) \left(\frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \right) = \left(\frac{x - 1}{0 - 1} \right) \left(\frac{x - (-1)}{0 - (-1)} \right) \quad (204)$$

$$l_2(x) = \prod_{m=0, m \neq 2}^2 \frac{x - x_m}{x_2 - x_m} = \left(\frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \right) \left(\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \right) = \left(\frac{x - 1}{(-1) - 1} \right) \left(\frac{x - 0}{(-1) - 0} \right) \quad (205)$$

Luego, el polinomio resultante al sustituir l_0 , l_1 y l_2 en 202, es

$$P(x) = \sum_{j=0}^2 l_j(x) y_j = \left(\frac{x}{1} \right) \left(\frac{x+1}{2} \right) y_0 + \left(\frac{x-1}{-1} \right) \left(\frac{x+1}{1} \right) y_1 + \left(\frac{x-1}{-2} \right) \left(\frac{x}{-1} \right) y_2 \quad (206)$$

Simplificando $P(x)$ y obteniendo $P'(x)$

$$P(x) = \left(\frac{x}{2} \right) (1+x)y_0 + (1+x)(1-x)y_1 + \left(\frac{x}{2} \right) (x-1)y_2 \quad (207)$$

$$P'(x) = \left(x + \frac{1}{2} \right) y_0 - 2xy_1 + \left(x - \frac{1}{2} \right) y_2 \quad (208)$$

Se requieren los valores de $P'(x)$ evaluada en x_0 , x_1 y x_2 para obtener \mathbf{D}_2

$$P'(x_0) = \frac{3}{2}y_0 - 2y_1 + \frac{1}{2}y_2 \quad (209)$$

$$P'(x_1) = \frac{1}{2}y_0 + 0y_1 - \frac{1}{2}y_2 \quad (210)$$

$$P'(x_2) = -\frac{1}{2}y_0 + 2y_1 + \frac{3}{2}y_2 \quad (211)$$

De manera análoga para la ecuación matricial en 196, ahora \mathbf{W} y \mathbf{D}_2 tienen la estructura

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} P'(x_0) \\ P'(x_1) \\ P'(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}y_0 - 2y_1 + \frac{1}{2}y_2 \\ \frac{1}{2}y_0 + 0y_1 - \frac{1}{2}y_2 \\ -\frac{1}{2}y_0 + 2y_1 + \frac{3}{2}y_2 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_2 \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (212)$$

Y de la identidad 212, se concluye que la forma de la matriz \mathbf{D}_2 es

$$\mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 2 & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad (213)$$

Del esquema anterior para calcular \mathbf{D}_1 y \mathbf{D}_2 , para obtener \mathbf{D}_N se necesitan entonces los $N + 1$ nodos, el polinomio interpolante $P(x)$ y su derivada, para construir la ecuación

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} P'(x_0) \\ P'(x_1) \\ \vdots \\ P'(x_N) \end{pmatrix} = \mathbf{D}_N \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (214)$$

Es decir, necesitamos conocer la manera general de obtener $P(x)$ y su derivada, y por consecuente, los j -ésimos coeficientes de interpolación.

De la ecuaciones 174, y 175, la forma general de los polinomios y los coeficientes interpolantes está dada por

$$L(x) = \sum_{j=0}^N l_j(x)y_j \quad l_j(x) = \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} \quad (215)$$

de esto, la forma general de $P(x)$ es

$$P(x) = \sum_{j=0}^N \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} y_j \quad (216)$$

Luego sabemos que la derivada de una suma es la suma de la derivada de los términos,

$$P'(x) = \sum_{j=0}^N l'_j(x)y_j \quad (217)$$

para obtener $l'_j(x)$, se puede hacer mediante la regla del producto, o bien utilizando propiedades logarítmicas. Si

$$l_j(x) = \prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} \quad (218)$$

Se obtiene el logaritmo natural de ambos lados de la ecuación

$$\ln(l_j(x)) = \ln \left(\prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \quad (219)$$

Por propiedades de logaritmos, $\ln(ab) = \ln(a) + \ln(b)$, luego

$$\ln(l_j(x)) = \ln \left(\prod_{m=0, m \neq j}^N \frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) = \sum_{j=0, m \neq j}^N \ln \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \quad (220)$$

La derivada de un logaritmo es la derivada del argumento dividida entre el propio argumento, es decir $\ln(u)' = \frac{u'}{u}$. Aplicando esta regla a la expresión 220, se tiene que

$$\ln(l_j(x))' = \frac{l_j(x)'}{l_j(x)} = \left(\sum_{j=0, m \neq j}^N \ln \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \right)' \quad (221)$$

Para obtener la derivada de la suma en 221, se aplica las reglas de derivación de una suma y de un cociente de funciones dadas por

$$(f(x) + g(x))' = f'(x) + g'(x) \quad \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right)' = \frac{f'(x)g(x) - f(x)g'(x)}{g^2(x)} \quad (222)$$

Aplicando la regla de derivada para logaritmos y las propiedades 222, en el lado derecho de la ecuación 221, se tiene que

$$\left(\sum_{j=0, m \neq j}^N \ln \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \right)' = \sum_{j=0, m \neq j}^N \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right)' \quad (223)$$

Del numerador en el lado derecho de 223,

$$\left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right)' = \frac{(x - x_m)'(x_j - x_m) - (x_j - x_m)'(x - x_m)}{(x_j - x_m)^2} \quad (224)$$

Como x_j y x_m son constantes,

$$\left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right)' = \frac{(1)(x_j - x_m) - (0)(x - x_m)}{(x_j - x_m)^2} = \frac{(x_j - x_m)}{(x_j - x_m)^2} = \frac{1}{x_j - x_m} \quad (225)$$

Sustituyendo el valor de la derivada obtenida en 225, en la ecuación 223, se tiene que

$$\left(\sum_{j=0, m \neq j}^N \ln \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \right)' = \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{\frac{x_j - x_m}{x_j - x_m}} = \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{x - x_m} \quad (226)$$

Con la expresión final de 226, la ecuación 221 queda como

$$\ln(l_j(x))' = \frac{l_j(x)'}{l_j(x)} = \left(\sum_{j=0, m \neq j}^N \ln \left(\frac{x - x_m}{x_j - x_m} \right) \right)' = \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{x - x_m} \quad (227)$$

Finalmente la derivada del j-ésimo coeficiente interpolante se puede despejar de la ecuación 227,

$$l_j(x)' = l_j(x) \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{x - x_m} \quad (228)$$

Luego, del producto de matrices en 214, sabemos que las entradas de la matriz \mathbf{D}_N estarán dadas por los coeficientes del polinomio $P'(x)$ evaluado en los nodos x_0, \dots, x_n y de las propiedades 178, se tiene que

$$l_j(x_j)' = l_j(x_j) \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{x - x_m} = \sum_{j=0, m \neq j}^N \frac{1}{x - x_m} \quad (229)$$

$$\mathbf{D}_{jj} = \sum_{k=0, k \neq j}^N \frac{1}{x_j - x_k} \quad (230)$$

y, por otra parte, evaluando $l_j(x_i)$ con $i \neq j$, se tienen los coeficientes

$$\mathbf{D}_{ij} = \frac{\prod_{k=0, k \neq i}^N (x_i - x_k)}{\prod_{k=0, k \neq j}^N (x_j - x_k)} \quad (231)$$

Existen distintas maneras de obtener las componentes de la matriz de Chebyshev. En Trefethen (2000) se da a conocer un esquema de \mathbf{D}_N resultado de el teorema de la Matriz de diferenciación de Chebyshev el cual establece que las entradas de \mathbf{D}_N están dadas por

$$(\mathbf{D}_N)_{00} = \frac{2N^2 + 1}{6} \quad (232)$$

$$(\mathbf{D}_N)_{NN} = -\frac{2N^2 + 1}{6} \quad (233)$$

$$(\mathbf{D}_N)_{jj} = \frac{-x_j}{2(1 - x_j^2)} \quad j = 1, \dots, N - 1 \quad (234)$$

$$(\mathbf{D}_N)_{ij} = \frac{c_i}{c_j} \frac{(-1)^{i+j}}{(x_i - x_j)} \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, N - 1 \quad (235)$$

en donde $c_i = 2$ si i es un extremo, es decir $i = 0$ o $i = N$. Para cualquier otro caso, $c_i = 1$.

5.3. Obtención de la matriz numéricamente

Como su nombre lo indica, la matriz de diferenciación de Chebyshev es útil para aproximar numericamente la derivada de una función en los nodos x_i . Esto puede hacerse de forma iterativa para aproximar derivadas de orden superior, es decir \mathbf{D}^k servirá como herramienta para aproximar $f^{(k)}(x)$. Para propósitos de este escrito, se trabajó con \mathbf{D}^3 para la solución de ecuaciones diferenciales de tercer orden. Se desarrolló una implementación de código en MATLAB para generar \mathbf{D} , se estudió el error y la convergencia de la aproximación con el objetivo de realizar comparaciones ante distintas funciones y cantidades de nodos.

A continuación se muestra un pseudocódigo representativo del algoritmo implementado.

Algoritmo 4 Matriz de diferenciación de Chebyshev

Entrada: Tamaño de la matriz N

for $j = 0 : N$ **do** $x_j = \cos(j\pi/N)$

▷ Se generan los nodos de Chebyshev

end for

$C = [2; 1; \dots; 1; 2]$

▷ C es el vector visto en (235)

for $i = 1$ to $N+1$ **do**

for $j = 1$ to $N+1$ **do** **if** $i \neq j$

$$D_{i,j} = \frac{C_i(-1)^{(i+j)}}{C_j(x_i-x_j)}$$

▷ Valores fuera de la diagonal en D

end for

end for

for $i = 1$ to $N+1$ **do**

$$D_{i,i} = -\sum_{j=0, j \neq i}^N D_{i,j}$$

▷ Valores en la diagonal de D

end for

Trefethen (2000) menciona que para una función suave y periódica $f(x)$, la matriz de diferenciación con 20 nodos aproxima la primera derivada $f'(x)$ a 9 cifras significativas.

Como el interés es verificar el comportamiento de D^3 , a continuación se muestran los resultados de la aproximación para funciones suaves y perfectamente diferenciables cuyas terceras derivadas analíticas eran conocidas. Más adelante se estudian casos particulares de funciones que no lo son.

Cabe señalar que para $n = 1$ y $n = 2$ el comportamiento de D^3 es deficiente, ya que la precisión de la aproximación depende del orden de la matriz y por ende, el espaciado entre los puntos. En el caso particular de $n = 2$, como se puede ver en la figura 1 para la función $f(x) = e^x$, la cual es suave por excelencia, el error relativo en la aproximación de la derivada es de prácticamente el 100 %, esto debido a que la matriz no es capaz de capturar con precisión el comportamiento de la función entre los dos puntos. En otras palabras, la aproximación resulta en una función lineal entre los dos puntos, lo cual no es una buena aproximación para la mayoría de las funciones. El resto de resultados será tomado en cuenta solo para casos con n mayor a 4.

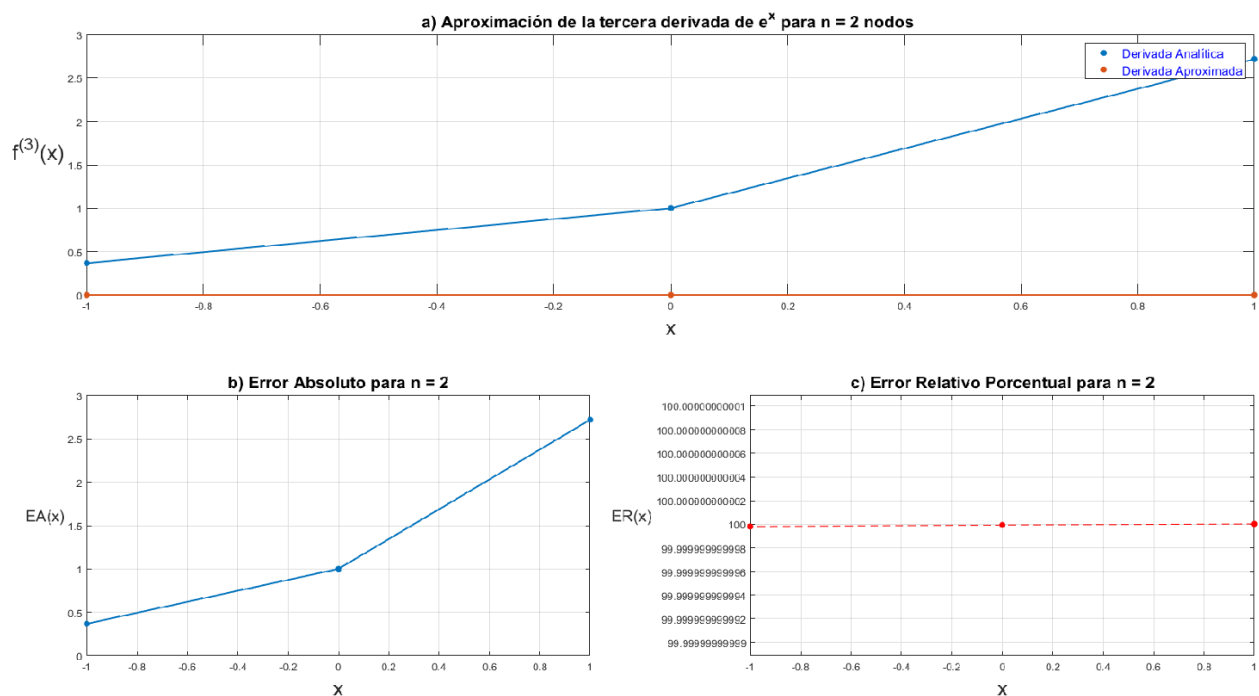


Figura 1. Gráficas de comparación en la aproximación de la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 2$

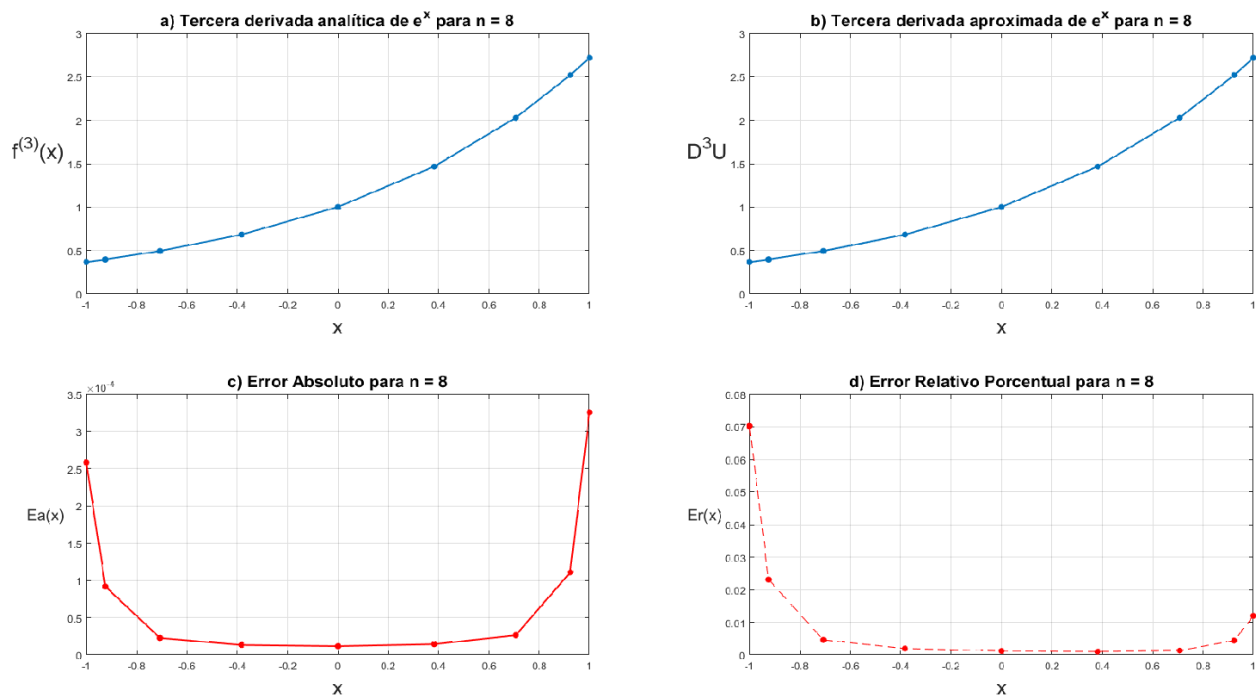


Figura 2. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 8$

Para la misma función $f(x) = e^x$, los comportamientos de convergencia y error de aproximar la tercera derivada con 8 y 32 nodos se despliegan en las figuras 2 y 3.

En la gráfica c) de la figura 2 se observa que el error absoluto es de hasta 4 cifras significativas con tan solo 8 nodos. Por otra parte, entre las gráficas a) y b) la diferencia entre trazados es mínima.

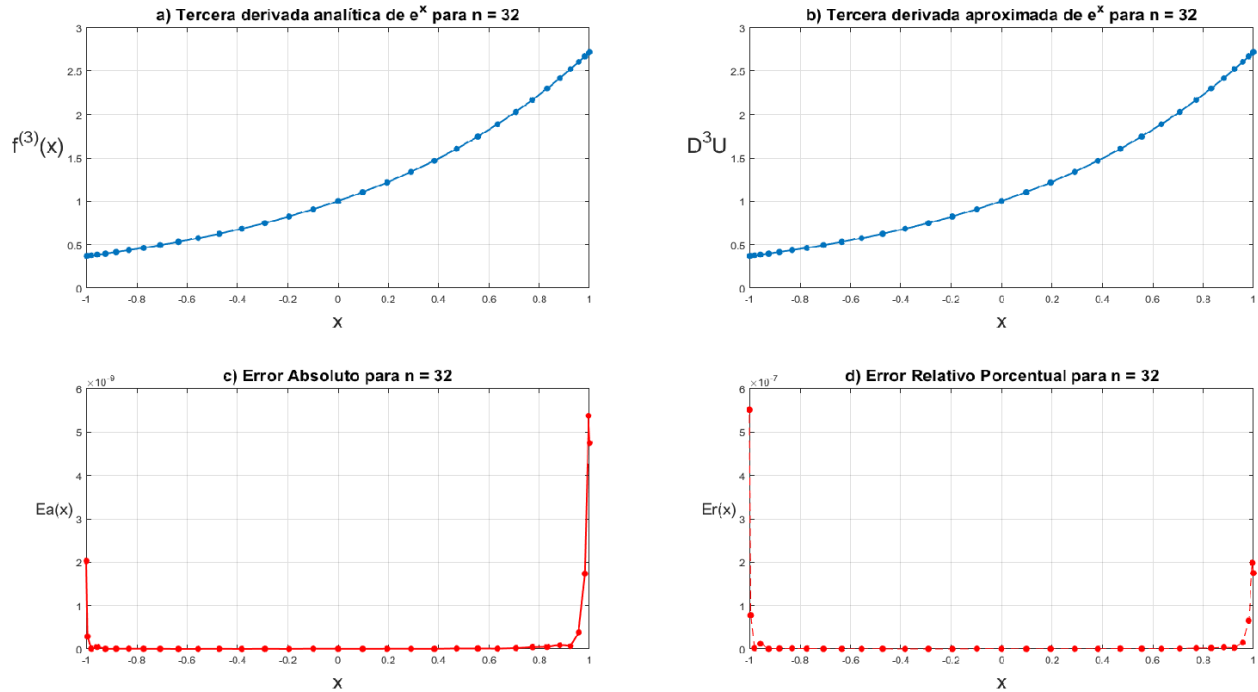


Figura 3. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x$ con $n = 32$

En la figura 3, con un aumento a 32 nodos los errores absolutos y relativos en c) y d) son muy cercanos a cero dentro de la malla mientras que las gráficas a) y b), que representan la tercera derivada, son prácticamente iguales.

En las figuras 4,5 y 6 para la función $f(x) = e^x \sin(5x)$ cuya derivada tercera derivada analítica es $f'''(x) = -2e^x(37\sin(5x) + 55\cos(5x))$ se puede apreciar detalladamente la reducción de los errores y la convergencia entre el valor analítico y el aproximado conforme se incrementa el tamaño de nodos.

En la figura 4, con 8 nodos hay bastante error tanto absoluto como relativo en los nodos extremos y los cercanos a los mismos. En los nodos centrales la aproximación es muy buena por la cantidad tan baja de nodos y al tratarse de una función que podría pensarse es más complicada que la anterior. La rápida convergencia central se debe a la suavidad de las funciones e^x y $\sin(x)$.

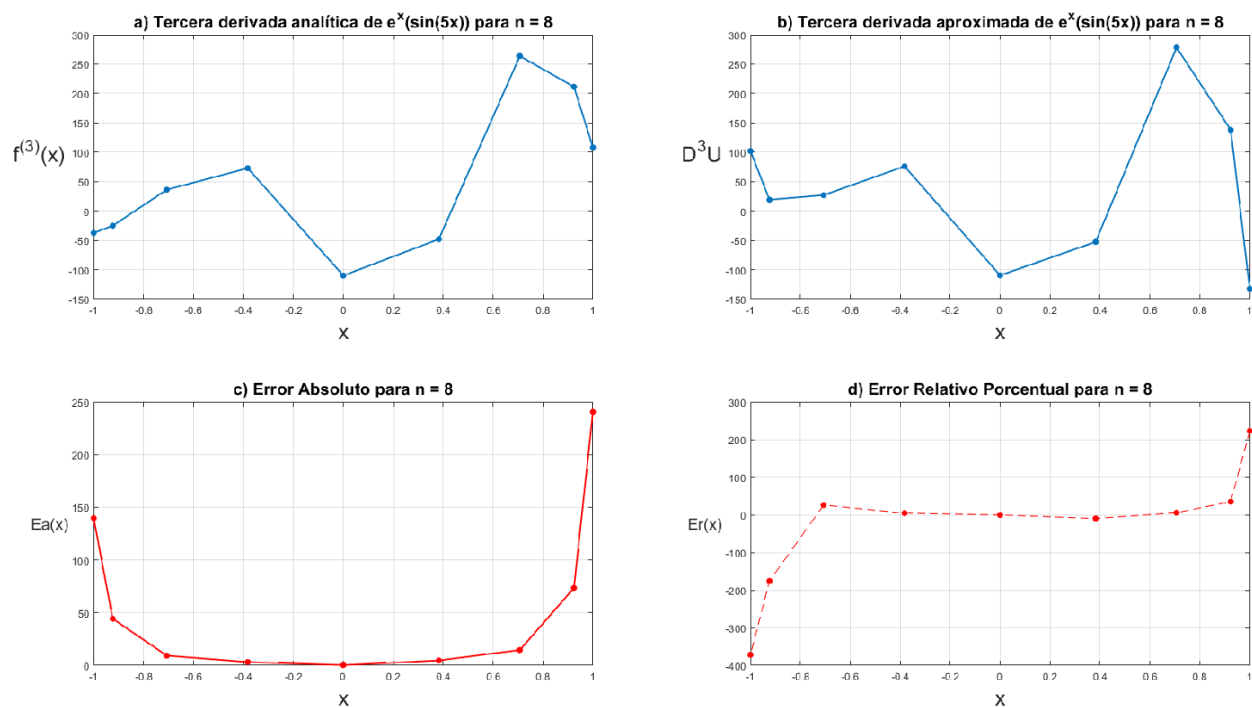


Figura 4. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 38$

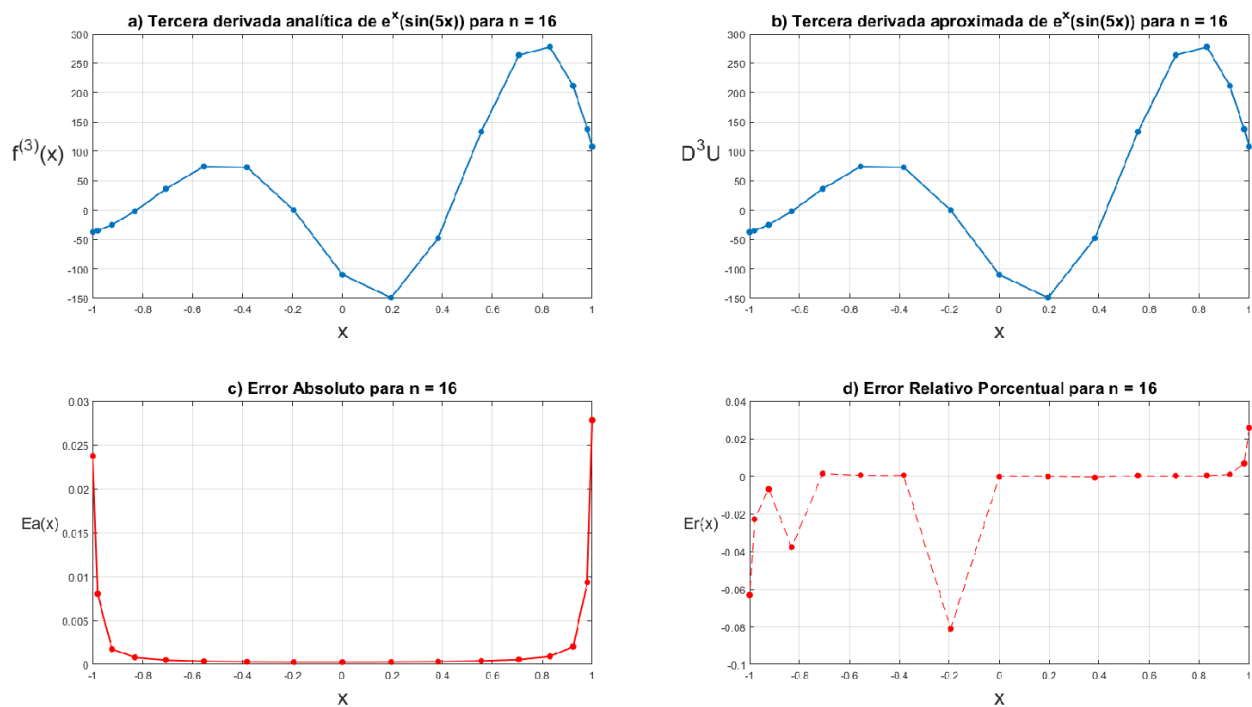


Figura 5. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 36$

A diferencia de lo visto en la gráfica b) de la figura 4, donde el valor $f'''(x_n)$ está muy alejado del analítico, en la gráfica homóloga en la figura 5, los errores son muy bajos para 16 nodos. Se preservó el comportamiento visto en 2, donde el error en los nodos interiores es de hasta 2 cifras significativas.

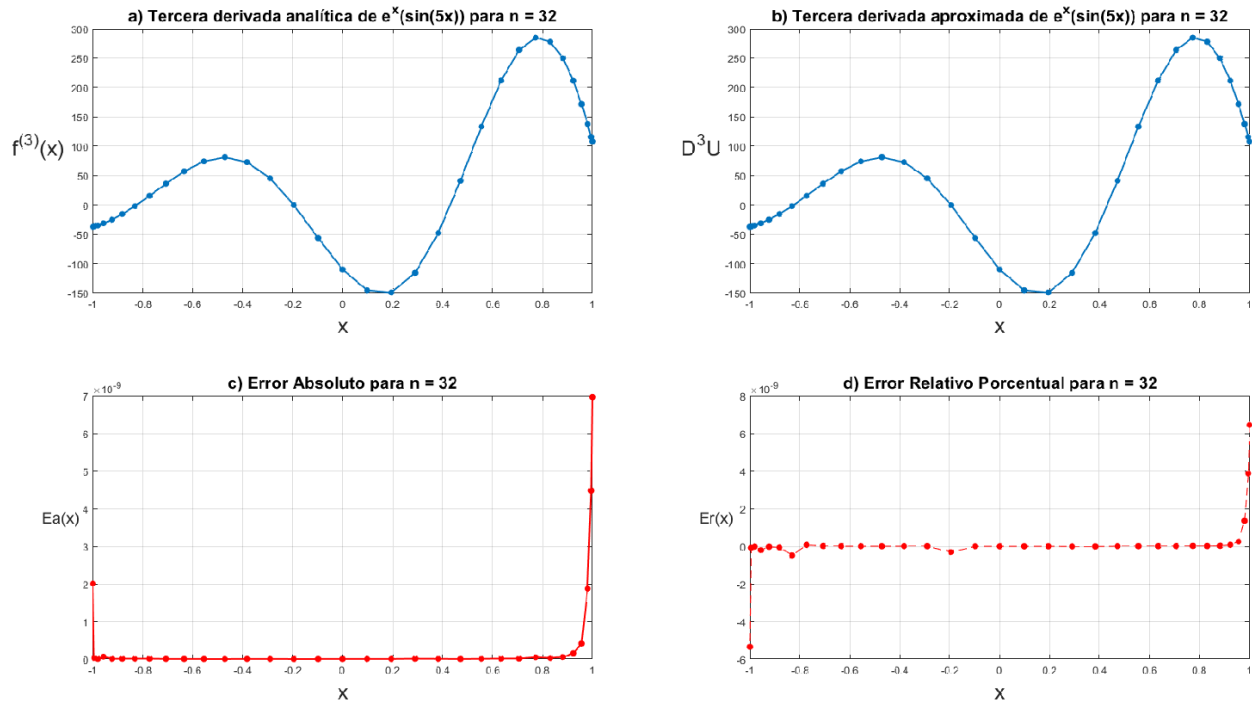


Figura 6. Error absoluto y relativo al aproximar la tercera derivada de $f(x) = e^x \sin(5x)$ con $n = 32$

En la figura 6 se muestra una aproximación más que aceptable logrando alcanzar un máximo de hasta 12 cifras significativas con 32 nodos. Finalmente, en la tabla 14 se muestran los máximos errores absolutos obtenidos al aproximar la tercera derivada para distintas cantidades de nodos de las funciones vistas anteriormente y las funciones $x^4, x^7, \text{sen}(x)$.

Tabla 14. Máximo error absoluto obtenido al aproximar la tercera derivada de cada función en mallas de 4, 8, 16 y 32 nodos.

Nodos	e^x	$\text{sen}(x)$	x^4	x^7	$e^x \sin(5x)$
4	5.9×10^{-1}	3.8×10^{-1}	1.42×10^{-14}	1.9×10^2	2.9×10^2
8	3.2×10^{-4}	2.7×10^{-4}	9×10^{-13}	1.3×10^{-12}	2.4×10^2
16	6×10^{-10}	2×10^{-10}	2.2×10^{-10}	2.3×10^{-10}	2.7×10^{-2}
32	5.3×10^{-9}	3.1×10^{-9}	5.51×10^{-9}	3.7×10^{-9}	6.9×10^{-9}

5.4. Método de colocación de Chebyshev para ecuaciones diferenciales

Como se mostró en la sección anterior, la matriz de diferenciación de Chebyshev proporciona buenos resultados al aproximar las derivadas de una función, en particular, para la tercera derivada los resultados son muy satisfactorios. En esta sección se utilizará este método para solucionar ecuaciones diferenciales de tercer orden con condiciones en la frontera y se compararán los resultados obtenidos con los métodos de diferencias finitas y splines empleados anteriormente. Se concluye estudiando los resultados para las ecuaciones de Khan & Aziz (2002).

Consideremos la ecuación diferencial general de tercer orden dada por

$$u'''(x) + p(x)u''(x) + q(x)u'(x) + r(x)u(x) = f(x) \quad (236)$$

esta vez definida en el intervalo general (a, b) sujeto a las condiciones de frontera

$$u(a) = \alpha \quad u(b) = \beta \quad u'(a) = \gamma \quad (237)$$

Lo primero a observar es que se debe realizar un mapeo al intervalo $[-1, 1]$ para trabajar con los nodos de Chebyshev. Este mapeo se se puede realizar con la transformación lineal

$$\xi = -1 + 2\frac{x-a}{b-a} \quad (238)$$

A partir de 238 y la regla de la cadena se tiene que

$$u'(x) = \frac{du}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d\hat{u}}{d\xi} = \frac{2}{b-a} \frac{d\hat{u}}{d\xi} \quad (239)$$

Donde ξ y \hat{u} están definidas en el intervalo post transformación $[-1, 1]$

Sea s el factor de derivación $\frac{2}{b-a}$ en 239.

Este factor s tiene la propiedad que por cada orden de derivada, se obtiene un grado adicional, es decir, la forma general para la derivada m -ésima de u en el intervalo $[-1, 1]$ está dada por la expresión

$$u^{(m)}(x) = \frac{d^m u}{dx^m} = s^m \hat{u}^{(m)}(\xi) \quad (240)$$

sustituyendo las relaciones 238, 239 y 240 en la ecuación general 236 se tiene que

$$s^3 \hat{u}'''(\xi) + s^2 \hat{p}(\xi) \hat{u}''(\xi) + s \hat{q}(\xi) \hat{u}'(\xi) + \hat{r}(\xi) \hat{u}(\xi) = \hat{f}(\xi) \quad (241)$$

Con este cambio, las condiciones de frontera resultan en

$$\hat{u}(a) = \hat{u}(-1) = \alpha \quad (242)$$

$$\hat{u}(b) = \hat{u}(1) = \beta \quad (243)$$

$$s \hat{u}'(a) = \hat{u}'(-1) = \gamma \quad (244)$$

En la forma general de 241 definida para el intervalo $[-1, 1]$, por simplicidad y sin pérdida de generalidad, evitamos el señalamiento \hat{x} en la expresión así como $\xi = x$ y hacemos el cambio de intervalo $[a, b]$ a $[-1, 1]$ en 236 tal como hemos visto que es posible con estos pasos intermedios.

Luego, tenemos la forma general en el dominio deseado, dada por

$$s^3 u'''(x) + s^2 p(x) u''(x) + s q(x) u'(x) + r(x) u(x) = f(x) \quad (245)$$

definida en el intervalo específico $[-1, 1]$ y sujeto a las condiciones de frontera

$$u(-1) = \alpha \quad u(1) = \beta \quad u'(-1) = \gamma \quad (246)$$

Utilizando la matriz de diferenciación de Chebyshev obtenida en la sección 5.2 discretizamos la ecuación 245 con la aproximación discreta de la m -ésima derivada de u en x_i dada por

$$u^{(m)}(x_i) = \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^m u(x_j) \quad (247)$$

Tenemos que de 245 se puede expresar en forma discreta como un sistema de ecuaciones para $j = 0, 1, 2, \dots, N$ definido como

$$s^3 \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^3 u_j + s^2 p_i \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^2 u_j + s q_i \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j} u_j + r_i u_i = f_i \quad (248)$$

Las condiciones de frontera también son discretizadas y la primera derivada en x_0 se aproxima con la

matriz de diferenciación de primer orden, las condiciones quedan dadas por las relaciones

$$u_0 = \alpha \quad (249)$$

$$u_N = \beta \quad (250)$$

$$s \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{N,j} u_j = \gamma \quad (251)$$

Para encontrar los valores u_i se resuelve el sistema de ecuaciones resultantes en 248 constituido por $N - 1$ relaciones. Luego la discretización de la expresión 247 en el nuevo dominio visto en 240 resulta en

$$u^{(m)}(x) = \frac{d^m u}{dx^m} = s^m \hat{u}^{(m)} = s^m \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^m u_j \quad (252)$$

Luego, la suma resultante en 252 se puede expresar como

$$s^m \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^m u_j = s^m \mathbf{D}_{i,0}^m u_0 + s^m \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^m u_j + s^m \mathbf{D}_{i,N}^m u_N \quad (253)$$

Si aplicamos el desarrollo de términos de 253 en la expresión discretizada 248 se tiene que

$$f_i = s^3 \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^3 u_j + s^2 p_i \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j}^2 u_j + s q_i \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{i,j} u_j + r_i u_i = s^3 \mathbf{D}_{i,0}^3 u_0 + s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^3 u_j + s^3 \mathbf{D}_{i,N}^3 u_N \quad (254)$$

$$s^2 p_i \mathbf{D}_{i,0}^2 u_0 + s^2 p_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^2 u_j + s^2 p_i \mathbf{D}_{i,N}^2 u_N + s q_i \mathbf{D}_{i,0} u_0 + s q_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j} u_j + s q_i \mathbf{D}_{i,N} u_N + r_i u_i \quad (255)$$

Por las condiciones dadas en 248, es posible restar todos los términos que involucren a u_0 y u_N en la ecuación 255 para obtener el sistema

$$s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^3 u_j + s^2 p_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^2 u_j + s q_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j} u_j + r_i u_i = \quad (256)$$

$$f_i - s^3 \mathbf{D}_{i,0}^3 u_0 - s^3 \mathbf{D}_{i,N}^3 u_N - s^2 p_i \mathbf{D}_{i,0}^2 u_0 - s^2 p_i \mathbf{D}_{i,N}^2 u_N - s q_i \mathbf{D}_{i,0} u_0 - s q_i \mathbf{D}_{i,N} u_N \quad (257)$$

Factorizando u_0 , u_N y aplicando las condiciones de frontera 249 y 250 en 257

$$s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^3 u_j + s^2 p_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j}^2 u_j + s q_i \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{i,j} u_j + r_i u_i = \quad (258)$$

$$f_i - (s^3 \mathbf{D}_{i,0}^3 + s^2 p_i \mathbf{D}_{i,0}^2 + s q_i \mathbf{D}_{i,0}) \alpha - (s^3 \mathbf{D}_{i,N}^3 + s^2 p_i \mathbf{D}_{i,N}^2 + s q_i \mathbf{D}_{i,N}) \beta \quad (259)$$

Por simplicidad, sea L_i la i -ésima suma resultante en el sistema anterior, es decir,

$$L_i = f_i - (s^3 \mathbf{D}_{i,0}^3 + s^2 p_i \mathbf{D}_{i,0}^2 + s q_i \mathbf{D}_{i,0}) \alpha - (s^3 \mathbf{D}_{i,N}^3 + s^2 p_i \mathbf{D}_{i,N}^2 + s q_i \mathbf{D}_{i,N}) \beta \quad (260)$$

De manera similar, para utilizar la condición 251 en el sistema, expresamos u'_0 en su forma discreta extrayendo los términos extremos de la suma, esto es tomar la expresión de la condición 251 y aplicar el desarrollo visto en 253

$$s \sum_{j=0}^N \mathbf{D}_{N,j} u_j = s \mathbf{D}_{N,0} u_0 + s \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{N,j} u_j + s \mathbf{D}_{N,N} u_N = \gamma \quad (261)$$

Aplicando las condiciones de frontera para u_0 y u_N ,

$$s \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{N,j} u_j = \gamma - s \mathbf{D}_{N,0} \alpha - s \mathbf{D}_{N,N} \beta \quad (262)$$

Finalmente, agregamos la ecuación 262 al sistema de ecuaciones 259. Por simplicidad, se reemplaza la condición en el nodo $N - 1$.

La estructura general del sistema resultante para una ecuación diferencial general de tercer orden planteada en 248 está dada por las matrices

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,j}^3 u_j + s^2 p_1 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,j}^2 u_j + s q_1 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,j} u_j + r_1 u_1 \\ s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{2,j}^3 u_j + s^2 p_2 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{2,j}^2 u_j + s q_2 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{2,j} u_j + r_2 u_2 \\ \vdots \\ s^3 \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{N-1,j}^3 u_j + s^2 p_{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{N-1,j}^2 u_j + s q_{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{N-1,j} u_j + r_{N-1} u_{N-1} \end{pmatrix} \quad (263)$$

y

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_{N-1} \end{pmatrix} \quad (264)$$

Por linealidad, podemos expresar la matriz \mathbf{A} como un producto entre matrices de la forma

$$\mathbf{S} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{A} \quad (265)$$

Donde \mathbf{S} es una matriz cuadrada de orden $N - 1$ y \mathbf{L} es el vector de resultados de \mathbf{L}_i definido en 260 para $i = 1, 2, \dots, N - 1$.

Luego, se agrega al sistema la condición de frontera suplantando el penúltimo renglón en las matrices \mathbf{S} y \mathbf{L} por la expresión resultante de discretizar la condición de frontera en 262 para obtener el sistema

$$\hat{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ \gamma - s\mathbf{D}_{N,0}\alpha - s\mathbf{D}_{N,N}\beta \end{pmatrix} \quad (266)$$

Finalmente, expresamos a la matriz \mathbf{S} . Por simplicidad, de las expresiones en los elementos de la matriz \mathbf{A} , sean

$$\mathbf{C}_{i,j} = s^3\mathbf{D}_{i,j}^3 + s^2p_i\mathbf{D}_{i,j}^2 + sq_i\mathbf{D}_{i,j} \quad (267)$$

Con la factorización de 265, y la simplificación 267 podemos expresar a \mathbf{S} , como

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{1,1} - r_1 & \mathbf{C}_{1,2} & \dots & \mathbf{C}_{1,N-1} \\ \mathbf{C}_{2,1} & \mathbf{C}_{2,2} - r_2 & \dots & \mathbf{C}_{2,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{C}_{N-1,1} & \mathbf{C}_{N-1,2} & \dots & \mathbf{C}_{N-1,N-1} - r_{N-1} \end{pmatrix} \quad (268)$$

Luego, de 268 obtenemos $\hat{\mathbf{S}}$ intercambiando el último renglón en \mathbf{S} con la expresión de la condición de frontera 262 y la simplificación 267 para finalmente sustituir en la expresión 266 y obtener el sistema matricial de ecuaciones a resolver

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_{1,1} - r_1 & \mathbf{C}_{1,2} & \dots & \mathbf{C}_{1,N-1} \\ \mathbf{C}_{2,1} & \mathbf{C}_{2,2} - r_2 & \dots & \mathbf{C}_{2,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s\mathbf{D}_{N,1} & s\mathbf{D}_{N,2} & \dots & s\mathbf{D}_{N,N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ \gamma - s\mathbf{D}_{N,0}\alpha - s\mathbf{D}_{N,N}\beta \end{pmatrix} \quad (269)$$

El sistema resultante consta de matrices anidadas que puede ser resuelto utilizando la representación de 267 y cada uno de los elementos l_i están dados por la expresión 260.

A continuación, se muestra el pseudocódigo del algoritmo de la implementación en MATLAB del método de diferenciación de Chebyshev. Nótese que se reutiliza el algoritmo 1 visto en el capítulo de splines para generar la matriz de diferenciación y posteriormente obtener la de orden 3.

Algoritmo 5 Método de diferenciación de Chebyshev

Entrada: Tamaño N de la matriz, Ecuación diferencial y condiciones de frontera

Salida: Vector aproximación de la solución para $N+1$ nodos $\mathbf{D} = \text{ChebMatrix}(N)$ ▷ Se genera la matriz de diferenciación utilizando el algoritmo 1

$y''' = f(x, y, y', y'')$ ▷ Leer la ecuación diferencial

$y_0 = \alpha$

$y_N = \beta$ ▷ Condiciones de frontera vistas en (68)

$y'_0 = \gamma$

$\mathbf{D}_3 = D^3$ ▷ Elevar la matriz a grado 3

$\mathbf{D}_3(1, :) = \text{zeros}(N + 1, 1)$ ▷ Asignar un renglón nulo al inicio y final de la matriz

$\mathbf{D}_3(N + 1, :) = \text{zeros}(N + 1, 1)$

$\mathbf{D}_3(1, 1) = 1$ ▷ Asignar 1 al primer y último pues y_0 y y_N son conocidos

$\mathbf{D}_3(N + 1, N + 1) = 1$

$\mathbf{D}_3(N, :) = D(N + 1, :)$ ▷ Aplicar la condición de frontera de y'_0 utilizando la matriz D

Sea \mathbf{C} un vector columna de tamaño $N+1$

$B_0 = y_0$

$B_{N-1} = y'_0$

$B_N = y_N$

Solucionar el sistema resultante $\mathbf{DU} = \mathbf{B}$ mediante álgebra lineal o método no lineal.

Imprimir \mathbf{U}_i para $i = 0, \dots, N$

Si se conoce la solución analítica $Y(x)$ imprimirla y desplegar el error absoluto $E = |Y - U|$

Antes de generalizar el algoritmo para toda ecuación diferencial de orden 3 y para todo intervalo $[a, b]$, se propuso el ejemplo de una ecuación diferencial relativamente rápida para validar que efectivamente, la implementación funciona en el dominio de los nodos de Chebyshev. Posteriormente se realizaron las adecuaciones al algoritmo 2 con el fin de realizar el mapeo de dominio visto en 238 y trabajar con la forma general de la ecuación 245 con las condiciones 246. De especial interés es la aplicación de este método para solucionar el problema de eigenvalores para una ecuación diferencial de tercer orden. Este problema se estudiará en el capítulo 6 utilizando los 3 métodos vistos a lo largo de este escrito.

Consideremos nuevamente el problema de la literatura en Khan & Aziz (2002)

$$y'''(x) = xy + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (270)$$

Con las condiciones de frontera

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad y(1) = 0, \quad (271)$$

Como la ecuación anterior solamente involucra el uso de la tercera derivada, es suficiente con generar la matriz de diferenciación \mathbf{D} , obtener \mathbf{D}^3 y remplazar en 270. Se obtiene la matriz dando uso del algoritmo 5. Luego,

$$y'''(x) = \sum_{j=1}^N = \mathbf{D}_{ij}^3 y_j = xy_j + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (272)$$

y la condición de frontera

$$y'(0) = \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,j} y_j = 0 \quad j = 1, \dots, N - 1 \quad (273)$$

Al incorporar la condición de frontera mediante las discretizaciones anteriores, el sistema resulta en

$$\left(\sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^{N-1} \mathbf{D}_{i,k}^3 - \frac{\mathbf{D}_{i,j}^3}{\mathbf{D}_{1,j}} \mathbf{D}_{1,i} \right) y_j = xy_j + (x^3 - 2x^2 - 5x - 3)e^x \quad i, j = 2, \dots, N - 1 \quad (274)$$

Como se trata de un sistema lineal se puede resolver mediante herramientas computacionales de forma directa.

Capítulo 6. Problema de eigenvalores y eigenfunciones

Los conceptos de eigenvectores y eigenvalores llegan a ser fundamentales en el análisis de matrices y operadores lineales en general. En este capítulo se presenta una explicación detallada de estos conceptos esenciales para el problema de eigenvalores. Primero, se aborda la definición e interpretación algebraica y geométrica del problema de eigenvalores, con un enfoque específico en su aplicación en ecuaciones diferenciales. Luego, se amplía el análisis hacia el problema espectral solucionando de forma analítica y numérica el problema de eigenvalores para una ecuación de tercer orden. Posteriormente, se estudian los resultados y algunas afirmaciones mencionadas en Mulholland (1995). Para concluir se muestran los resultados obtenidos al solucionar el problema utilizando los distintos métodos estudiados a lo largo de este trabajo.

6.1. Eigenvalores y eigenfunciones

Consideremos un espacio vectorial \mathbf{V} que actúa sobre un campo \mathbb{K} , y la aplicación lineal $L : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$, entonces decimos que el número λ es un eigenvalor (o valor propio) de L si existe un vector no nulo $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$, tal que

$$L[\mathbf{v}] = \lambda \mathbf{v}. \quad (275)$$

Al vector \mathbf{v} se le conoce como el eigenvector (vector propio) de L correspondiente al eigenvalor λ .

La definición anterior, a la cual comunmente se le conoce como el problema de eigenvalores de la transformación L , sobre \mathbf{V} , es bastante general, en el sentido de que puede aplicarse a muchos conjuntos vistos como espacios vectoriales y a diferentes aplicaciones o transformaciones lineales que mandan vectores de un espacio vectorial sobre si mismos. Sin embargo, el concepto se puede generalizar aún mas considerando operadores lineales $L : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{W}$, en donde \mathbf{W} es otro espacio vectorial que actúa sobre el mismo campo que \mathbf{V} . En algunas aplicaciones se pueden llegar a considerar problemas de eigenvalores con operadores no lineales.

Por otra parte, las transformaciones lineales que se presentan en muchas aplicaciones, son sobre \mathbb{R}^n , es decir, aplicaciones asociadas con matrices. En este caso, el problema de eigenvalores dado por la relación 275 toma la siguiente forma,

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}, \quad (276)$$

en donde \mathbf{A} es una matriz cuadrada de $n \times n$ y $\mathbf{v} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ es un vector en \mathbb{R}^n . La expresión

276, se puede poner de la siguiente manera:

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{v} = 0. \quad (277)$$

en donde \mathbf{I} es la matriz identidad de orden n . De esta manera, existirán soluciones no triviales de 277 si la matriz $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$, es singular, es decir si

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0, \quad (278)$$

lo que lleva a resolver un polinomio de grado n para λ , conocido como polinomio característico.

Geoméricamente, la expresión 276 significa que al tomar un vector $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ y aplicarle la transformación dada por la matriz \mathbf{A} , el vector resultante será proporcional a \mathbf{v} .

Como ejemplo, consideremos la matriz de permutación en \mathbb{R}^2

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (279)$$

Al multiplicar la matriz \mathbf{A} por un vector $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ en \mathbb{R}^2 el resultado será un vector \mathbf{w} con las componentes v_1 y v_2 permutadas, es decir $\mathbf{w} = (v_2, v_1)$

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{w} = \begin{bmatrix} v_2 \\ v_1 \end{bmatrix} \quad (280)$$

Recordemos que buscamos un vector no nulo tal que

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad (281)$$

Sustituyendo \mathbf{A} en 281 y desarrollando, se tiene que

$$\begin{bmatrix} v_2 \\ v_1 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \quad (282)$$

De lo anterior, se tiene que

$$\lambda = \frac{v_1}{v_2} = \frac{v_2}{v_1} \quad (283)$$

Lo cual implica que

$$v_1^2 = v_2^2 \quad (284)$$

Luego, la ecuación 284 se satisface cuando $v_1 = v_2$ o $v_1 = -v_2$.

De esto, los vectores de la forma (x, x) y $(x, -x)$ son vectores propios correspondientes a los valores $\lambda = 1$ y $\lambda = -1$.

Resulta interesante, cuando a pesar de tratarse de matrices reales, los valores propios asociados pueden ser complejos. Un ejemplo sencillo de esto es el de la matriz de rotación de 90° en el plano

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (285)$$

Nuevamente, para obtener los valores propios λ de \mathbf{R} se requiere que el determinante de $(\mathbf{R} - \lambda\mathbf{I})$ sea cero.

En este caso, el polinomio característico está dado por

$$\det(\mathbf{R} - \lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} 0 - \lambda & 1 \\ -1 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -1 & -\lambda \end{vmatrix} = (-\lambda)^2 - (1)(-1) = \lambda^2 + 1 = 0 \quad (286)$$

De esto, los valores propios de \mathbf{R} son

$$\lambda = \pm\sqrt{-1} = \pm i \quad (287)$$

con eigenvectores correspondientes $(i, 1)$ y $(-i, 1)$

6.2. Eigenvalores y eigenfunciones en ecuaciones diferenciales

Como se mostró en el capítulo 2, la estructura general de una ecuación diferencial definida por un operador lineal tiene la forma

$$L[y(x)] = y^{(n)}(x) + a_{n-1}y^{(n-1)}(x) + \dots + a_1y'(x) + a_0y(x) \quad (288)$$

Para el problema de eigenvalores en ecuaciones diferenciales es importante considerar las condiciones de frontera adicionales al problema; los valores y las funciones propias quedarán definidas por dichas condi-

ciones. Consideremos el problema de eigenvalores para una ecuación de segundo orden con condiciones de frontera

$$y'' + \lambda y = 0 \quad (289)$$

$$y(0) = 0, \quad y'(\pi) = 0 \quad (290)$$

De la ecuación 289, para el caso en que $\lambda = 0$ se tiene la sencilla ecuación

$$y'' = 0 \quad (291)$$

Al integrar dos veces la ecuación 291, se obtiene y' y la solución general

$$y'(x) = a \quad y(x) = ax + b \quad (292)$$

Aplicando las condiciones de frontera 290 se tiene que

$$y(0) = b = 0, \quad y'(\pi) = a\pi = 0 \quad (293)$$

Por tanto $a = 0$ y la función propia para el valor $\lambda = 0$ es la función nula $y = 0$ que no puede ser solución para el problema de eigenvalores y por lo tanto el caso en que $\lambda = 0$ es inválido.

Supongamos que la solución a 289 es de la forma $y = e^{rx}$

Para el caso en que $\lambda < 0$.

Sustituyendo y y y'' en la ecuación 289

$$e^{rx}(r^2 + \lambda) = 0 \quad (294)$$

Luego, para satisfacer 294 es necesario que

$$e^{rx} = 0, \quad \text{o} \quad (r^2 + \lambda) = 0 \quad (295)$$

Por propiedades de la función exponencial, e^{rx} no puede ser cero, así que puede dividirse de la ecuación y entonces se obtiene la ecuación característica $r^2 + \lambda = 0$ con raíces $r = \pm\sqrt{-\lambda}$.

Por la suposición $\lambda < 0$, se sabe que $\sqrt{-\lambda}$ es real.

Por comodidad, sea

$$\omega = \sqrt{-\lambda} \quad (296)$$

Recordemos que la solución general de una ecuación lineal homogénea estará dada por la combinación lineal de las soluciones particulares (Burden & Faires, 2011). La solución general de la ecuación es

$$y = Ae^{\omega x} + Be^{-\omega x} \quad (297)$$

Y la derivada de y está dada por

$$y' = A\omega e^{\omega x} - B\omega e^{-\omega x} \quad (298)$$

Aplicando una de las condiciones de frontera 290 a la ecuación general 297 se tiene que

$$y(0) = \omega(Ae^0 + Be^0) = (\omega)(A + B) = 0, \quad (299)$$

De lo anterior, se deduce que $B = -A$ ya que $\omega \neq 0$

Sustituyendo B en 298 y aplicando la condición de frontera se establece que

$$y'(\pi) = A\omega e^{\omega\pi} + A\omega e^{-\omega\pi} = A\omega(e^{\omega\pi} + e^{-\omega\pi}) = 0 \quad (300)$$

Observemos que para que producto de la ecuación 300 se cumpla, al menos uno de los factores debe ser igual a cero.

- Sabemos que $\omega = \sqrt{-\lambda} \neq 0$ pues de lo contrario, implicaría que $\lambda = 0$ y esto contradice la suposición inicial $\lambda < 0$.
- El factor $(e^{\omega\pi} + e^{-\omega\pi})$ no puede ser 0 ya que es la suma de dos términos que son positivos puesto que ω es real.
- Sí $A = 0$, entonces se tiene nuevamente la solución trivial $y = 0$, la cual no puede ser función propia, por tanto $A \neq 0$.
- Por tanto la suposición, $\lambda < 0$, no es válida para esta ecuación.

Para el caso final, supongamos que $\lambda > 0$.

La ecuación característica y las raíces de 289

$$r^2 + \lambda = 0, \quad r = \pm\sqrt{-\lambda} \quad (301)$$

En este caso, $\sqrt{-\lambda}$ no es real, por lo tanto las raíces son complejas

$$r = \pm\sqrt{\lambda}i \quad (302)$$

Si una vez más, definimos

$$\omega = \sqrt{\lambda} \quad (303)$$

y se obtiene la solución general de la ecuación dada por

$$y = Ae^{i\omega x} + Be^{-i\omega x} \quad (304)$$

utilizando la identidad de Euler

$$e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x) \quad (305)$$

en la ecuación general 304 se tiene que la solución general para raíces reales es

$$y = C_1 \cos(\omega x) + C_2 \sin(\omega x) \quad (306)$$

Aplicando la condición de frontera $y(0) = 0$ en la ecuación 306 se tiene que

$$y = C_1 \cos(0) + C_2 \sin(0) = C_1 = 0 \quad (307)$$

Luego,

$$y = C_2 \sin(\omega x) \quad (308)$$

Como ya se tiene la forma de la función y en 308 se obtiene su derivada

$$y' = C_2 \omega \cos(\omega x) \quad (309)$$

y se aplica la condición de frontera $y'(\pi) = 0$

$$y' = C_2 \omega \cos(\omega \pi) = 0 \quad (310)$$

De nueva cuenta, el producto de 310 es 0 y por lo tanto:

- Sí $\omega = 0$, implicaría que $\lambda = 0$ lo cual es una contradicción a la suposición inicial $\lambda > 0$, por tanto $\omega \neq 0$.
- Sí $C_2 = 0$, entonces se tiene nuevamente la solución trivial $y = 0$, la cual no puede ser función propia, por tanto $C_2 \neq 0$.
- Por tanto la única solución no trivial se da cuando $\cos(\omega\pi) = 0$.

Recordemos que

$$\cos(x) = 0 \iff x = \frac{(2n+1)\pi}{2}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (311)$$

de esto, para que el argumento $\omega\pi$ tenga la estructura de 311, se requiere que

$$\omega = \frac{(2n+1)}{2}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (312)$$

Finalmente, los valores propios estarán definidos por

$$\lambda_n = \omega_n^2 = \frac{(2n+1)^2}{4}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (313)$$

y las funciones propias asociadas a los valores λ_n serán

$$y_n = C_n \sin(\omega_n x) = C_n \sin(\sqrt{\lambda_n} x) = C_n \sin\left(\frac{2n+1}{2} x\right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (314)$$

6.3. Problema espectral para ecuaciones de tercer orden

Consideremos ahora el problema de eigenvalores y eigenfunciones de tercer orden

$$u'''(x) = \lambda u(x), \quad x \in [-1, 1] \quad (315)$$

con condiciones de frontera

$$u(-1) = 0 \quad u'(-1) = 0 \quad u(1) = 0 \quad (316)$$

El espectro de la ecuación 315 es estudiado en distintos trabajos como Huang & Sloan (1992), Merryfield & Shizgal (1993) y Mulholland (1995). En el último artículo, los autores afirman que todos los

eigenvalores λ del problema 315 son reales negativos y para reforzar dicha aseveración, hacen uso de la norma L^2 para funciones definidas en la recta real. El problema con esto, es que a diferencia de los problemas de segundo orden, donde la teoría está bien establecida, el uso de esta norma para problemas de tercer orden que no sean de tipo Sturm-Liouville o autoadjuntos no garantiza que los valores sean reales negativos y a la única conclusión que se puede llegar es que la parte real de los valores propios es, en efecto, negativa. De la parte imaginaria, formalmente, no se puede afirmar nada. El desarrollo de lo anterior mencionado, se muestra a continuación:

Partiendo de la ecuación 315 y utilizando el producto escalar usual entre funciones de $u'''(x)$ con una función cualquiera $v(x)$ del mismo espacio.

$$\langle u'''(x), v(x) \rangle = \langle u''', v \rangle = \int_{-1}^1 u''' \bar{v} dx \quad x \in [-1, 1] \quad (317)$$

Luego, al integrar por partes la ecuación 317 se obtiene la expresión

$$\langle u''', v \rangle = \int_{-1}^1 u''' \bar{v} dx = u'' \bar{v} \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 u'' \bar{v}' dx \quad (318)$$

Aplicando una segunda y tercera integración por partes, tenemos las ecuaciones

$$\langle u''', v \rangle = u'' \bar{v} \Big|_{-1}^1 - u' \bar{v}' \Big|_{-1}^1 + \int_{-1}^1 u' \bar{v}'' dx \quad (319)$$

$$\langle u''', v \rangle = u'' \bar{v} \Big|_{-1}^1 - u' \bar{v}' \Big|_{-1}^1 + u \bar{v}'' \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 u \bar{v}''' dx \quad (320)$$

Desarrollando la ecuación 320, resulta la expresión

$$u''(1)\bar{v}(1) - u''(-1)\bar{v}(-1) - u'(1)\bar{v}'(1) + u'(-1)\bar{v}'(-1) + u(1)\bar{v}''(1) - u(-1)\bar{v}''(-1) - \int_{-1}^1 u \bar{v}''' dx \quad (321)$$

Aplicando las condiciones de frontera de 316 a la ecuación 321, se obtienen los siguientes términos en el lado derecho de la igualdad.

$$\langle u''', v \rangle = u''(1)\bar{v}(1) - u''(-1)\bar{v}(-1) - u'(1)\bar{v}'(1) - \int_{-1}^1 u \bar{v}''' dx \quad (322)$$

Notemos que el término integral que compone la ecuación 322 es el producto interno $\langle u, v''' \rangle$, luego

$$\langle u''', v \rangle = u''(1)\bar{v}(1) - u''(-1)\bar{v}(-1) - u'(1)\bar{v}'(1) - \langle u, v''' \rangle \quad (323)$$

Por definición, si $u(x)$ es eigenfunción del problema dado, con eigenvalor λ , entonces se cumple que $u''' = \lambda u$. Por lo tanto

$$\langle u''', v \rangle = \langle \lambda u, v \rangle \quad (324)$$

por la propiedad homogénea del producto interno con respecto al primer argumento, se cumple que

$$\langle u''', v \rangle = \langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle \quad (325)$$

Utilizando la identidad 325 en la ecuación 321 y sustituyendo v por u se tiene la expresión

$$\langle u''', v \rangle = \langle u''', u \rangle = \lambda \langle u, u \rangle = u''(1)\bar{u}(1) - u''(-1)\bar{u}(-1) - u'(1)\bar{u}'(1) - \langle u, u''' \rangle \quad (326)$$

Por la suposición de que u es eigenfunción del valor λ , también se tiene que $\bar{u}''' = \bar{\lambda}\bar{u}$.

Sustituyendo lo anterior en la ecuación 326 y aplicando nuevamente las condiciones de frontera

$$\langle u''', u \rangle = \lambda \langle u, u \rangle = -u'(1)\bar{u}'(1) - \langle u, \lambda u \rangle \quad (327)$$

Por propiedades de norma entre funciones complejas, se tiene que $u(x)\bar{u}(x) = |u(x)|^2$.

Además, en el caso del segundo argumento, se tiene que $\langle u, \lambda u \rangle = \bar{\lambda} \langle u, u \rangle$. De esto, la ecuación 327 queda definida como

$$\langle u''', u \rangle = \lambda \langle u, u \rangle = -|u'(1)|^2 - \bar{\lambda} \langle u, u \rangle \quad (328)$$

Aplicando propiedad distributiva en 328

$$(\lambda + \bar{\lambda}) \langle u, u \rangle = -|u'(1)|^2 \quad (329)$$

Por propiedades de producto interno, se tiene que $\langle u, u \rangle = \|u\|^2$. Además, por definición de complejo conjugado, la suma $\lambda + \bar{\lambda}$ da como resultado 2 veces la parte real de λ , luego

$$2 \operatorname{Re}(\lambda) \|u\|^2 = -|u'(1)|^2 \quad (330)$$

Como la norma es definida positiva por definición y $|u'(1)|^2, \|u\|^2$ deben ser distintas de cero para

garantizar la solución no trivial, Al despejar la parte real de λ de la ecuación 330

$$\operatorname{Re}(\lambda) = -\frac{|u'(1)|^2}{2||u||^2} \quad (331)$$

Se concluye que la parte real de los valores propios es negativa pero no se puede garantizar que sean puramente reales negativos.

De lo anterior surgen preguntas sobre la estructura general de los valores propios al igual que las eigenfunciones $u(x)$. De la parte imaginaria de λ no se puede garantizar nada bajo esta configuración.

6.3.1. Solución analítica

Para encontrar los valores propios del problema 315 de forma analítica, partiremos de la ecuación característica, luego verificamos el caso para cuando los eigenvalores son puramente reales y las 3 soluciones linealmente independientes serán de la forma e^{ax} , e^{bx} , e^{cx} donde, a, b, c son las raíces de la ecuación característica

$$r^3 + \lambda = 0, \quad r = \pm\sqrt[3]{-\lambda} \quad (332)$$

Es sabido que las ecuaciones de tercer grado tienen tres raíces reales o una raíz real y dos complejas que son conjugadas entre sí. De esto, junto con la conclusión obtenida en 331 λ puede ser, hasta ahora, real negativa o compleja con parte real negativa.

Luego, tomando la forma polar de λ y reescribiendo la ecuación con la identidad de Euler 332 se tiene que

$$r^3 = -\lambda = -\alpha e^{i\theta} \quad (333)$$

donde $\alpha = |\lambda| > 0$ y $\theta = \operatorname{arg}(\lambda)$

Consideremos el caso real, $\theta = 0$ y la solución general, que es combinación lineal de las 3 soluciones particulares, está dada por

$$u(x) = Ae^{ax} + Be^{bx} + Ce^{cx} \quad (334)$$

donde

$$a = -\alpha^{1/3} e^{i\theta/3} = -\alpha^{1/3} \quad (335)$$

$$b = -\alpha^{1/3} e^{i(\theta+2\pi)/3} = -\alpha^{1/3} e^{i2\pi/3} = -\frac{\alpha}{2}(1 - i\sqrt{3}) \quad (336)$$

$$c = -\alpha^{1/3} e^{i(\theta+4\pi)/3} = -\alpha^{1/3} e^{i4\pi/3} = -\frac{\alpha}{2}(1 + i\sqrt{3}) \quad (337)$$

Aplicando las condiciones de frontera $u(\pm 1) = 0$ en la solución general 334 y derivando para utilizar la condición $u'(-1) = 0$, se tiene el sistema

$$Ae^{-a} + Be^{-b} + Ce^{-c} = 0 \quad (338)$$

$$Aae^{-a} + Bbe^{-b} + Cce^{-c} = 0 \quad (339)$$

$$Ae^a + Be^b + Ce^c = 0 \quad (340)$$

Si ahora multiplicamos la ecuación 338 por ae^a , y la ecuación 339 por e^a se tienen las expresiones

$$Ae^{-a}ae^a + Be^{-b}ae^a + Ce^{-c}ae^a = 0 \quad (341)$$

$$Aae^{-a}e^a + Bbe^{-b}e^a + Cce^{-c}e^a = 0 \quad (342)$$

Luego, al restar las ecuaciones anteriores entre sí, se elimina el término que involucra la constante A de la primera ecuación

$$Ae^{-a}ae^a + Be^{a-b}a + Ce^{a-c}a - Aae^{-a}e^a - Bbe^{a-b} - Cce^{a-c} = 0 \quad (343)$$

$$Be^{a-b}(a - b) + Ce^{a-c}(a - c) = 0 \quad (344)$$

De la ecuación resultante 344, si se factoriza e^a , como el producto es cero y el valor e^a no lo puede ser, se reduce la ecuación

$$(e^a)(Be^{-b}(a - b) + Ce^{-c}(a - c)) = 0 = Be^{-b}(a - b) + Ce^{-c}(a - c) \quad (345)$$

de manera análoga, podemos eliminar para la segunda y tercera ecuación

$$B(e^{a-b} - e^{-a+b}) + C(e^{a-c} - e^{-a+c}) = 0 \quad (346)$$

Finalmente, la existencia de eigenfunciones estará determinada por el sistema reducido de ecuaciones obtenido de 345 y 346 equivalente a resolver para A, B y C del sistema inicial 338 a 340.

El determinante de la matriz del sistema está dado por

$$D = \det \begin{bmatrix} (a-b)e^{-b} & (a-c)e^{-c} \\ e^{a-b} - e^{-a+b} & e^{a-c} - e^{-a+c} \end{bmatrix} \quad (347)$$

y buscamos la solución cuando el determinante se anule.

De manera desarrollada,

$$D = (a-b)e^{-b}(e^{a-c} - e^{-a+c}) - (a-c)e^{-c}(e^{a-b} - e^{-a+b}) \quad (348)$$

Aplicando distribución en 348

$$D = (a-b)(e^{a-b-c} - e^{-a-b+c}) - (a-c)(e^{a-b-c} - e^{-a+b-c}) \quad (349)$$

finalmente,

$$D = (c-b)e^{a-b-c} + (a-b)e^{-a+b-c} - (a-b)e^{-a-b+c} \quad (350)$$

Sustituyendo 335, 336, 337 en la ecuación 350 se obtienen el siguiente conjunto de identidades

$$a-b = a + \frac{a}{2}(1 - \sqrt{3}i) = \frac{a}{2}(3 - \sqrt{3}i) = -\sqrt{3}b = \sqrt{3}ae^{-i\pi/6} \quad (351)$$

$$a-c = a + \frac{a}{2}(1 + \sqrt{3}i) = \frac{a}{2}(3 + \sqrt{3}i) = -\sqrt{3}c = \sqrt{3}ae^{i\pi/6} \quad (352)$$

$$c-b = -\frac{a}{2}(1 + \sqrt{3}i) + \frac{a}{2}(1 - \sqrt{3}i) = -\sqrt{3}ai \quad (353)$$

$$a-b-c = \frac{a}{2}(3 - \sqrt{3}i) + \frac{a}{2}(1 + \sqrt{3}i) = 2a \quad (354)$$

$$b-a-c = -\frac{a}{2}(3 - \sqrt{3}i) + \frac{a}{2}(1 + \sqrt{3}i) = -a(1 - \sqrt{3}i) = 2b \quad (355)$$

$$c-a-b = -\frac{a}{2}(3 - \sqrt{3}i) - \frac{a}{2}(1 - \sqrt{3}i) = -a(1 + \sqrt{3}i) = 2c \quad (356)$$

Con las identidades anteriores, el cálculo del determinante 347 queda explícitamente

$$D = -\sqrt{3}aie^{2a} + \sqrt{3}ae^{i\pi/6}e^{-a(1-\sqrt{3}i)} - \sqrt{3}ae^{i\pi/6}e^{-a(1+\sqrt{3}i)} \quad (357)$$

Recordando que buscamos que $D = 0$, factorizando $-\sqrt{3}a$ de 357 se puede eliminar de la ecuación ya que no puede ser cero.

Luego,

$$D = -\sqrt{3}a(ie^{2a} - e^{i\pi/6}e^{-a(1-\sqrt{3}i)} + e^{i\pi/6}e^{-a(1+\sqrt{3}i)}) = 0 \quad (358)$$

sí y solo sí

$$(ie^{2a} - e^{i\pi/6}e^{-a(1-\sqrt{3}i)} + e^{i\pi/6}e^{-a(1+\sqrt{3}i)}) = 0 \quad (359)$$

Multiplicando 359 por e^a , la ecuación se reduce a

$$e^a(ie^{2a} - e^{i\pi/6}e^{-a(1-\sqrt{3}i)} + e^{i\pi/6}e^{-a(1+\sqrt{3}i)}) = ie^{3a} - e^{i\pi/6}e^{\sqrt{3}ia} + e^{-i\pi/6}e^{-i\sqrt{3}a} = 0 \quad (360)$$

Notemos que, en la ecuación 360 se tiene la resta de dos complejos conjugados en la forma de Euler, utilizando el hecho que para un número complejo z , se cumple que $z - \bar{z} = 2i \operatorname{Im}(z)$, se obtiene la ecuación

$$ie^{3a} - i2 \operatorname{Im}(e^{i(\sqrt{3}a+\pi/6)}) = 0 \quad (361)$$

simplificamos i de la ecuación anterior se concluye que los eigenvalores se pueden obtener de la identidad

$$e^{3a} - 2 \operatorname{Im}(e^{i(\sqrt{3}a+\pi/6)}) = e^{3a} - 2 \sin(\sqrt{3}a + \pi/6) = 0 \quad (362)$$

Recordando que estamos ante el caso real y $a = -\alpha^{1/3} = -\lambda^{1/3}$, el factor e^{3a} de 362 es real. Finalmente, utilizando la identidad de Euler y sustituyendo a en función de λ , la ecuación resultante para encontrar los valores reales λ es

$$e^{-3\lambda^{1/3}} - 2 \sin(-\sqrt{3}\lambda^{1/3} + \pi/6) = 0 \quad (363)$$

la cual es equivalente a la solución analítica que se muestra en Huang & Sloan (1992).

El conjunto de valores λ_k reales que satisfacen la ecuación 363 son aquellos de la forma

$$\lambda_k = -(k + \frac{1}{6}) \frac{\pi}{\sqrt{3}} \quad (364)$$

con eigenfunciones correspondientes

$$u_k(x) = Ae^{\lambda_k x} + Be^{-\lambda_k x/2} \cos\left(\frac{\sqrt{3}\lambda_k x}{2}\right) + Ce^{-\lambda_k x/2} \sin\left(\frac{\sqrt{3}\lambda_k x}{2}\right), \quad (365)$$

Es importante notar que si bien es cierto que todos los valores λ tienen parte real negativa, no se puede aclarar en ningún momento que son puramente reales. De hecho, en Huang & Sloan (1992) los autores mencionan que el problema 310 tiene eigenvalores reales que pueden ser encontrados por la ecuación

que plantean pero en ningún momento implican que son los únicos eigenvalores que existan a diferencia de lo que se asevera en Mulholland (1995). De la ecuación 363 se observa que el término exponencial tiene un peso considerable en el rápido crecimiento de los eigenvalores.

6.3.2. Aproximación mediante métodos espectrales

Es ampliamente conocido que al resolver el problema análogo a 315 de segundo orden mediante métodos espectrales, la cantidad de eigenvalores λ no espurios encontrados converge a aproximadamente $N/2$ (Weideman & Trefethen, 1988). Por otra parte, del problema 315 no se puede dictaminar mucho y sin embargo en Mulholland (1995) se los autores aseguran que se obtienen $N/3$ valores propios para este problema. La inquietud con esta afirmación es que los autores solo muestran resultados hasta cierto valor de N por lo que esa cota se preserva bajo cierta construcción. Sin embargo, para valores de N superiores a 64, la cantidad de valores propios encontrados comienza a ser oscilante y llega un momento en que ya no se encuentran nuevos valores. Otra afirmación de especial interés que se presenta en el mismo artículo es la premisa que al ingresar en la matriz de diferenciación \mathbf{D}^3 la condición de frontera 316, que involucra la primera derivada, la elección del renglón en el cual se ingresa la condición de frontera es crítica al momento de mejorar la convergencia de los valores propios obtenidos. Esto en la práctica es sutil y depende completamente del problema con una mejora de un solo valor propio encontrado aún forzando la cota deseada para $N = 64$ por lo tanto se presume que, a diferencia de como ocurre para el caso de segundo orden, los resultados ante el problema de tercer orden no son contundentes para una malla de nodos de tamaño arbitrario.

Para aproximar la solución del problema 315 utilizando matrices de diferenciación de Chebyshev, construimos la matriz \mathbf{D} utilizando las identidades 232 a 235 estudiadas en el capítulo 5. Luego, por tratarse de un problema de tercer orden, se obtiene la matriz \mathbf{D}^3 simplemente elevando al cubo la matriz \mathbf{D} . Existen distintas maneras de obtener \mathbf{D}^3 cuyo coste computacional es más eficiente pero para propósito de este análisis, el tiempo de operación no es un inconveniente siempre y cuando los elementos de \mathbf{D}^3 tengan el menor error de redondeo posible en cuanto a la matriz en su versión analítica.

Luego, sustituyendo \mathbf{D}^3 en 315 resulta en el sistema discreto de ecuaciones

$$\sum_{j=1}^N = \mathbf{D}_{ij}^3 u_j = \lambda u_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (366)$$

Puesto que las condiciones de frontera son homogéneas, basta con remover el primer y último renglón de la matriz \mathbf{D}^3 . Aplicar la condición que involucra la derivada es la de especial interés. En Mulholland (1995) se afirma que se obtienen mejores resultados, tanto en exactitud de los eigenvalores como en cantidad de valores reales encontrados, al sustituir el penúltimo renglón de la matriz \mathbf{D}^3 . Mostraremos que esta elección es irrelevante para mallas de tamaño superior.

De la ecuación 247 de la forma discreta de la n -ésima derivada vista en el capítulo 5, la condición de frontera 316 en su forma discreta está dada por la expresión

$$u'(-1) = \sum_{j=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,j} u(x_j) = 0 \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (367)$$

De la ecuación 367 se tiene que

$$u_j = -\frac{1}{\mathbf{D}_{1,j}} \sum_{k=1}^{N-1} \mathbf{D}_{1,k} u_k \quad k \neq j \quad (368)$$

Luego, al incorporar la condición de frontera mediante las discretizaciones 367 y 368, el sistema resulta en

$$\left(\sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^{N-1} \mathbf{D}_{i,k}^3 - \frac{\mathbf{D}_{i,j}^3}{\mathbf{D}_{1,j}} \mathbf{D}_{1,i} \right) u_j = \lambda u_i \quad i, j = 2, \dots, N-1 \quad (369)$$

Este sistema se puede resolver mediante herramientas computacionales de forma directa.

En Huang & Sloan (1992) se muestra un procedimiento alternativo para calcular, de manera directa, la matriz de diferenciación \mathbf{D}^3 con las condiciones de frontera del problema 315 ya incorporadas. Esta metodología alterna fue utilizada en De la Garza & Mariscal (2008) y los resultados obtenidos por los autores reflejaron mínima diferencia en el comportamiento de los eigenvalores obtenidos tanto en convergencia como en cantidad de valores encontrados para ambas formas de generar la matriz. Con lo cual, la opción de elevar al cubo la matriz de diferenciación es adecuada para el problema que se desea resolver.

Según Mulholland (1995), la elección del renglón en el cual se ingresan las condiciones de frontera en la matriz \mathbf{D}^3 para generar el sistema 369 es crítica para mejorar el espectro obtenido de la matriz. Los autores incluso concluyen que el uso del penúltimo renglón arroja los resultados más satisfactorios tras verificar para todos los renglones de la matriz \mathbf{D}^3 .

Esto es, de cierta forma contrario a lo intuitivo pues debido a la paridad de la función coseno utilizada

al calcular los nodos de Chebyshev definida en 171, aunada a las propiedades de eigenvalores, si una matriz A es escalada, los eigenvalores de la matriz también lo son, por tanto, el intercambio de renglones entre dos matrices de signo opuesto, no debería afectar el espectro de estas mas allá del signo de los eigenvalores. Concretamente, sí

$$x_j = \cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (370)$$

y

$$\hat{x}_j = -\cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (371)$$

se cumple que los vectores x_j, \hat{x}_j , las matrices de Chebyshev asociadas a cada uno de los vectores, \mathbf{D} y $\hat{\mathbf{D}}$ así como las terceras potencias de estas, son todos objetos antisimétricos entre sus homólogos. Es decir,

$$x_j = -\hat{x}_j \quad (372)$$

$$\mathbf{D} = -\hat{\mathbf{D}} \quad (373)$$

$$\mathbf{D}^3 = -\hat{\mathbf{D}}^3 \quad (374)$$

y por propiedades de eigenvalores, los valores λ obtenidos de la matriz \mathbf{D}^3 serán los negativos de los valores $\hat{\lambda}$ obtenidos de la matriz $\hat{\mathbf{D}}^3$. Por simetría, el uso del segundo o penúltimo renglón no tienen ningún aporte favorable al espectro. Sin embargo, en Mulholland (1995) se especifica que el penúltimo renglón logra obtener un mínimo de $N/3$ valores propios reales encontrados. Es importante verificar la validez de este argumento; los autores utilizan una cota específica de N que, de manera conveniente, valida esta aseveración. Al realizar esta misma tarea para tamaños de malla superior, dicha cota deja de satisfacerse y por lo tanto, no puede ser generalizada. En la tabla 15 se muestran los resultados obtenidos para mallas de diferentes tamaños.

En cada malla se utilizaron n nodos para generar la correspondiente matriz de diferenciación de Chebyshev, luego elevar al cubo la matriz para finalmente obtener los valores propios de la matriz resultante una vez ingresando las condiciones de frontera. Para esto, se utilizó la función *eig* de MATLAB, la cuál, sirve para encontrar los valores propios, tanto reales como complejos, de una matriz cuadrada.

En la tabla 15 se puede apreciar que para mallas de nodos inferiores la cota propuesta en el trabajo de Mulholland (1995) se satisface con hasta $n/2$ valores encontrados. El problema es que los autores dan por cierta esta aseveración dejando el estudio hasta 64 nodos. Para mallas más grandes la cota deja de satisfacerse y la cantidad de valores propios encontrados se estanca.

Tabla 15. Máxima cantidad de valores propios reales encontrados para \mathbf{D}^3 . *: Incluyendo valores con parte imaginaria tan pequeña que se catalogaron como real para $|\text{Im}| < 10^{-8}$

Nodos	Valores encontrados	Proporción	Condición
8	4*	$n/2$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
16	11	$11n/16$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
32	17	$17n/32$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
64	30-32*	$n/2$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
70	35*	$n/2$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
80	35*	$n/2$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
90	37*	$37n/90$	$> \frac{n}{3} \checkmark$
100	35*	$7n/20$	$\approx \frac{n}{3} \checkmark$
110	37*	$37n/110$	$\approx \frac{n}{3} \checkmark$
128	35*	$35n/128$	$< \frac{n}{3} \times$
256	34*	$17n/128$	$< \frac{n}{3} \times$
512	37*	$37n/512$	$< \frac{n}{3} \times$

La manera correcta de hacer un análisis de una aproximación numérica del espectro de una matriz es mediante la cantidad de valores obtenidos en función del tamaño de la matriz o nodos, verificar cuáles de esos valores obtenidos son espurios y cuáles convergen a una de las soluciones del problema 315, es decir, que coinciden con algún valor analítico dado por la expresión obtenida en 363. También es importante verificar a partir de que tamaño de malla o para que valor de n , se dejan de obtener nuevos valores.

También se realizó el análisis de los valores propios obtenidos variando el renglón de la implementación de la condición de frontera $u'(-1) = 0$ en el sistema, de manera que la condición estuviera al inicio, al centro o al final de la matriz \mathbf{D}^3 . En los resultados no se observó cambio considerable y de igual forma, la cota $N/3$ no se logró satisfacer para mallas de tamaño superior aún cuando aquellos eigenvalores complejos obtenidos cuyo valor absoluto en la parte imaginaria era menor a 10^{-8} fueron considerados reales. En la tabla 16 se muestra la cantidad de valores propios no espurios obtenidos ante la elección de distintos renglones de \mathbf{D}^3 .

Tabla 16. Valores reales propios no espurios obtenidos al incorporar la condición $u'(-1) = 0$ en el renglón j -ésimo de \mathbf{D}^3 .

Nodos (n)	λ obtenidos para		
	$j = 2$	$j = n/2$	$j = N - 1$
8	4	4	4
16	11	10	11
32	17	13	15
64	32	30	31
128	35	34	35
256	34	32	35
512	37	33	35

De la tabla 16 se puede observar que la cantidad de valores obtenidos es prácticamente la misma entre

distintos renglones, es verdad que puede haber un ligero aumento si la condición se agrega a los extremos de la matriz en comparación con el centro, esto se debe a la naturaleza del problema, el error acarreado será menor por cuestión computacional más no analítica. Como observación, en el artículo de Mulholland (1995) se menciona que los mejores resultados se dan en $N - 1$ y en la tabla 16 se aprecia una leve mejora de hasta 2 valores propios para ciertos casos en la columna de $j = 2$ esto se debe a que los autores utilizan la implementación de los nodos de Chebyshev con el signo de menos, tal cuál en se muestra en la expresión 371 para \hat{x}_j , es decir, el vector resultante está formado por nodos de -1 a 1 mientras que a lo largo de este trabajo se ha utilizado la forma usual 370 donde los nodos se representan de 1 a -1 pero por cuestiones de simetría, el resultado es equivalente. En la tabla 16, se preserva el comportamiento de los eigenvalores que se pudo apreciar en la tabla 15; la cantidad de valores propios continúa estancándose a partir de cierto tamaño de malla para cualquiera de los 3 casos: extremo izquierdo, extremo derecho y central. Por lo tanto, retomando la premisa de que el uso del renglón $N - 1$ es crítico, puede resultar algo ciertamente exagerado y en el mejor de los casos, la aseveración solamente funciona para encontrar un valor adicional cuando mucho o dos si se es menos exigente y se reduce la cota para valores reales a 10^{-5} . En conclusión, se requiere de mucho criterio y ajuste para que esta afirmación sea válida o consistente.

Se concluye que mediante metodología espectral es posible encontrar valores de forma correcta, pero esta cantidad se ve reflejada en factores que no parecen ser los presentados por los autores. No se observó un resultado verdaderamente crítico en la implementación de las condiciones de frontera ni tampoco se preserva una cota para mallas de orden superior.

Se propone la teoría de que para la época en que fueron publicados los distintos artículos mencionados en este capítulo, realizar estudios numéricos para mallas de tamaño superior era computacionalmente imposible o poco práctico aún tratándose de una implementación que no es tan costosa como los otros métodos presentados a lo largo de esta tesis. De hecho, si este mismo problema se resuelve mediante el método de diferencias finitas o splines, debido a la naturaleza del coste computacional se esperaría que la cantidad de valores encontrados, tanto en la época de los 90's como en la actualidad, fuese mucho menor a la obtenida con metodología espectral.

En el resto de este capítulo, se muestran los resultados de resolver el problema 315 mediante el uso de los distintos métodos utilizados a lo largo de este escrito con el objetivo de comparar los resultados de cada método: convergencia, valores propios encontrados y estancamientos.

6.3.3. Solución mediante Diferencias Finitas

Para resolver el problema 315 mediante diferencias finitas, partiremos de la fórmula vista en el capítulo 4 de diferencias centrales para discretizar la tercer derivada de una función.

$$y_n''' \approx \frac{y_{n+2} - 2y_{n+1} + 2y_{n-1} - y_{n-2}}{2h^3} + O(h^2) \quad (375)$$

Luego, sustituyendo 375 en la expresión 315 se tiene que

$$u_j''' \approx \frac{u_{j+2} - 2u_{j+1} + 2u_{j-1} - u_{j-2}}{2h^3} + O(h^2) = \lambda u_j, \quad j = 2, \dots, n-2 \quad (376)$$

donde $u_j = u(x_j)$.

Notemos que la expresión discreta 376 se cuenta con $n - 4$ ecuaciones. Luego, de las condiciones de frontera se cuenta con las dos ecuaciones adicionales

$$u_0''' = 0 \quad (377)$$

y

$$u_n''' = 0 \quad (378)$$

Discretizando la condición de frontera 316 para la primer derivada utilizando diferencias centrales se tiene la expresión

$$u_0' \approx \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = 0 \quad (379)$$

por lo que

$$u_{-1} = u_1 \quad (380)$$

representa una ecuación adicional al sistema. Finalmente, si quisieramos enforzar la expresión 376 en $j = n - 1$ se necesitaría el nodo $n + 1$. Como alternativa para aproximar u_{n-1}''' se utilizó la fórmula de discretización que utiliza 4 nodos hacia atrás y uno hacia adelante definida por la expresión

$$u_{n-1}''' \approx \frac{3u_n - 10u_{n-2} + 12u_{n-3} - 6u_{n-4} + u_{n-5}}{2h^3} + O(h^2) \quad (381)$$

Los resultados de esta aproximación se discutieron en el capítulo 4. La expresión 381 añade la última ecuación necesaria al sistema. El sistema matricial resultante definido por las iteraciones de las expresiones

376 y 381 resulta como

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \lambda 2h^3 \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} \quad (382)$$

Por último, los eigenvalores encontrados de la matriz del sistema 382 para mallas de tamaño $N \geq 64$ se despliegan en la tabla. 17

Tabla 17. Valores propios reales encontrados utilizando diferencias finitas en comparación con los obtenidos para métodos espectrales de la tabla 15.

Nodos	Método espectral	Diferencias finitas
64	32	3
128	35	4
256	34	4
512	37	5
1024	37	5
2048	36	6

De la tabla 17 podemos notar rápidamente dos cosas: la cantidad de valores propios reales encontrados mediante diferencias finitas es muy inferior con respecto a métodos espectrales, incluso para mallas de tamaño superior y el incremento de los 2 grados de orden de tamaño de malla continúa sin incrementar la cantidad de valores propios encontrados utilizando el método espectral con respecto a los desplegados en las tablas 15 y 16, es decir, el estancamiento se preserva. A pesar de que utilizando diferencias finitas si se siguen encontrando más valores propios convergentes conforme el tamaño de nodos aumenta, no se garantiza que con mallas de tamaño exorbitantes haya un punto de inflexión en el cual se encuentren más valores propios mediante diferencias finitas que con métodos espectrales; esta implementación es poco práctica y sumamente costosa. De hecho, para hacerse una idea de lo que esto implica, para agregar un solo valor propio adicional a la tabla 17, es necesario reducir el error en 6 órdenes de tolerancia para las mallas de 512, 1024 y 2048. Otra iniciativa podría ser la implementación de aproximaciones de orden superior para la primera y tercera derivada, lo que de igual manera incrementa la dificultad de implementación. Con todo lo anterior, la ventaja la tiene el método espectral pues a pesar de tener valores espurios, se encuentran más valores convergentes, con mejor precisión y más rapidez en caso de ser un factor determinante.

6.3.4. Eigenvalores mediante splines

Para el caso de la metodología de splines, en el capítulo 3 se concluyó que del trabajo de Khan & Aziz (2002), la implementación de splines de quinto orden daba resultados favorables al aproximar soluciones numéricas a ecuaciones diferenciales y, además, estas aproximaciones eran superiores respecto a diferencias finitas como se mostró en la tabla 12 se esperaba que durante las pruebas para el problema 315 lo mismo ocurriera y se obtuvieran más valores propios reales en comparación con diferencias finitas.

La implementación es más complicada en comparativa con diferencias finitas. En el capítulo 3 habíamos encontrado que la estructura del sistema de splines resultaba en una matriz pentadiagonal tras evaluar la expresión 85 para $j = 2, \dots, N - 2$, posteriormente enforzar en $j = 1$ sustituyendo el valor y_{-1} obtenido en la ecuación 93 y las ecuaciones adicionales derivadas de las relaciones 101 y 105,

Sustituyendo esa matriz en la ecuación principal del problema de eigenvalores 315, el sistema resultante está definido como

$$\mathbf{AY} = \lambda \mathbf{Y} \quad (383)$$

donde \mathbf{A} es la matriz:

$$\begin{pmatrix} -360 - 90h^3\lambda & -12h^3\lambda & 40 - 2h^3\lambda & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 120 - 26h^3\lambda & -66h^3\lambda & -120 - 26h^3\lambda & 60 - h^3\lambda & \dots & 0 \\ -60 - h^3\lambda & 120 - 26h^3\lambda & -66h^3\lambda & -120 - 26h^3\lambda & \dots & 0 \\ 0 & -60 - h^3\lambda & 120 - 26h^3\lambda & -66h^3\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & -60 - h^3\lambda & 120 - 26h^3\lambda & -66h^3\lambda & -120 - 26h^3\lambda & 60 - h^3\lambda \\ 0 & \dots & -120 & 360 - h^3\lambda & -360 - h^3\lambda & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Resolver para λ en la ecuación 383 no es trivial. Se debe extraer el factor λ de la matriz \mathbf{A} para llevar la ecuación a la configuración usual de un problema de eigenvalores y con ello resolver mediante herramientas previamente utilizadas. Para llevar a cabo esta transformación se realizaron acercamientos

como:

- Incrementar el tamaño de paso para reducir h y converger la matriz.
- Utilizar polinomio característico asociado.
- Como \mathbf{A} es invertible, se redujo la expresión a una matriz de escalares.

De los 3 casos anteriores, el segundo es ideal para matrices de tamaño pequeño, pero para el caso de interés que es cuando $N \geq 64$, fue impráctico. En cuanto a la primera opción, evidentemente se elimina el factor λ conforme h disminuye, pero con ello, la ecuación se torna trivial y la solución arrojada es propia del sistema y la aproximación carecía de interés práctico. La opción de reducir la expresión mediante el uso de matriz inversa regularizó, dentro de mejor medida, la expresión general. Esto permitió utilizar nuevamente la función *eig* de MATLAB para generar los N valores propios. Por último, se verificaron aquellos valores convergentes a alguna de las soluciones analíticas definidas por la expresión 362.

Tabla 18. Valores propios reales encontrados utilizando metodología de splines añadidos a la tabla 17.

Nodos	Método espectral	Diferencias Finitas	Splines
64	32	3	9
128	35	4	9
256	34	4	9
512	37	5	9
1024	37	5	9
2048	36	6	9

En la tabla 18 se muestran los resultados de la tabla 17 con la columna de splines agregada. Si bien es cierto que se encontraron más valores propios que con diferencias finitas, en la tabla 18 se aprecia que por más que se incrementa el valor de la malla, el resultado no cambió, siempre fue la misma cantidad de 9 (eliminando los espurios) es posible que se deba a la naturaleza de la matriz \mathbf{A} que mientras más crece la malla, el valor de h disminuye y se converge al caso 2, aún tras haber multiplicado por \mathbf{A}^{-1} la expresión. Habría que verificar las modificaciones adecuadas para lograr obtener más valores propios mediante la metodología de splines. Sin embargo, la conclusión que interesaba es que se obtienen más resultados que diferencias finitas pero aún menos (y por mucho) que la metodología espectral.

El buen comportamiento de la metodología espectral se puede deber a múltiples factores, desde matemáticos hasta computacionales. La oscilación entre la cantidad de eigenvalores encontrados a partir de cierta cantidad de nodos se puede adjudicar a las grandes variaciones y dificultades de aproximar los

valores lambda para puntos muy específicos. De la ecuación 363 para generar eigenvalores analíticos, es fácil darse cuenta que el crecimiento es controlado por el término exponencial.

En la tabla 19 se muestran los 10 primeros eigenvalores generados con 363 y los valores obtenidos para k de tamaño superior.

Tabla 19. Valores propios analíticos generados utilizando la identidad 363

k	λ_k
1	-9.47
2	-60.69
3	-1.89×10^2
4	-4.31×10^2
5	-8.22×10^2
6	-1.39×10^3
7	-2.19×10^3
8	-3.25×10^3
9	-4.59×10^3
10	-6.2×10^3
64	-1.57×10^6
128	-1.25×10^7
256	-1.03×10^8
512	-8.01×10^8
1024	-6.41×10^9

El comportamiento que se aprecia en la tabla 19 para los valores λ_k , claramente es exponencial y representa perfectamente la dificultad de añadir un solo valor propio más a la lista de los encontrados mediante aproximaciones numéricas, es por eso que el estancamiento visto en la metodología espectral no se ve interrumpido si no hasta 2^{13} nodos, y eso sin considerar que el valor puede ser espurio. Es por ello que la aseveración hecha por Mulholland (1995) que se encuentran $N/3$ resultaría hoy en día, naturalmente, muy alejada de la realidad. Dando el beneficio de la duda, como se mencionó previamente, quizá las herramientas contemporáneas a la época en que fue realizado el estudio, no se prestaban para refutar dicha afirmación y podría ser interesante poner en práctica los mismos resultados efectuados en esta investigación utilizando herramientas computacionales del siglo *XX*.

Capítulo 7. Conclusiones

A lo largo de esta tesis, se han mostrado 3 distintas técnicas numéricas para aproximar la solución de problemas de ecuaciones diferenciales de tercer orden con valores en la frontera.

En el capítulo 3 se realizó una exploración exhaustiva del método de splines quínticas para la interpolación y aproximación de soluciones a ecuaciones diferenciales. El proceso de implementar las splines quínticas resulta bastante complicado; a pesar de que se obtiene el orden de convergencia $O(h^7)$ reportado en Khan & Aziz (2002), esta técnica solamente se puede aplicar a cierto tipo de problemas donde las derivadas de la variable independiente aparecen linealmente.

Posteriormente, en el capítulo 4 se estudió el método de diferencias finitas como otra técnica numérica para abordar este tipo de problemas el cual claramente es más fácil de implementar. Se mostró cómo el método tuvo mejores resultados para condiciones de frontera utilizando los nodos extremos y 4 nodos internos para cada frontera de la malla. Se pudieron haber utilizado diferencias finitas de orden superior como lo hacen en Salama (2004) para obtener mejores resultados pero como en el caso de splines, la implementación de una metodología de este tipo resulta muy complicada para los beneficios que se obtienen.

Por otra parte en el capítulo 5, se utiliza el método espectral que da uso de la matriz de diferenciación de Chebyshev basada en los nodos de Gauss-Lobato. Se explicó de manera detallada cómo obtener la matriz de diferenciación de Chebyshev y la forma en que se aplica el método. El método es claramente superior a los otros dos; su implementación es relativamente sencilla para los problemas que se consideraron; además presentan la convergencia espectral.

En el capítulo 6 se hizo una caracterización numérica para el espectro del operador de tercer orden. De los pocos trabajos que existen en la literatura que abordan este problema en particular, en los trabajos Mulholland (1995) y Huang & Sloan (1992) se presentan estudios para este problema utilizando la matriz de diferenciación de Chebyshev.

Sin embargo, en estos trabajos hay algunas afirmaciones que son del todo precisas. En primera instancia, aquí se ha demostrado analíticamente que los argumentos que se dan para decir que los eigenvalores son puramente reales no son completamente correctos. Con los argumentos que se plasman en dichos trabajos, lo único que se puede concluir es que la parte real de todos los eigenvalores es negativa.

Es además importante señalar que en Mulholland (1995), la manera en que se implementa la condición de frontera para la derivada, en realidad no aumenta sustancialmente el número de eigenvalores no

espurios que se obtienen. Es superior aplicar las técnicas directamente en la construcción de la matriz de Chebyshev (Baltensperger & Trummer, 2003). Finalmente, aquí se demuestra que la cota de $N/3$ que los autores afirman obtener no se satisface de forma general. Los autores utilizan mallas de hasta 64 nodos en donde esta condición se satisface pero a partir de un tamaño de mallas superior a 64 nodos, la cantidad de valores propios que se obtienen comienza a estancarse. Como aquí se demostró, esto no es un problema propio del método semiespectral de Chebyshev pues se mostró también que al solucionar el problema mediante los métodos de splines y diferencias finitas, la cantidad de valores propios encontrados fue inferior para todas las mallas y la cantidad también se estanca.

El trabajo que aquí se realizó, se vería enriquecido si en el futuro

- Se explora otra manera de implementar las condiciones de frontera para splines quínticas en donde se mantenga el orden de convergencia $O(h^7)$ donde posiblemente se pierda la estructura pentadiagonal.
- Para el método de splines, sería interesante ver qué ocurriría con los problemas de tercer orden para otro tipo de splines. En particular tratar de aplicar B-Splines como lo han hecho recientemente en Abbas et al. (2022).
- Realizar un estudio del espectro del operador de tercer orden utilizando otras funciones base (e.g. Polinomios de Legendre).
- Poder llegar a demostrar la conjetura de que los valores propios son todos reales.
- Encontrar una demostración analítica del por qué los eigenvalores se estancan con los distintos métodos que se estudiaron esta tesis.

Literatura citada

- Abbas, M., Bibi, A., Alzaidi, A. S., Nazir, T., Majeed, A., & Akram, G. (2022). Numerical solutions of third-order time-fractional differential equations using cubic b-spline functions. *Fractal and Fractional*, 6(9), 528. <https://doi.org/10.3390/fractalfract6090528>.
- Asaithambi, A. (2005). Solution of the falkner–skan equation by recursive evaluation of taylor coefficients. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 176(1), 203–214. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2004.07.013>.
- Baltensperger, R. & Trummer, M. R. (2003). Spectral differencing with a twist. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(5), 1465–1487. <https://doi.org/10.1137/S1064827501388182>.
- Beccar-Varela, M. P., Bhuiyan, M. A. M., Mariani, M. C., & Tweneboah, O. K. (2019). Analytic methods for solving higher order ordinary differential equations. *Mathematics*, 7(9). <https://doi.org/10.3390/math7090826>.
- Berrut, J.-P., Floater, M. S., & Klein, G. (2011). Convergence rates of derivatives of a family of barycentric rational interpolants. *Applied Numerical Mathematics*, 61(9), 989–1000. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2011.05.001>.
- Boyd, J. P. (2001). *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*, (2a ed.). Dover Books on Mathematics. Dover Publications.
- Burden, R. L. & Faires, J. D. (2011). *Numerical analysis*, (9na ed.). Brooks/Cole.
- Caglar, H., Caglar, S., & Twizell, E. H. (1999). The numerical solution of third-order boundary-value problems with fourth-degree & b-spline functions. *International Journal of Computer Mathematics*, 71(3), 373–381. <https://doi.org/10.1080/00207169908804816>.
- Chapra, S. C. & Canale, R. P. (2017). *Numerical Methods for Engineers*, (7ma ed.). McGraw-Hill Education.
- De Boor, C. (1976). *Splines as linear combinations of B-splines: A survey*. University of Wisconsin-Madison. Mathematics Research Center.
- De Boor, C. (2001). *A practical guide to splines*, (revised ed.). Springer-Verlag.
- De la Garza, C. G. & Mariscal, G. L. (2008). *Spectral methods in third-order differential operators*, volume 1. CRC Press.
- Dey, A. K., Haq, T., Das, K., & Panovska, I. (2020). Quantifying the impact of covid-19 on the us stock mark. <https://doi.org/10.1016/j.jairtraman.2021.102141>.
- Doha, E. H., Bhrawy, A. H., & Ezz-Eldien, S. S. (2013). Numerical approximations for fractional diffusion equations via a chebyshev spectral-tau method. *Central European Journal of Physics*, 11. <https://doi.org/10.2478/s11534-013-0264-7>.
- Erdogan, K. (2013). Spline interpolation techniques. *Journal of Technical Science and Technologies*, 47–52. <https://doi.org/10.31578/jtst.v2i1.56>.
- Fagherazzi, S., Furbish, D. J., Rasetarinera, P., & Hussaini, M. Y. (2004). Application of the discontinuous spectral galerkin method to groundwater flow. *Advances in Water Resources*, 27. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2003.11.001>.
- Falkner, V. & Skan, S. (1931). Some approximations of the boundary layer equations. *Philos. Mag*, 12, 865–896. <https://doi.org/10.1080/14786443109461870>.

- Floater, M. S. & Hormann, K. (2007). Barycentric rational interpolation with no poles and high rates of approximation. *Numerische Mathematik*, 107, 315–331.
- Fornberg, B. (1996). *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press.
- Ge, Q. & Zhang, X. (2021). Numerical solution for third-order two-point boundary value problems with the barycentric rational interpolation collocation method. *Journal of Mathematics*, 2021. <https://doi.org/10.1155/2021/6698615>.
- Gustafsson, B. (2017). *Fundamentals of Scientific Computing*, (2a ed.). Springer.
- Haghighi, A., Aghazadeh, A., & Abedini, A. (2020). Comparison of integro quadratic and quartic spline interpolation. *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 10(1), 150–160.
- Han, J., Jentzen, A., et al. (2017). Deep learning-based numerical methods for high-dimensional parabolic partial differential equations and backward stochastic differential equations. *Communications in mathematics and statistics*, 5(4), 349–380.
- Heinrichs, W. (1999). Spectral approximation of third-order problems. *Journal of Scientific Computing*, 14(3), 275–289. <https://doi.org/10.1023/A:1023221619567>.
- Huang, W. & Sloan, D. M. (1992). The pseudospectral method for third-order differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29(6), 1626–1647. <https://doi.org/10.1137/0729094>.
- Hussaini, M. Y. & Zang, T. A. (1987). Spectral methods in fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 19. <https://doi.org/10.1146/annurev.fl.19.010187.002011>.
- Iwata, Y. & Takei, Y. (2022). Numerical scheme based on the implicit runge-kutta method and spectral method for calculating nonlinear hyperbolic evolution equations. *Axioms*, 11. <https://doi.org/10.3390/axioms11010028>.
- Jain, M. (1983). Numerical solution of differential equations. *John Wiley & Sons, Inc.*
- Khan, A. & Aziz, T. (2002). The numerical solution of third-order boundary-value problems using quintic splines. *Applied Mathematics and Computation*, 137(2), 253–260. [https://doi.org/10.1016/S0096-3003\(02\)00051-6](https://doi.org/10.1016/S0096-3003(02)00051-6).
- Khawaja, U. A. & Al-Mdallal, Q. M. (2018). Convergent power series of $\operatorname{sech}(x)$ and solutions to nonlinear differential equations. *International Journal of Differential Equations*. <https://doi.org/10.1155/2018/6043936>.
- Kincaid, D. & Cheney, W. (2002). *Análisis numérico: Matemáticas para la ciencia y la ingeniería*, (3a ed.). Thomson.
- Kreyszig, E. (2018). *Advanced Engineering Mathematics*, (10ma ed.). John Wiley & Sons.
- Kudryashov, N. (1990). Exact solutions of the generalized kuramoto-sivashinsky equation. *Physics Letters A*, 147(5), 287–291. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90449-X](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90449-X).
- Lim, T.-C. (2004). Application of pascal's triangle in representing finite difference solution to partial differential equation. *Mathematical Medley*.
- Lin, T. & Erfan, S. (2016). A model for math modeling. *New England Journal of Higher Education*.

- Mansell, G., Merryfield, W., Shizgal, B., & Weinert, U. (1993). A comparison of differential quadrature methods for the solution of partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 104(3), 295–316. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(93\)90028-V](https://doi.org/10.1016/0045-7825(93)90028-V).
- Merryfield, W. J. & Shizgal, B. (1993). Properties of collocation third-derivative operators. *Journal of Computational Physics*, 105(1), 182–185. <https://doi.org/10.1006/jcph.1993.1065>.
- Mulholland, L. S. (1995). The eigenvalues of the third-order chebyshev pseudospectral differentiation matrices. *Preprint, Mathematics Report*.
- Olanda, V. B. (2019). Método pseudo espectral de chebyshev para calcular la solución numérica de la ecuación de convección - difusión en una dimensión.
- Quarteroni, A., Sacco, R., & Saleri, F. (2006). *Numerical Mathematics*, (2a ed.). Springer.
- Renaut, R. & Su, Y. (1997). Evaluation of chebyshev pseudospectral methods for third order differential equations. *Numerical Algorithms*, 16, 255–281. <https://doi.org/10.1023/A:1019199416310>.
- Ruas, V. & Trales, P. (2013). A hermite finite element method for convection-diffusion equations. volume 1558. <https://doi.org/10.1063/1.4825978>.
- Salama, A. (2004). Higher-order method for solving free boundary-value problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 45(4), 385–394. <https://doi.org/10.1080/10407790490278002>.
- Salama, A. A. & Mansour, A. A. (2005). Fourth-order finite-difference method for third-order boundary-value problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 47(4), 383–401. <https://doi.org/10.1080/10407790590907903>.
- Tanahara, O. & García, M. (2017). La ecuacion kdv: analisis de las soluciones numerica y exacta del problema de la interaccion de soluciones tipo solito. <https://doi.org/10.36788/sah.v2i1.75>.
- Tirmizi, I. A. (1991). On numerical solution of third-order boundary-value problems. *Communications in applied numerical methods*, 7(4), 309–313. <https://doi.org/10.1002/cnm.1630070409>.
- Trefethen, L. N. (2000). *Spectral Methods in MATLAB*. SIAM.
- Tuck, E. O. & Schwartz, L. W. (1990). A numerical and asymptotic study of some third-order ordinary differential equations relevant to draining and coating flows. *SIAM Review*, 32(3), 453–469. <https://doi.org/10.1137/103207>.
- Vreeke, S. A. & Sandquist, G. M. (1970). Phase space analysis of reactor kinetics. *Nuclear Science and Engineering*, 42(3), 295–305. <https://doi.org/10.13182/NSE70-A21219>.
- Weideman, J. & Trefethen, L. N. (1988). The eigenvalues of second-order spectral differentiation matrices. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 25(6), 1279–1298. <https://doi.org/10.1137/0725072>.
- Williamson, F. (1980). Richard courant and the finite element method: A further look. *Historia Mathematica*, 7. [https://doi.org/10.1016/0315-0860\(80\)90001-4](https://doi.org/10.1016/0315-0860(80)90001-4).
- Zabusky, N. J. & Kruskal, M. D. (1965). Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.*, 15, 240–243. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.15.240>.
- Zeb, A., Alzahrani, E., Erturk, V. S., & Zaman, G. (2020). Mathematical model for coronavirus disease 2019 (covid-19) containing isolation class. *BioMed research international*, 2020. <https://doi.org/10.1155/2020/3452402>.