



TESIS DOCTORAL

**MÉTODOS NUMÉRICOS EN DIFERENCIAS FINITAS PARA LA RESOLUCIÓN DE
ECUACIONES DIFUSIVAS FRACCIONARIAS**

JOAQUÍN QUINTANA MURILLO

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

2016

MÉTODOS NUMÉRICOS EN DIFERENCIAS FINITAS
PARA LA RESOLUCIÓN DE
ECUACIONES DIFUSIVAS FRACCIONARIAS

por

Joaquín Quintana Murillo
Departamento de Física
Facultad de Ciencias
Universidad de Extremadura
Badajoz, ESPAÑA

A mis padres

Agradecimientos

Cuando, tras largos años de esfuerzo, el trabajo está terminado, llega la hora de los agradecimientos. Al volver la vista atrás uno rememora a muchas personas que de una manera u otra, en mayor o menor medida, han intervenido, las más de las veces de forma inadvertida, en la génesis de esta memoria. Una palabra de aliento en un momento de pesadumbre, un comentario fortuito que arroja algo de luz sobre aquella cuestión que se resistía... Sería imposible, pues la memoria tiene sus límites, citarlos a todos. Y sería igualmente injusto quedar a alguien sin citar. Por ello he decidido limitar mi lista de agradecimientos a unos cuantos nombres que han sido decisivos para que esta tesis vea la luz.

Me gustaría empezar dando las gracias a José Benito Llerena Llerena, para mí don José, mi maestro de la segunda etapa de EGB. Él me enseñó lo que era un laboratorio y también puso su biblioteca personal a mi disposición. Fue también la primera persona conocida que se embarcó en un proyecto de tesis. Por todas estas razones siempre ha sido para mí un referente. Mi deseo de ser doctor está indisolublemente ligado a su ejemplo.

Quisiera también mostrar mi gratitud y reconocimiento a Francisco Vinagre Arias, mi profesor de Física y Química de BUP. Otro doctor en ciernes que me enseñó a amar la ciencia y que influyó de manera importante en mi decisión de estudiar Física.

Mi más sincero y profundo agradecimiento lo reservo para mi director de tesis, Santos Bravo Yuste. Él es quien me ha introducido en el apasionante mundo del Cálculo Fraccionario y me ha enseñado a programar. Sin su apoyo, comprensión y paciencia infinita a lo largo de estos años, este trabajo nunca hubiera llegado a buen puerto.

Quiero por último darles las gracias a mis padres. Su confianza incondicional ha sido la fuerza que me ha traído hasta aquí. Muchas Gracias, padres.

Resumen

Esta tesis tiene por objeto el desarrollo de algoritmos numéricos para la resolución de varias clases de ecuaciones difusivas fraccionarias, estableciendo una comparación de los límites de estabilidad y de las precisiones de los distintos esquemas numéricos implementados. En una primera parte, se plantean algoritmos explícitos construidos a partir de un discretizado uniforme de la derivada fraccionaria temporal para varias clases de problemas en los que ésta viene definida tanto en el sentido de Caputo como en el de Riemann-Liouville. En la segunda parte del trabajo, se desarrollan algoritmos implícitos con discretizado no uniforme de la derivada temporal fraccionaria que permiten construir métodos adaptativos muy precisos y muy eficientes desde el punto de vista computacional.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Introducción	1
1. Fundamentos	11
1.1. Derivadas Fraccionarias	11
1.1.1. Derivada de Grünwald-Letnikov	11
1.1.2. Derivada de Riemann-Liouville	12
1.1.3. Derivada de Caputo	12
1.1.4. Relación entre las tres definiciones	13
1.2. Discretización de las derivadas fraccionarias	14
1.2.1. Discretización de Grünwald-Letnikov o BDF	14
1.2.2. Discretizaciones L1 y L2	15
1.3. Funciones especiales	16
1.3.1. Función de Mittag-Leffler	17
1.3.2. Función H de Fox	17
1.3.3. Relación entre las funciones de Mittag-Leffler y la función H de Fox	18
1.4. Métodos analíticos de resolución de FPDE	18
1.4.1. Método de Separación de Variables	19
1.4.2. Método de la Transformada de Laplace	22
1.5. Métodos en Diferencias Finitas para FPDE	22
1.6. Repaso bibliográfico	23
2. Métodos Explícitos	31
2.1. Ecuación subdifusiva fraccionaria	32
2.1.1. Método de Yuste-Acedo	35
2.1.2. Método de GMCP	54
2.1.3. Método L1	62

2.1.4.	Comparación entre los tres métodos	73
2.2.	Ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria	76
2.2.1.	Método de Yuste-Acedo	80
2.2.2.	Método de GMCP	91
2.2.3.	Método L2	95
2.2.4.	Comparación entre los tres métodos	106
2.3.	Ecuación de cable fraccionaria	108
2.3.1.	Error de Truncamiento	112
2.3.2.	Análisis de Estabilidad	113
2.3.3.	Convergencia	117
2.3.4.	Análisis de la precisión. Ejemplo numérico	119
3.	Métodos Adaptativos	129
3.1.	Ecuación subdifusiva fraccionaria	131
3.1.1.	Algoritmo de paso variable para la ecuación subdifusi- va fraccionaria	131
3.1.2.	Un primer ejemplo de método adaptativo: dispersión de un flujo de partículas subdifusivas	140
3.1.3.	Método adaptativo Ensayo y Error (EE)	148
3.1.4.	Método Predictivo	161
3.1.5.	Aplicación de los métodos adaptativos a otros proble- mas subdifusivos	170
4.	Conclusiones	183
A.	Códigos <i>Mathematica</i>	187
	Bibliografía	209

Introducción

El 30 de septiembre de 1695, el marqués de L' Hôpital escribía una carta a Leibniz en la que se planteaba la siguiente pregunta relativa a la notación empleada por éste para la n -ésima derivada de una función $y(x)$:

¿qué sucedería si n fuera $\frac{1}{2}$?

La respuesta de Leibniz fue premonitoria:

... esto conduciría a una paradoja de la que algún día se extraerán consecuencias útiles ...

En 1697, sería el propio Leibniz quien estableciera que mediante el uso del Cálculo Diferencial y a partir de una derivada de orden $1/2$, se podía obtener para el valor de π el mismo resultado que Wallis había obtenido mediante su producto infinito. Había comenzado así el desarrollo del Cálculo Fraccionario. Un desarrollo lento en un principio, pero sostenido en el tiempo.

Para centrar la cuestión, es interesante hacer un repaso de los hitos más relevantes que han jalonado la evolución de esta disciplina [1]. En 1730, Euler habla de interpolaciones entre órdenes enteros de una derivada, en una clara alusión al concepto de derivada fraccionaria. En 1812, Laplace define una derivada fraccionaria y en 1819 S.F. Lacroix hace lo propio en un texto de Cálculo, al igual que Fourier en 1822. Sin embargo, en todos los casos se trata de meras elucubraciones matemáticas, carentes de aplicación práctica. La primera aplicación llegó de la mano de Abel, que en 1823 utilizó resultados y propiedades de las ecuaciones diferenciales ordinarias para resolver una integral surgida en la formulación del problema de la tautócrona [2]. La solución de Abel influyó poderosamente en Liouville a quien le debemos la primera definición formal del concepto de derivada fraccionaria, desarrollada entre los años 1832 y 1855, pasando por una primera definición en términos de una serie cuya convergencia limita los posibles valores del orden de la derivada fraccionaria y llegando finalmente a una segunda definición que sugiere la necesidad de tener en cuenta números complejos y cuya aplicación práctica ha resultado muy exitosa.

En la segunda mitad del siglo XIX tuvo lugar una activa discusión académica entre los partidarios de la definición de Lacroix y los partidarios de la

definición de Liouville. W. Center [3] señaló que el punto de discrepancia entre ambas corrientes lo constituía el concepto de la derivada fraccionaria de una constante, que en la formulación de Liouville sería nula mientras que en la formulación de Lacroix sería distinta de cero.

Por otra parte, en torno a 1847, Riemann desarrolló su propia teoría de operaciones fraccionarias mediante una generalización de una serie de Taylor la cual le permitió deducir su fórmula para integración de orden arbitrario. En las últimas décadas del siglo XIX, Sonin y Letnikov trabajaron en la diferenciación con índice arbitrario, siguiendo los planteamientos de Riemann-Liouville.

La primera teoría aceptable conforme a las exigencias de los matemáticos modernos fue desarrollada por H. Laurent en 1884. Toma como punto de partida la fórmula de Cauchy para funciones analíticas y la generaliza [4]. La notación que hoy empleamos para la conocida como integral de Riemann-Liouville data de 1936 y es debida al matemático H.T. Davis, ${}_c D_x^{-\gamma} f(x)$, con $\gamma \geq 0$, siendo c y x los límites de integración mientras que ${}_c D_x^\gamma f(x)$, con $\gamma \geq 0$, denota diferenciación de orden γ .

El desarrollo de la teoría de funciones a lo largo del siglo XX, llevó a la aparición de nuevas formas integro-diferenciales fraccionarias. Así, en 1917 Weyl definió una integral fraccionaria para funciones periódicas y, ya en 1967, el físico-matemático M. Caputo dio una nueva definición de derivada fraccionaria [5] que permitía una interpretación física directa de las condiciones iniciales de los problemas aplicados.

A partir de aquí, el desarrollo acelerado del Análisis Fraccionario es un hecho que queda evidenciado por la abundante y creciente producción bibliográfica. En junio del año 1974, Ross organizó la primera conferencia mundial sobre Cálculo Fraccionario y editó los proceedings. La primera monografía sobre el tema corresponde a Oldham y Spanier quienes, como consecuencia de su colaboración iniciada en 1968, publicaron en 1974 un libro de gran influencia [6]. Un manual indispensable en el estudio del Cálculo Fraccionario es el libro de Podlubny publicado en 1999 [9]. Este manual aporta una visión de conjunto sobre la teoría del análisis fraccionario, las ecuaciones diferenciales de orden fraccionario, los distintos métodos para su resolución y sus aplicaciones. Más recientes, pero igualmente destacables, son un par de libros que abundan en el análisis de modelos fraccionarios de procesos complejos: el libro de Kilbas, Srivastava y Trujillo de 2006 [14] y el libro de Sabatier, Agrawal y Tenreiro Machado de 2007 [15].

La descripción de fenómenos de transporte en *sistemas complejos*, recogidos en la bibliografía bajo el epígrafe de *difusión anómala*, se ha convertido en uno de los tópicos más recurrentes del Cálculo Fraccionario cuya principal ventaja frente a otros formalismos radica en que proporciona un tratamiento

sencillo de los campos de fuerzas y de las condiciones de contorno. Dicho de otra manera, el tratamiento matemático convencional mediante ecuaciones diferenciales ordinarias en derivadas parciales es inadecuado para describir cierta clase de procesos difusivos que, sin embargo, pueden ser eficazmente descritos mediante el formalismo fraccionario.

Las investigaciones desarrolladas en las últimas décadas muestran que la difusión anómala está presente en múltiples contextos: el transporte de carga en semiconductores amorfos [33]; el estudio de la viscoelasticidad en el contexto de la reología de polímeros [34]; la cinética de reacción de proteínas cuya dinámica viene gobernada por varias escalas temporales [35]; la descripción del movimiento de partículas en redes poliméricas [41]; la dinámica de la conformación de las proteínas [37]; las estructuras fractales que imponen limitaciones geométricas a los procesos de transporte para cualquier escala de longitud, limitaciones que pueden ser también interpretadas como correlaciones temporales para muchas escalas de tiempo [39, 40]; la difusometría de resonancia magnética nuclear [36]; las series temporales en los mercados financieros [38] o la difusión turbulenta de Richardson en base a los procesos de Lévy [42].

Como se acaba de ver, en todos estos trabajos se considera la difusión anómala en sistemas complejos que son aquellos que vienen caracterizados por una gran diversidad de unidades elementales y por las fuertes interacciones entre éstas. En los sistemas complejos la relajación se desvía del clásico comportamiento exponencial de la ley de Debye y en muchos casos se aproxima a una forma de exponencial estirada conforme a la ley de Kohlrausch-Williams-Watts. De igual modo, la difusión anómala en diversos sistemas complejos deja de obedecer a la estadística gaussiana de modo que la segunda ley de Fick ya no se satisface. Esto se evidencia en que el desplazamiento cuadrático medio se aleja de un modelo de dependencia temporal lineal, $\langle x^2(t) \rangle = k_1 t$, característico del movimiento browniano y sigue una ley de dependencia temporal típicamente no lineal. En esta tesis se considera una ley de tipo potencial (aunque existen otras posibles relaciones) donde el exponente γ es el orden de la derivada fraccionaria de la ecuación difusiva que describe el proceso, esto es, $\langle x^2(t) \rangle = k_\gamma t^\gamma$. Esta relación pone de manifiesto que el teorema central del límite no resulta válido en este tipo de situaciones, bien por la existencia de correlaciones de largo alcance o bien como consecuencia de distribuciones anchas para las cuales la probabilidad de un suceso raro es grande en comparación con la probabilidad que le correspondería si obedeciera a la distribución gaussiana. Es por esto que el fundamento de la difusión anómala, en estos casos, hay que buscarlo en el teorema central del límite generalizado de Lévy-Gnedenko.

Una aproximación muy exitosa al fenómeno de la difusión anómala viene

dada por el modelo de Caminatas Aleatorias en Tiempo Continuo, conocido por sus siglas en inglés CTRW (Continuous Time Random Walk). En este modelo los valores de la longitud de un salto dado y el lapso de tiempo entre dos saltos sucesivos son parámetros aleatorios y vienen determinados por una función densidad de probabilidad $\psi(x, t)$. A partir de la función distribución de probabilidad de salto, $\psi(x, t)$, es posible determinar la función distribución de probabilidad de longitud de salto, $\lambda(x)$,

$$\lambda(x) = \int_0^{\infty} \psi(x, t) dt$$

y la función distribución de probabilidad del tiempo de espera entre saltos, $\omega(t)$,

$$\omega(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) dx.$$

En particular, saltos espaciales o distribuciones de tiempos de espera entre saltos de “cola larga”, esto es, $\lambda(x) \sim |x|^{-1-\alpha}$ y/o $\omega(t) \sim t^{-1-\gamma}$, con $0 \leq \alpha, \gamma \leq 1$ (los cuales proporcionan una probabilidad mayor que la de la distribución gaussiana para sucesos extremos alejados de la media), conducen a propagadores no gaussianos y a una evolución temporal no markoviana.

Si la longitud de salto y el tiempo de espera son variables aleatorias desacopladas, se puede expresar nuestra función distribución de probabilidad como

$$\psi(x, t) = \lambda(x)\omega(t).$$

Si ambas variables están acopladas, un salto de cierta longitud involucra un coste temporal o viceversa, es decir, en un lapso de tiempo dado la partícula sólo puede viajar una determinada distancia. Por lo general, los modelos trabajan con $\lambda(x)$ y $\omega(t)$ desacopladas pues el tratamiento matemático requerido es más asequible.

Siguiendo el desarrollo del modelo CTRW [8], la probabilidad de estar en la posición x en un tiempo t , $W(x, t)$, viene dada en el espacio transformado de Fourier-Laplace por la fórmula de Montroll-Weiss:

$$W(k, u) = \frac{1 - w(u)}{u} \frac{W_0(k)}{1 - \psi(k, u)}$$

donde $W_0(k)$ es la transformada de Fourier de la condición inicial $W_0(x) = W(x, 0)$.

Para el caso con longitud de salto y tiempos de espera desacoplados, suponiendo que la varianza de la longitud de salto, Σ^2 , dada por la expresión

$$\Sigma^2 = 2\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(x)x^2 dx$$

se mantiene finita, y considerando asimismo que

$$\omega(t) \sim \left(\frac{\tau}{t}\right)^{1+\gamma}, \quad 0 < \gamma < 1,$$

para tiempos grandes, de modo que el tiempo de espera característico, T , definido como

$$T = \int_0^{\infty} \omega(t)t dt$$

es infinito, se llega a que

$$-K_\gamma u^{-\gamma} k^2 W(k, u) = W(k, u) - \frac{1}{u} W_0(k), \quad K_\gamma = \frac{\sigma^2}{\tau^\gamma}.$$

Finalmente, pasando al espacio directo y haciendo uso de las definiciones de la derivada parcial temporal y de la derivada fraccionaria temporal en el sentido de Riemann-Liouville, se obtiene la ecuación subdifusiva fraccionaria en términos de la derivada fraccionaria temporal de Riemann-Liouville

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\gamma} K_\gamma \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1.$$

Esta ecuación así como su equivalente (bajo ciertas condiciones que se verán en el capítulo 2) en términos de la derivada fraccionaria de Caputo, serán profusamente estudiadas en esta memoria. De igual modo, se estudiará la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria, tanto en términos de la derivada de Riemann-Liouville,

$$\frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial t^2} = {}_0D_t^{2-\gamma} K_\gamma \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}, \quad 1 < \gamma < 2,$$

como en términos de la derivada de Caputo. No obstante, en esta tesis no se considerarán ecuaciones bifraccionarias, es decir, ecuaciones en derivadas parciales con derivadas espaciales y temporales fraccionarias. En el contexto del modelo CTRW, las derivadas espaciales fraccionarias en sistemas difusivos aparecen cuando las distribuciones de salto de las partículas son también de cola larga (vuelos de Lévy)[89, 90]. La fenomenología asociada a estas ecuaciones es compleja, pueden dar lugar tanto a comportamientos subdifusivos como superdifusivos, y su resolución numérica tiene peculiaridades asociadas a las condiciones de contorno que no aparecen en las ecuaciones que se discuten en esta memoria [68, 90].

Como ya se ha apuntado en la primera parte de esta introducción, el Cálculo Fraccionario ha experimentado un desarrollo formidable en las últimas décadas (y muy especialmente en la última década). Las ecuaciones fraccionarias se han revelado como una poderosa herramienta para modelar la dinámica anómala de muchos procesos relacionados con sistemas complejos en los campos de la ciencia y de la ingeniería. Se trata de situaciones en las que el proceso sigue leyes clásicas pero el medio es complejo, no sólo por ser no homogéneo en el sentido clásico sino porque el propio medio se descompone de modo más o menos aleatorio en constituyentes de elevada heterogeneidad y muy diferente escala.

Las ecuaciones subdifusiva y difusivo-ondulatoria fraccionarias forman parte de una gama más amplia de ecuaciones diferenciales fraccionarias que permiten extender las aplicaciones del Cálculo Fraccionario [19]. Así, este formalismo resulta muy adecuado para estudiar la cinética de reacción cuando las partículas reactivas manifiestan un comportamiento subdifusivo [20, 21, 22]. En el área de los mercados financieros, se emplean modelos de orden fraccionario para describir las distribuciones de probabilidad de precios en el límite de largo plazo [23]. En Medicina, las aplicaciones son múltiples y van desde el análisis de imágenes [24, 25] donde en ciertos ambientes complejos es preciso recurrir a métodos de elaboración de las imágenes basados en la difusión anómala, hasta el estudio de la electrodifusión de iones en las neuronas. Aunque el origen preciso del carácter anómalo de este proceso difusivo a nivel neuronal no está claro, Langlands et al. [26, 27] han planteado el problema en base a la ecuación fraccionaria de cable o ecuación fraccionaria de Cattaneo. Dentro del campo de la Teoría de Control se ha desarrollado el Control Fraccionario en el que se emplean operadores y sistemas fraccionarios como sistemas de referencia y como controladores [28, 29, 30]. También se debe señalar que en el campo de la fundamentación teórica, Podlubny [13] propone una novedosa interpretación física para la integración y la derivación fraccionarias basada en dos clases de tiempo (un tiempo cósmico y otro tiempo individual) y establece conexiones entre este modelo y ciertas ideas empleadas en la teoría de la relatividad.

Resulta pues evidente que los sistemas dinámicos fraccionarios constituyen un marco idóneo para abordar el análisis de multitud de procesos y, por lo tanto, el estudio de las ecuaciones diferenciales fraccionarias y de sus soluciones es fundamental para poder aplicar el formalismo con solvencia y garantías.

La primera opción ante una ecuación diferencial ordinaria es buscar su solución analítica. Lo mismo sucede en el caso de las ecuaciones diferenciales fraccionarias. Como veremos en el siguiente capítulo, existen diversos procedimientos de resolución analítica para los distintos tipos de ecuaciones

diferenciales fraccionarias, centrados principalmente en la técnica de la transformada, como puede ser la transformada de Sumudu para ecuaciones diferenciales fraccionarias lineales [43] o las transformadas de Fourier o de Laplace para ecuaciones diferenciales fraccionarias lineales y no lineales [44]. Tampoco se debe olvidar otro tipo de métodos analíticos de resolución, como la descomposición de Adomian [45, 46] o el uso de series de potencias [9].

No obstante, en muchas ocasiones la solución analítica resulta muy difícil de obtener, o simplemente no existe. Es en este punto donde se evidencia la necesidad de construir soluciones aproximadas y para ello resulta indispensable disponer de algoritmos numéricos estables, precisos y bien testados que nos permitan obtener una solución fiable. De los diversos tipos de métodos numéricos existentes (elementos finitos, diferencias finitas, variacionales) son los métodos en diferencias finitas, tanto explícitos como implícitos, los que se constituyen en objeto de esta tesis.

La elección de un método explícito o uno implícito a la hora de resolver un problema dado lleva aparejada ventajas e inconvenientes. Por una parte, los métodos explícitos son más fáciles de implementar y menos exigentes desde el punto de vista computacional que los métodos implícitos, pero, por la otra, los algoritmos explícitos se vuelven típicamente inestables para ciertos valores de los parámetros que definen el sistema mientras que es posible construir algoritmos implícitos que sean incondicionalmente estables. Y aún existe otro factor determinante a la hora de implementar un algoritmo numérico en diferencias finitas: el tipo de discretizado. En la bibliografía abundan los métodos numéricos con discretizado uniforme pero son muy escasos los métodos de paso variable. Éstos últimos son de una importancia extraordinaria pues permiten construir métodos adaptativos más precisos y computacionalmente más eficientes que los de paso constante por lo que, a la postre, resultan ser los únicos operativos para resolver ciertos problemas inabordables mediante un discretizado uniforme de la derivada fraccionaria.

Objetivos de la tesis

Los objetivos concretos de la presente tesis son los siguientes:

- Implementar métodos numéricos en diferencias finitas con discretizado uniforme para la resolución de diversos tipos de ecuaciones difusivas fraccionarias definidas tanto en términos de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville como en términos de la derivada de Caputo.
- Determinar el error de las soluciones tomando como referencia la solución analítica y establecer comparaciones entre los distintos métodos desarrollados.

- Establecer las condiciones de estabilidad de los algoritmos desarrollados.
- Implementar algoritmos numéricos en diferencias finitas con discretizado no uniforme que permitan construir métodos de carácter adaptativo.
- Desarrollar métodos adaptativos y aplicarlos a la resolución de diversos problemas subdifusivos.
- Comparar la eficacia computacional y la precisión de los distintos métodos adaptativos desarrollados.
- Comparar la eficacia computacional de los métodos adaptativos frente a los de paso constante.

Estructura de la tesis

La disposición que adopta esta tesis doctoral queda como se indica a continuación. En el capítulo 1 se aborda la fundamentación matemática de la tesis. En primer término se introducen las tres definiciones de derivada fraccionaria que se van a utilizar, presentando asimismo los modelos de discretización adoptados. Seguidamente se hace una breve introducción de las funciones H de Fox y de las funciones de Mittag-Leffler y se continúa con los dos métodos analíticos utilizados y una breve reseña acerca del método en diferencias finitas. El capítulo se cierra con un repaso bibliográfico por algunos de los trabajos más destacados en el campo del Cálculo Fraccionario poniendo especial énfasis en el ámbito de las ecuaciones difusivas fraccionarias. En el capítulo 2 se consideran un conjunto de métodos explícitos. En la primera parte de este capítulo se van a desarrollar seis métodos explícitos procedentes de diferentes discretizaciones de la derivada temporal fraccionaria y se van a comparar tanto sus precisiones como sus límites de estabilidad. Para el análisis de estabilidad se empleará un procedimiento de tipo Von Neumann-Fourier. Los algoritmos numéricos se aplicarán a la resolución de ecuaciones subdifusivas fraccionarias y ecuaciones difusivo-ondulatorias fraccionarias unidimensionales. En la segunda parte del capítulo 2 se desarrollará un algoritmo explícito [74] para resolver la ecuación fraccionaria de cable en una dimensión. En este caso, a diferencia de los anteriores, la ecuación presenta no una, sino dos derivadas temporales fraccionarias, en general de distinto orden. Este hecho, como veremos, tiene implicaciones directas sobre la estabilidad del esquema numérico. En el capítulo 3 se van a implementar tres métodos adaptativos para resolver la ecuación difusiva fraccionaria. Como paso previo al desarrollo de métodos adaptativos, se establece un esquema de discretización con pasos variables sobre el que construir el método. De esta

manera, se empezará por desarrollar este algoritmo numérico de pasos variables para la resolución de la ecuación difusiva fraccionaria y se analizarán sus principales características. A continuación, se construyen los algoritmos adaptativos y se aplican a la resolución de diversos problemas subdifusivos. El capítulo 4 está reservado a las conclusiones. Por último, en el apéndice A se recogen los códigos *Mathematica* correspondientes a los algoritmos desarrollados en los capítulos 2 y 3.

Capítulo 1

Fundamentos

1.1. Derivadas Fraccionarias

1.1.1. Derivada de Grünwald-Letnikov

Sea $f(t)$ una función continua. La derivada primera $f'(t)$ de la función $f(t)$ viene definida por la fórmula

$$f'(t) = \frac{df}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t}. \quad (1.1)$$

Si se aplica esta definición dos veces se obtiene la derivada segunda $f''(t)$ de la función $f(t)$

$$f''(t) = \frac{d^2 f}{dt^2} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) - 2f(t - \Delta t) + f(t - 2\Delta t)}{(\Delta t)^2} \quad (1.2)$$

y, por inducción (véase [9]), se obtiene la siguiente fórmula para la derivada n -ésima, $f^{(n)}(t)$ de la función $f(t)$:

$$f^{(n)}(t) = \frac{d^n f}{dt^n} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{(\Delta t)^n} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} f(t - r\Delta t) \quad (1.3)$$

donde

$$\binom{n}{r} = \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-r+1)}{r!}. \quad (1.4)$$

Si se elimina la restricción de que n sea un número entero, se puede considerar la ecuación (1.3) como un caso particular de la expresión general

$${}^GLD_t^\gamma f(t) = \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ n\Delta t = t-a}} \frac{1}{(\Delta t)^\gamma} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{\gamma}{r} f(t - r\Delta t) \quad (1.5)$$

que representa la derivada de Grünwald-Letnikov de orden γ siendo γ un número real. En la definición se considera la función $f(t)$ definida sobre un intervalo $[a, t]$ de tal modo que $n\Delta t = t - a$.

1.1.2. Derivada de Riemann-Liouville

La derivada fraccionaria de Riemann-Liouville de orden γ [9] de una función $f(t)$ se define como

$${}_a D_t^\gamma f(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t - \tau)^{n-\gamma-1} f(\tau) d\tau, \quad n - 1 \leq \gamma < n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (1.6)$$

En general, dos operadores derivada fraccionaria de Riemann-Liouville cualesquiera, ${}_a D_t^\gamma$ y ${}_a D_t^\alpha$, no conmutan, es decir

$${}_a D_t^\gamma ({}_a D_t^\alpha f(t)) \neq {}_a D_t^\alpha ({}_a D_t^\gamma f(t)), \quad (1.7)$$

donde $n - 1 \leq \gamma < n$,
mientras que $m - 1 \leq \alpha < m$.

La conmutación se da, o bien en el caso trivial $\gamma = \alpha$ o bien si

$$f^{(j)}(a) = 0, \quad (j = 0, 1, 2, \dots, r - 1), \quad \text{siendo } r = \max(n, m). \quad (1.8)$$

1.1.3. Derivada de Caputo

Los problemas de valor inicial para ecuaciones diferenciales de orden fraccionario en los que la derivada fraccionaria viene dada en términos de la definición de Riemann-Liouville requieren para su resolución de condiciones iniciales que contengan los valores límite de las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville [9] tomados en el límite inferior de integración, $t = a$, esto es

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\gamma-1} f(t) &= b_1, \\ \lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\gamma-2} f(t) &= b_2, \\ &\dots \\ \lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\gamma-n} f(t) &= b_n, \end{aligned} \quad (1.9)$$

donde los b_k , con $k = 1, 2, \dots, n$, son constantes dadas.

A pesar de que los problemas de valor inicial planteados en términos de este tipo de condiciones iniciales pueden ser resueltos desde un punto de

vista matemático, las soluciones obtenidas requieren de una interpretación física heurística, más elaborada y menos habitual que la correspondiente a las ecuaciones diferenciales ordinarias.

La aproximación desarrollada por M. Caputo permite formular las condiciones iniciales en problemas con ecuaciones diferenciales de orden fraccionario de forma que tan sólo involucran los valores en el límite interior de la integral ($t = a$) de las derivadas de orden entero, tales como $f'(a)$, $f''(a)$, etc. La definición de la derivada fraccionaria de Caputo de orden γ es la siguiente:

$${}_a^C D_t^\gamma f(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau) d\tau}{(t - \tau)^{\gamma+1-n}}, \quad n - 1 \leq \gamma < n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (1.10)$$

Otra diferencia fundamental entre la definición de Riemann-Liouville y la definición de Caputo es que la derivada fraccionaria de Caputo de una constante C es igual a 0 mientras que la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville de esa misma constante C , considerando valores finitos del límite inferior a de la integral de la definición, no es cero sino

$${}_0 D_t^\gamma C = \frac{C t^{-\gamma}}{\Gamma(1 - \gamma)}, \quad a \in \mathbb{R}. \quad (1.11)$$

Al igual que ocurre en el caso de la definición de Riemann-Liouville, dos operadores derivada fraccionaria de Caputo cualesquiera, ${}_a^C D_t^\gamma$ y ${}_a^C D_t^\alpha$, no conmutan en general, es decir

$${}_a^C D_t^\gamma ({}_a^C D_t^\alpha f(t)) \neq {}_a^C D_t^\alpha ({}_a^C D_t^\gamma f(t)). \quad (1.12)$$

1.1.4. Relación entre las tres definiciones

En la definición de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville se ha establecido que n es el número entero tal que $n - 1 < \gamma < n$. Si se supone que la función $f(t)$ es $n - 1$ veces diferenciable en $[a, t]$ y que $f^{(n)}(t)$ es integrable en $[a, t]$, entonces para cada γ ($0 < \gamma < n$) la derivada de Riemann-Liouville existe y coincide con la derivada de Grünwald-Letnikov [9]. Desde el punto de vista puramente matemático esta clase de funciones es muy restringida pero su importancia para las aplicaciones prácticas es grande puesto que el carácter de la mayoría de los procesos dinámicos es suave y sin discontinuidades.

La relación entre el operador de Caputo y el de Riemann-Liouville [60, 65], para una función $f(t)$, $n - 1$ veces diferenciable en el intervalo $[a, t]$ y tal que $f^{(n)}(t)$ es integrable en $[a, t]$, viene dada por

$${}^C D_t^\gamma f(t) = {}_a D_t^\gamma f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(t-a)^{k-\gamma}}{\Gamma(k+1-\gamma)} f^{(k)}(a). \quad (1.13)$$

En el límite $a \rightarrow -\infty$ y siempre y cuando $f(t)$ y sus derivadas tengan un comportamiento razonable (por ejemplo $\lim_{t \rightarrow -\infty} f^{(k)}(t) = b$ donde $b \in \mathbb{R}$) en el límite $t \rightarrow -\infty$ se tiene la equivalencia entre ambas definiciones, es decir

$${}_{-\infty} D_t^\gamma f(t) = {}_{-\infty}^C D_t^\gamma f(t). \quad (1.14)$$

A lo largo de toda la tesis, tanto en el caso de la definición de la derivada de Caputo como en el de la definición de Riemann-Liouville, se va a considerar el límite inferior de la integral como nulo, es decir $a = 0$. Esta elección tiene sentido pues se va a trabajar con derivadas fraccionarias temporales y, en tal caso, lo más natural es fijar el origen de tiempos en $t = 0$.

1.2. Discretización de las derivadas fraccionarias

Las aproximaciones numéricas de las derivadas fraccionarias de Caputo y de Riemann-Liouville constituyen la base de los algoritmos numéricos de resolución de ecuaciones difusivas fraccionarias. A continuación, se hará un breve repaso de las aproximaciones que emplearemos en esta tesis, que son las más usuales aunque no las únicas posibles.

1.2.1. Discretización de Grünwald-Letnikov o BDF

Construir la discretización BDF [9] (del inglés *backward difference formula*) partiendo de la definición de Grünwald-Letnikov o de la de Riemann-Liouville es indiferente por cuanto para la clase de funciones con las que trabajamos se da la equivalencia entre ambas definiciones. Si se elige como punto de partida la definición de Riemann-Liouville dada por la ecuación (1.6) para la derivada fraccionaria de una función $f(t)$, se considera que el límite inferior de la integral es nulo, es decir $a = 0$, se renombra el límite superior como t_n y se discretiza el intervalo $[0, t_n]$ dividiéndolo en n intervalos iguales de longitud Δt , tales que $t_n = n\Delta t$ con $n = 0, 1, 2, \dots$, se llega a

la siguiente aproximación numérica de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville

$${}_0D_t^\gamma f(t)|_{t_n} = {}_0\delta_t^\gamma f(t_n) + O[(\Delta t)^p] \quad (1.15)$$

donde

$${}_0\delta_t^\gamma f(t_n) = \frac{1}{(\Delta t)^\gamma} \sum_{k=0}^n \omega_k^{(\gamma)} f(t_{n-k}) . \quad (1.16)$$

Como se indica en (1.15), la aproximación es de orden p . El orden de la aproximación depende de los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ que hayamos considerado. Una aproximación ampliamente utilizada es la conocida como BDF1 donde los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ se obtienen mediante la llamada fórmula de Euler

$$\omega_k^{(\gamma)} = (-1)^k \binom{\gamma}{k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.17)$$

coeficientes que también pueden obtenerse mediante la siguiente relación de recurrencia

$$\omega_0^{(\gamma)} = 1, \quad \omega_k^{(\gamma)} = \left(1 - \frac{\gamma + 1}{k}\right) \omega_{k-1}^{(\gamma)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.18)$$

Los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ son los coeficientes del desarrollo en serie de potencias de la función $(1 - z)^\gamma$,

$$(1 - z)^\gamma = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\gamma}{k} z^k = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(\gamma)} z^k . \quad (1.19)$$

Fórmulas para las aproximaciones BDF de orden superior ($p > 1$) pueden verse en [9].

1.2.2. Discretizaciones L1 y L2

Las aproximaciones conocidas como L1 y L2, descritas en [6], toman como punto de partida la definición de Caputo (1.10) para la derivada fraccionaria de una función $f(t)$. La aproximación L1 es la correspondiente al caso subdifusivo, $0 < \gamma < 1$, mientras que la aproximación L2 es la que corresponde al caso conocido como difusivo-ondulatorio o simplemente difu-onda, $1 < \gamma < 2$. Al igual que en la discretización de Grünwald-Letnikov, se considera que el límite inferior de la integral es nulo, es decir $a = 0$, se renombra el límite superior como t_n y se discretiza el intervalo $[0, t_n]$ en n intervalos iguales de longitud Δt , tales que $t_n = n\Delta t$ con $n = 0, 1, 2, \dots$. De este modo se tiene:

- **Discretización L1** [6, 32]

$${}^C D_t^\gamma f(t)|_{t_n} = {}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) + O[(\Delta t)^{2-\gamma}] \quad (1.20)$$

donde

$${}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(t_{k+1}) - f(t_k)}{\Delta t} \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} \frac{d\xi}{(t_n - \xi)^\gamma}. \quad (1.21)$$

Simplificando convenientemente y renombrando índices, la expresión queda en la forma

$${}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) = \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{n-1} b_k^{(\gamma)} [f(t_{n-k}) - f(t_{n-1-k})] \quad (1.22)$$

con los coeficientes $b_k^{(\gamma)}$ definidos como sigue

$$b_k^{(\gamma)} = (k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}. \quad (1.23)$$

- **Discretización L2** [6, 11, 12]

$${}^C D_t^\gamma f(t)|_{t_n} = {}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) + O[(\Delta t)] \quad (1.24)$$

donde

$${}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(t_k) - 2f(t_{k-1}) + f(t_{k-2})}{(\Delta t)^2} \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} \frac{d\xi}{(t_n - \xi)^{\gamma-1}}. \quad (1.25)$$

Simplificando convenientemente y renombrando índices, la expresión queda en la forma

$${}_0 \delta_t^\gamma f(t_n) = \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(3-\gamma)} \sum_{k=0}^{n-1} b_k^{(\gamma)} [f(t_{n-k}) - 2f(t_{n-1-k}) + f(t_{n-2-k})] \quad (1.26)$$

con los coeficientes $b_k^{(\gamma)}$ definidos como sigue

$$b_k^{(\gamma)} = (k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}. \quad (1.27)$$

1.3. Funciones especiales

En las soluciones analíticas de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fraccionarias aparecen habitualmente ciertas funciones especiales. En esta sección se van a presentar dos de ellas: la función de Mittag-Leffler y la función H de Fox [7, 8].

1.3.1. Función de Mittag-Leffler

Lo correcto es hablar de funciones de Mittag-Leffler, pues existen dos tipos [7, 8, 9]. Un primer tipo sería la función de Mittag-Leffler propiamente dicha, $E_\alpha(z)$, que fue definida y estudiada por Mittag-Leffler en 1903:

$$E_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}, \quad \alpha \in C, \quad \Re(\alpha) > 0. \quad (1.28)$$

Se trata de una generalización directa de la serie exponencial pues para $\alpha = 1$ se reduce a la serie exponencial.

El segundo tipo es la función de Mittag-Leffler generalizada, $E_{\alpha,\beta}(z)$:

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad \alpha, \beta \in C, \quad \Re(\alpha) > 0, \quad \Re(\beta) > 0. \quad (1.29)$$

1.3.2. Función H de Fox

La función H de Fox [7, 8], $H(z)$, es una generalización de la función G de Meijer. Su nombre se debe a que fue Charles Fox quien realizó un detallado estudio de la misma en la década de los 60. La función denotada así:

$$H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{array}{c} [(a_p, \alpha_p)] \\ [(b_q, \beta_q)] \end{array} \right. \right] = H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{array}{c} (a_1, \alpha_1), \dots, (a_p, \alpha_p) \\ (b_1, \beta_1), \dots, (b_q, \beta_q) \end{array} \right. \right] \quad (1.30)$$

se define de forma integral de la siguiente manera:

$$H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{array}{c} (a_1, \alpha_1), \dots, (a_p, \alpha_p) \\ (b_1, \beta_1), \dots, (b_q, \beta_q) \end{array} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \phi(s) z^{-s} ds, \quad (1.31)$$

$$\phi(s) = \frac{\left\{ \prod_{j=1}^m \Gamma(b_j + \beta_j s) \right\} \left\{ \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j - \alpha_j s) \right\}}{\left\{ \prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j - \beta_j s) \right\} \left\{ \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j + \alpha_j s) \right\}}$$

donde $\alpha_1, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_q$ son números reales positivos (enteros, racionales o irracionales), los a_j y los b_j son, en general, cantidades complejas, i es la unidad imaginaria y el contorno L de integración separa los polos de $\Gamma(b_j + \beta_j s)$ con $j = 1, \dots, m$ de los polos correspondientes a $\Gamma(1 - a_j - \alpha_j s)$, con $j = 1, \dots, n$. Al igual que para la función G , se pueden dar tres caminos de integración L . Un conjunto simplificado de condiciones de existencia se puede dar en términos de los siguientes parámetros:

$$\mu = \sum_{j=1}^q \beta_j - \sum_{j=1}^p \alpha_j, \quad \beta = \left\{ \prod_{j=1}^q \alpha_j^{\alpha_j} \right\} \left\{ \prod_{j=1}^q \beta_j^{-\beta_j} \right\}. \quad (1.32)$$

La función H de Fox existe en los siguientes casos

$$\begin{aligned} (i) \quad & q \geq 1, \mu > 0, \forall z, z \neq 0, \\ (ii) \quad & q \geq 1, \mu = 0, \text{ para } |z| < \beta^{-1}, \\ (iii) \quad & p \geq 1, \mu < 0, \forall z, z \neq 0, \\ (iv) \quad & p \geq 1, \mu = 0, \text{ para } |z| > \beta^{-1}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

De la propia definición se siguen dos casos especiales que es interesante destacar. El primero se da cuando $\alpha_1 = 1 = \dots = \alpha_p = \beta_1 = 1 = \dots = \beta_q$, en cuyo caso la función H de Fox se reduce a la función G . El segundo, tiene lugar cuando todos los α_j y todos los β_j son racionales, de modo que, mediante una transformación adecuada, podemos llegar a la situación del primer caso en el que la función H de Fox se reduce a la función G .

1.3.3. Relación entre las funciones de Mittag-Leffler y la función H de Fox

Las funciones de Mittag-Leffler, tanto $E_\alpha(z)$ como $E_{\alpha,\beta}(z)$, pertenecen a la familia de las funciones H de Fox. En concreto, a partir de la representación de las funciones de Mittag-Leffler en términos de la integral de Mellin-Barnes y teniendo en cuenta la definición de la función H de Fox (1.31) se demuestra que

$$E_\alpha(z) = H_{1,2}^{1,1} \left[-z \left| \begin{array}{c} (0, 1) \\ (0, 1), (0, \alpha) \end{array} \right. \right] \quad (1.34)$$

y también se tiene que

$$E_{\alpha,\beta}(z) = H_{1,2}^{1,1} \left[-z \left| \begin{array}{c} (0, 1) \\ (0, 1), (1 - \beta, \alpha) \end{array} \right. \right]. \quad (1.35)$$

1.4. Métodos analíticos de resolución de FP-DE

Existen diversos métodos analíticos que permiten resolver ecuaciones en derivadas parciales fraccionarias (FPDE). Aunque en esta sección se van a

presentar los dos métodos que se emplean para obtener la solución analítica de las ecuaciones que aparecen en esta tesis, esto es, el método de separación de variables y el método de la transformada de Laplace, en la Ref. [9], por ejemplo, es posible encontrar otros procedimientos analíticos de resolución como pueden ser el método de la función de Green, el método de la transformada de Mellin, el método de las series de potencias o el método de cálculo simbólico de Babenko.

1.4.1. Método de Separación de Variables

El método de separación de variables [58] es una herramienta fundamental en el proceso de resolución de ecuaciones diferenciales homogéneas en derivadas parciales de orden entero y puede ser aplicado para resolver ciertas ecuaciones diferenciales fraccionarias en derivadas parciales. El método consiste en buscar una solución que sea un producto de funciones dependientes cada una de una sola de las variables independientes que intervienen en el problema.

Ilustraremos cómo se utiliza este método resolviendo un problema difusivo fraccionario fundamental:

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\gamma u &= k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(L, t) = 0 \end{cases} & \\ CI : u(x, 0) = f(x) & \end{aligned} \quad (1.36)$$

donde ${}_0^C D_t^\gamma u$ representa la derivada fraccionaria de orden γ de $u(x, t)$ según la definición de Caputo.

Como ya hemos mencionado anteriormente, comenzaremos por buscar soluciones de la forma

$$u(x, t) = v(x)\omega(t) \quad (1.37)$$

es decir, soluciones que son producto de funciones que dependen de una sola variable independiente. A las soluciones de esta forma y que además satisfacen las condiciones de contorno homogéneas se las denomina en ocasiones *soluciones fundamentales*. Una combinación lineal (superposición) cualquiera de soluciones fundamentales

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n v_n(x) \omega_n(t) \quad (1.38)$$

sigue siendo solución de la ecuación diferencial por ser ésta lineal y sigue satisfaciendo las condiciones de contorno, por ser homogéneas. A esta solución

se la denomina solución general. El objetivo es determinar las funciones $v_n(x)$, $\omega_n(x)$ y el valor de los coeficientes A_n que hacen que (1.38) sea solución de nuestro problema (1.36).

Las soluciones fundamentales de nuestro problema se calculan procediendo de modo análogo a como se hace en el caso de la ecuación diferencial ordinaria. Para ello, se sustituye $u(x, t) = v(x)\omega(t)$ en la ecuación diferencial

$$v(x) {}_0^C D_t^\gamma \omega(t) = k\omega(t) \frac{d^2 v(x)}{dx^2} \quad (1.39)$$

y se agrupan en cada lado de la igualdad las funciones que dependan de una variable dada

$$\frac{1}{k\omega(t)} {}_0^C D_t^\gamma \omega(t) = \frac{1}{v(x)} \frac{d^2 v(x)}{dx^2}. \quad (1.40)$$

Se puede observar que en cada miembro se obtiene una expresión que depende únicamente de una variable, es decir, se han *separado las variables*. El único modo de que (1.40) se satisfaga para cada uno de los valores de x y de t es que ambos miembros sean iguales a una constante, que siguiendo la tradición, vamos a llamar $-\lambda$

$$\frac{1}{k\omega(t)} {}_0^C D_t^\gamma \omega(t) = \frac{1}{v(x)} \frac{d^2 v(x)}{dx^2} = -\lambda. \quad (1.41)$$

En resumen, las funciones $v(x)$ y $\omega(t)$ que forman las soluciones fundamentales han de verificar las siguientes dos ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \frac{d^2 v(x)}{dx^2} &= -\lambda v(x), \\ {}_0^C D_t^\gamma \omega(t) &= -\lambda k\omega(x). \end{aligned} \quad (1.42)$$

Al igual que en el caso de la ecuación difusiva normal (no fraccionaria) la resolución de la primera de las dos ecuaciones, teniendo en cuenta que se han de verificar las condiciones de contorno que aparecen en (1.36), implica resolver un problema de Sturm-Liouville cuya solución es

$$\begin{aligned} v_n(x) &= C_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right), \\ \lambda &= \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (1.43)$$

siendo C_n una constante arbitraria. Nótese que el problema de Sturm-Liouville no tiene solución distinta de la trivial para $\lambda \leq 0$ por lo que necesariamente $\lambda > 0$.

En cuanto a la segunda de las dos ecuaciones de (1.42), si en el problema clásico sus soluciones son exponenciales de la forma $\omega_n(t) = T_0 e^{-\lambda kt}$ con $\lambda > 0$, en el problema fraccionario la función exponencial cede su lugar a la función de Mittag-Leffler de orden γ , $E_\gamma(z)$, siendo $z = -\lambda kt^\gamma$. Obviamente, el valor de λ es el que se ha visto anteriormente en (1.43). Esto permite escribir la solución general en la forma

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) E_\gamma \left(-\frac{kn^2\pi^2 t^\gamma}{L^2} \right). \quad (1.44)$$

Los coeficientes A_n han de elegirse cuidadosamente de modo que se satisfaga la condición inicial que aparece en (1.36), esto es

$$u(x, t = 0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) = f(x). \quad (1.45)$$

Dicho de otra manera, los coeficientes A_n son los coeficientes del desarrollo en serie de Fourier de la función $f(x)$.

Un caso particularmente sencillo sería aquel en el que $f(x) = \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$. En tal caso, el sumatorio quedaría reducido al primer término y la solución de la ecuación difusiva fraccionaria sería simplemente

$$u(x, t) = \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) E_\gamma \left(-\frac{k\pi^2 t^\gamma}{L^2} \right) \quad (1.46)$$

que para el caso en el que elegimos $L = \pi$ y $k = 1$ se reduce a

$$u(x, t) = \operatorname{sen}(x) E_\gamma(-t^\gamma). \quad (1.47)$$

Haremos buen uso de este resultado en el capítulo 2.

Para poder utilizar este método, es preciso que la ecuación sea lineal y las condiciones de contorno homogéneas. De no ser así, se tiene que hacer un cambio de función en el problema de partida que proporcione un nuevo problema con condiciones de frontera homogéneas.

El método, no obstante, tiene sus limitaciones. La presencia de derivadas cruzadas, de coeficientes no constantes o de condiciones de frontera que no pueden ser expresadas con variables separadas no permiten su utilización, al menos no sin hacer las oportunas transformaciones.

1.4.2. Método de la Transformada de Laplace

En este método se utiliza la fórmula clásica para la transformada de Laplace de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville [9]

$$\int_0^{\infty} e^{-st} {}_0D_t^{\gamma} f(t) dt = s^{\gamma} F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \left[{}_0D_t^{\gamma-k-1} f(t) \right]_{t=0} \quad (1.48)$$

$$n-1 < \gamma \leq n$$

o para la derivada fraccionaria de Caputo

$$\int_0^{\infty} e^{-st} {}_0^C D_t^{\gamma} f(t) dt = s^{\gamma} F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\gamma-k-1} f^{(k)}(0) \quad (1.49)$$

$$n-1 < \gamma \leq n$$

donde $F(s)$ es la transformada de Laplace de la función $f(t)$.

Este procedimiento es muy adecuado para resolver tanto ecuaciones diferenciales fraccionarias lineales ordinarias y ecuaciones diferenciales fraccionarias lineales en derivadas parciales como ecuaciones diferenciales fraccionarias secuenciales (con dos o más derivadas fraccionarias aplicadas sucesivamente a la función $f(t)$ objeto de determinación).

1.5. Métodos en Diferencias Finitas para FP-DE

Obtener la solución analítica de una ecuación diferencial fraccionaria no siempre es factible. Es más, en muchas ocasiones esta solución analítica es en realidad una aproximación, por cuanto nos quedamos con la suma parcial de una serie que puede converger lentamente. En consecuencia, dado que no siempre es posible hallar la solución analítica, resulta de extrema utilidad disponer de métodos aproximados que permitan resolver numéricamente nuestras ecuaciones. Existen dos grandes familias de métodos numéricos: los métodos de elementos finitos y los métodos en diferencias finitas.

En el método de elementos finitos el problema se encuentra definido en un espacio geométrico o dominio, que es subdividido en un número de regiones pequeñas formando una especie de red o malla (mesh), no existiendo ninguna prescripción sobre la forma de cada una de estas subdivisiones. El desarrollo del método exige una reformulación del problema en forma variacional. En el método de diferencias finitas, también se subdivide el dominio de definición en regiones más pequeñas que conforman una malla, pero, en lugar de recurrir

a una reformulación variacional del problema, se aproximan los operadores integro-diferenciales que aparecen en la ecuación mediante fórmulas en diferencias finitas y estas cantidades finitas se evalúan sobre cada uno de los nodos del retículo o malla considerado. El proceso mediante el cual la ecuación diferencial se convierte en una ecuación en diferencias se denomina discretización.

El método de diferencias finitas es intuitivo, directo y fácil de implementar, requiere, en general, una menor cantidad de trabajo computacional que el método de elementos finitos y puede ser extendido fácilmente a problemas multidimensionales. Para cada derivada ordinaria (primera, segunda,...) existen distintas fórmulas de aproximación en diferencias finitas y cada una de ellas tiene su error de aproximación característico. El hecho de elegir una fórmula u otra influirá en las características del algoritmo resultante por lo que, antes de desarrollar cualquier esquema numérico, es necesario especificar qué fórmula en diferencias finitas se va a utilizar. Por ejemplo, si disponemos de dos fórmulas en diferencias con distinto orden de error para aproximar un mismo operador, el empleo de una o de otra daría lugar a algoritmos numéricos distintos.

Asimismo, dependiendo de la elección de unas u otras fórmulas en diferencias finitas para discretizar los distintos operadores diferenciales (sean éstos de orden entero o fraccionario) presentes en la ecuación, el algoritmo resultante puede ser explícito o implícito lo que tiene consecuencias en cuanto a la simplicidad del esquema numérico y la subsiguiente facilidad de computación. Así, mientras que en un algoritmo explícito típico, construido sobre la base de un discretizado espacio-temporal, el valor de la solución en un nodo para un instante de tiempo dado depende explícitamente de los valores ya conocidos de las soluciones para distintos nodos en el instante previo, en el caso de un algoritmo implícito tal dependencia no es posible, pues la solución en un nodo para un instante dado depende de las soluciones (desconocidas) en otros nodos para ese mismo instante. El conjunto formado por todas las ecuaciones correspondientes a los distintos nodos en cada instante más las condiciones de frontera, constituye un sistema de ecuaciones lineales cuya resolución conlleva un coste computacional mayor que en el caso explícito. Para los métodos implícitos que se consideran en esta tesis, los sistemas de ecuaciones resultantes son tridiagonales.

1.6. Repaso bibliográfico

Antes de proceder al desarrollo de los contenidos propios de esta tesis, se hará un breve recorrido por algunas de las contribuciones realizadas en el

campo del Cálculo Fraccionario y sus aplicaciones a lo largo de los últimos años. Dado que se trata de un área de investigación muy activa, el número de trabajos desarrollados es enorme y ha experimentado un crecimiento exponencial. No obstante, este repaso bibliográfico es breve, y en consecuencia, no puede ni pretende ser exhaustivo. Aquí sólo se recogen las referencias que han resultado más útiles, interesantes o instructivas para la confección de esta memoria.

Como ya se ha comentado en la introducción, el análisis fraccionario es aplicable a prácticamente todas las disciplinas científicas. Así, por ejemplo, se han producido trabajos en cinética de reacción en medios subdifusivos [20, 21, 22], en el campo de la Teoría de Control [28, 29, 30], en el área de los mercados financieros [23, 38] o en Medicina, donde las aplicaciones son múltiples y van desde el análisis de imágenes [24], hasta el estudio de la electrodifusión de iones en las neuronas [26, 27]. En el ámbito de la fundamentación teórica, Podlubny [13] propuso una novedosa interpretación física para la integración y la derivación fraccionarias basada en dos clases de tiempo (un tiempo cósmico y otro tiempo individual) y establece conexiones entre este modelo y ciertas ideas empleadas en la teoría de la relatividad.

El libro coordinado por Klafter, Lim y Metzler [31] constituye un interesante repaso por los avances más significativos en el campo de la dinámica fraccionaria tanto para sistemas clásicos (difusión anómala, difusión estocástica, reacciones en medios subdifusivos, transporte anómalo en presencia de vuelos truncados de Lévy, ecuación de Langevin fraccionaria) como para sistemas cuánticos (principios de la mecánica cuántica fraccionaria, dinámica cuántica fraccionaria, efecto Casimir asociado con un campo de Klein-Gordon fraccionario).

La difusión anómala está asimismo presente en otros muchos fenómenos como el transporte de carga en semiconductores amorfos [33], la difusometría de resonancia magnética nuclear [36], el transporte en geometrías fractales [39], la descripción de la dinámica de una gota en una red polimérica [41], la reología de polímeros [34], la cinética de reacción de proteínas [35] o la difusión turbulenta de Richardson en base a la estadística de Lévy [42].

Puesto que la presente tesis está dedicada al desarrollo y estudio de métodos numéricos en diferencias finitas para la resolución de ecuaciones difusivas fraccionarias, resulta de especial interés hacer un recorrido por algunos de los numerosos trabajos relativos tanto a ecuaciones fraccionarias como a métodos numéricos para la resolución de las mismas.

Diethelm et al. han recopilado en [32] una colección de algoritmos numéricos de aplicación a un variado número de problemas en áreas como la viscoelasticidad, la electroquímica o los procesos subdifusivos. En la misma línea, Li y Zeng [10] hicieron un repaso por los distintos métodos en dife-

rencias finitas disponibles para la resolución de ecuaciones diferenciales fraccionarias.

El campo de las ecuaciones diferenciales ordinarias fraccionarias es extraordinariamente amplio y en él se estudian problemas de convergencia y estabilidad, generalmente para condiciones iniciales, como es el caso de los trabajos de Lubich [47], Diethelm [48] y Ford y Connolly [49], aunque también se abordan problemas de contorno, como se puede comprobar en los trabajos de Benchohra et al. [50], Ford y Morgado [51] y Stynes y Gracia [52]. Ciesielski y Leszczynski [18] trabajaron en soluciones numéricas para la ecuación diferencial ordinaria en una dimensión con derivada fraccionaria de Riesz-Feller. Diethelm, Ford y Freed [53] elaboraron un método predictor-corrector siguiendo el modelo de Adams para resolver ecuaciones con derivadas fraccionarias temporales, introduciendo diversas modificaciones sobre el algoritmo original. Garrappa [54] recoge distintas aproximaciones que permiten generalizar la aplicación del método de los trapecios a la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias fraccionarias discutiendo aspectos tanto teóricos como computacionales. También hay un importante número de trabajos sobre sistemas de ecuaciones diferenciales fraccionarias. Cabe citar aquí, a modo de ejemplo representativo, el de Ahmad y Nieto [55] en el que se estudia un sistema de dos ecuaciones diferenciales fraccionarias no lineales con una condición de frontera de tres puntos.

La bibliografía relativa a ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fraccionarias es asimismo abundante y abarca una casuística muy variada, que va desde las ecuaciones fraccionarias de orden distribuido hasta las ecuaciones bifraccionarias o las ecuaciones difusivas fraccionarias en \mathcal{R}^n . Un buen ejemplo de trabajo relativo a ecuaciones de orden distribuido es el artículo de Mainardi et al. [56] en el que se estudia la ecuación difusiva con derivada temporal fraccionaria de orden distribuido proporcionando la solución general para este tipo de ecuaciones y analizando con más detalle el caso correspondiente a un orden uniformemente distribuido y el caso en el que se tienen dos órdenes distintos. Como trabajo sobre ecuaciones difusivas fraccionarias en \mathcal{R}^n cabe citar el de Bonforte y Vázquez [57] en el que se investigan propiedades de las soluciones no negativas de una ecuación difusiva fraccionaria no lineal considerada en un dominio acotado. Kilbas et al. determinaron en [90] la solución de una ecuación diferencial bifraccionaria mediante el empleo de las transformadas de Laplace y de Fourier.

En el campo específico de la resolución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fraccionarias la producción bibliográfica es muy extensa. Se han desarrollado multitud de métodos en diferencias finitas, tanto implícitos como explícitos, e incluso algunos de corte más original como el método de líneas de Liu, Anh y Turner [17] para ecuaciones con

derivadas fraccionarias en el espacio, que mantiene intactas las derivadas temporales y discretiza las derivadas fraccionarias espaciales transformando así una ecuación diferencial en derivadas parciales en una ecuación diferencial ordinaria. O como el método de media ponderada en diferencias finitas para ecuaciones difusivas fraccionarias de Yuste [62] donde para cierto parámetro de ponderación se obtiene un método implícito que es una generalización del método de Crank-Nicolson para ecuaciones diferenciales ordinarias. También es digno de mención el método estable de orden $2-\gamma$ en el tiempo ($0 \leq \gamma < 1$) para resolver la ecuación difusiva con derivada temporal fraccionaria desarrollado por Lin y Xu [63]. El método combina un esquema en diferencias finitas en el tiempo con el empleo de un método espectral de Legendre para la coordenada espacial.

Una parte fundamental de todos los trabajos sobre resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales fraccionarias es el análisis de convergencia y de estabilidad de los algoritmos desarrollados. En referencia a la estabilidad, Sousa [64] puso de manifiesto las limitaciones de los análisis de Von Neumann y, en menor medida, del análisis espectral para recoger la influencia de las condiciones de contorno en la estabilidad de los algoritmos, poniendo en valor el método de Lax que sí es capaz de proporcionar información al respecto aunque no permita una obtención sencilla de las condiciones para la estabilidad.

Sobre métodos explícitos para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fraccionarias merece la pena mencionar algunos trabajos que han sido fundamentales en la elaboración de esta memoria. Así, cabe destacar el artículo de Gorenflo et al. [65] en el que se implementa un método explícito en diferencias finitas para resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria; el trabajo de Yuste y Acedo [66] donde se desarrolla un algoritmo explícito para la ecuación subdifusiva fraccionaria y se plantea, siguiendo el método de Von Neumann para ecuaciones diferenciales ordinarias, un nuevo procedimiento para la determinación de las condiciones de estabilidad de dicho esquema numérico que fue posteriormente utilizado para estudiar la estabilidad del método de media ponderada desarrollado en [62]; el artículo de Liu et al. [67] sobre un esquema explícito en diferencias finitas para resolver la ecuación difusiva con derivada temporal fraccionaria en el que se estudian las restricciones para la estabilidad y la convergencia de la aproximación discreta de camino aleatorio no markoviano para dicha ecuación en un dominio acotado; el trabajo de Shen y Liu [71] sobre el análisis del error de un esquema explícito para la resolución de la ecuación difusiva fraccionaria espacial sobre un dominio con extremos aislados; los artículos de Yuste y Quintana [72, 73] que desarrollan distintos algoritmos explícitos para resolver la ecuación fraccionaria de subdifusión y la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria unidi-

mensionales, estableciendo una comparación de las precisiones de los distintos esquemas y llevando a cabo un análisis de estabilidad de los mismos conforme al procedimiento de Von Neumann-Fourier. Abundando en el estudio de los métodos explícitos, Yuste y Quintana han desarrollado un algoritmo explícito en diferencias finitas para la resolución de la ecuación de cable con derivada temporal fraccionaria [74]. La estabilidad del algoritmo se analiza siguiendo un procedimiento de tipo Von Neumann. Gorenflo y Abdel-Rehim [75] han llevado a cabo un estudio de la convergencia del esquema explícito de Grünwald-Letnikov para la ecuación difusiva unidimensional con derivada temporal fraccionaria.

Los métodos implícitos para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fraccionarias han sido profusamente desarrollados, no sólo para resolver la ecuación difusiva fraccionaria sino para obtener la solución de otro tipo de ecuaciones de mayor complejidad. De este modo, Liu et al. [68] desarrollaron un método implícito para resolver la ecuación bifraccionaria con derivadas fraccionarias tanto en el tiempo como en el espacio, demostrando la convergencia y la estabilidad incondicional de dicho método. Meerschaert y Tadjeran [69, 70] estudiaron la ecuación fraccionaria de advección-dispersión con coeficientes variables y desarrollaron métodos para resolver ecuaciones con la derivada fraccionaria unidimensional en el espacio, tanto si está definida por la izquierda como si lo está por la derecha. Langlands y Henry [76] investigaron la estabilidad y la precisión de un esquema implícito para resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria construido a partir de la aproximación L1. Más recientemente, Shen et al. [77] han propuesto sendos métodos, explícito e implícito, para la resolución aproximada de la ecuación fraccionaria de advección-dispersión y han analizado la convergencia y la estabilidad de los mismos. Chen et al [78] aplicaron un análisis de estabilidad de tipo Fourier sobre un esquema implícito desarrollado para resolver una ecuación diferencial con derivadas parciales fraccionarias, analizando su convergencia. Igualmente [79] desarrollaron tres aproximaciones implícitas con las que resolver la ecuación de Fokker-Planck demostrando su estabilidad incondicional y su convergencia. Zhuang et al. [80] presentaron un esquema implícito para resolver la ecuación de Fokker-Planck con derivada temporal fraccionaria demostrando su estabilidad incondicional y su convergencia. Ding, Xiao y Li [81], emplearon un método de media ponderada en diferencias finitas para resolver una clase de ecuaciones diferenciales con derivada fraccionaria espacial y coeficientes variables en el espacio. Como es habitual en este tipo de estudios, se demuestra la estabilidad incondicional y se estudia la convergencia del algoritmo. Hu y Zhang [82] plantearon dos esquemas implícitos compactos para la resolución de la ecuación de cable realizando un estudio de la estabilidad del primero de ellos así como de la precisión de ambos.

Gao y Sun [83] elaboraron un esquema compacto para resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria, aplicando la discretización L1 para la derivada fraccionaria temporal y empleando una discretización compacta de cuarto orden para la derivada espacial segunda. El algoritmo resultante es incondicionalmente estable y su convergencia es también analizada. Gao, Sun y Zhang [84] desarrollaron una nueva discretización mejorada alternativa a la L1 que han dado en llamar L1-2. En el artículo se demuestra que el error asociado a la fórmula L1-2 es netamente inferior y, mediante el análisis de los tiempos de CPU, se comprueba asimismo que la discretización L1-2 genera un algoritmo computacionalmente más eficaz.

En el capítulo 3 de esta tesis se desarrollan métodos adaptativos para la ecuación difusiva fraccionaria unidimensional. Los algoritmos adaptativos precisan para su implementación de esquemas de discretizado no uniforme cuyo peso en la bibliografía es más bien escaso en comparación con el de los métodos de discretizado uniforme. Este hecho pone aún más de relieve lo novedoso de los algoritmos adaptativos desarrollados en esta memoria. No obstante, es posible encontrar trabajos de relevancia en los que se implementan métodos de discretizado no uniforme. Así, Podlubny et al. [85, 86] desarrollaron una aproximación de tipo matricial para resolver ecuaciones diferenciales con derivadas parciales fraccionarias en el tiempo y en el espacio. La idea central del modelo consiste en disponer un discretizado constituido por una serie de nodos de forma que las soluciones en cada uno de ellos, tanto para el tiempo como para la posición, se determinan simultáneamente con la ayuda de un sistema lineal auxiliar. El artículo aporta la implementación del método en MATLAB. Mustapha [87] trabajó con un método implícito para la ecuación subdifusiva fraccionaria construido mediante la combinación de un método en diferencias finitas para la derivada temporal y un discretizado en elementos finitos para la variable espacial que, en esencia, es una generalización del método de Crank-Nicolson. Asimismo, se demuestra la estabilidad del esquema resultante. En [88] Mustapha y Al-Mutawa abordaron el estudio de una ecuación subdifusiva anómala. Ikeda [117] implementó una aproximación para la integral de Riemann-Liouville (extensible igualmente a la derivada de Riemann-Liouville) calculada sobre una discretización no homogénea del tiempo de modo que cada paso temporal es menor que el anterior. Cuesta, Lubich y Palencia [118] plantearon y estudiaron un método de cuadratura de convolución para discretizar en el tiempo ecuaciones difusivo-ondulatorias fraccionarias. Yuste y Quintana [119] desarrollaron un algoritmo de paso variable para la ecuación subdifusiva fraccionaria con derivada de Caputo y plantearon un método adaptativo para obtener la solución de un problema subdifusivo unidimensional en un dominio no acotado. De igual modo, Quintana y Yuste [120] plantearon un

método adaptativo para resolver tanto la ecuación subdifusiva fraccionaria como la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria en una dimensión.

Capítulo 2

Métodos Explícitos

En este capítulo se estudiarán ciertos métodos explícitos con discretizado uniforme. Estos métodos son fáciles de implementar y de generalizar a dimensiones espaciales mayores que uno, se pueden aplicar a una gran variedad de problemas y tienen unos requerimientos computacionales poco exigentes, pero presentan una importante limitación derivada del hecho de que para ciertos valores de los parámetros que determinan el tamaño del discretizado se tornan inestables. Por este motivo, la presencia de los métodos explícitos en la bibliografía es escasa en comparación con la de los métodos implícitos. En esta memoria vamos a desarrollar un estudio comparado de distintos algoritmos explícitos atendiendo tanto a sus precisiones como a sus límites de estabilidad.

En la primera parte de este capítulo se van a desarrollar seis métodos explícitos procedentes de diferentes discretizaciones de la derivada temporal fraccionaria y se van a comparar tanto sus precisiones como sus límites de estabilidad. Para el análisis de estabilidad se empleará un procedimiento de tipo Von Neumann-Fourier. Los algoritmos numéricos se aplicarán a la resolución de ecuaciones subdifusivas fraccionarias y ecuaciones difusivo-ondulatorias fraccionarias unidimensionales. Dado que el carácter fraccionario de las ecuaciones consideradas radica en la derivada temporal mientras que la derivada espacial es de orden entero, podemos limitar nuestro estudio al caso unidimensional, más sencillo, sin menoscabo de la validez de los resultados relativos a la precisión y la estabilidad de los algoritmos implementados. De igual modo, se eligen condiciones de contorno absorbentes y condiciones iniciales que faciliten la obtención de una solución analítica. Tampoco se considera, en principio, la presencia de un término fuente en las ecuaciones, pues el interés radica en estudiar la precisión y la estabilidad intrínsecas a los algoritmos desarrollados sin tener en cuenta las variaciones en estos parámetros que puedan derivarse de la presencia de un término fuente. No obstante, en

la Sec. 2.1.1.5 se estudiará cómo depende el error numérico del tamaño de la discretización para un caso con término fuente y para otro con condiciones de contorno no homogéneas, a fin de comprobar que esta dependencia es realmente la misma que la que se da en el problema con condiciones de contorno absorbentes y sin término fuente.

En la segunda parte de este capítulo se desarrollará un algoritmo explícito [74] para resolver la ecuación fraccionaria de cable, también llamada ecuación de Cattaneo, en una dimensión. En este caso, a diferencia de los anteriores, la ecuación presenta no una, sino dos derivadas temporales fraccionarias, en general de distinto orden. Este hecho, como veremos, tiene implicaciones directas sobre la estabilidad del esquema numérico.

2.1. Métodos explícitos para la ecuación subdifusiva fraccionaria

En esta sección vamos a resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria unidimensional sin término fuente mediante distintos algoritmos numéricos explícitos. Puesto que la derivada temporal fraccionaria puede venir definida tanto en el sentido de Caputo como en el de Riemann-Liouville, se comenzará demostrando la equivalencia entre la ecuación subdifusiva fraccionaria con derivada de Caputo

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 0 < \gamma < 1 \quad (2.1)$$

y la ecuación subdifusiva fraccionaria planteada en términos de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville [66]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = K_\gamma {}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 0 < \gamma < 1. \quad (2.2)$$

La demostración es relativamente sencilla. Para $0 < \gamma < 1$ se tienen las siguientes relaciones [83]

$${}_0 D_t^{\gamma-1} (f'(t)) = {}_0 D_t^\gamma f(t) - \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)} f(0) = {}_0^C D_t^\gamma f(t) \quad (2.3)$$

$${}_0 D_t^{-\gamma} ({}_0 D_t^\gamma f(t)) = f(t) - \left[{}_0 D_t^{\gamma-1} f(t) \right]_{t=0} \frac{t^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} \quad (2.4)$$

donde ${}_0 D_t^{-\gamma}$ denota la integral fraccionaria de Riemann-Liouville de orden γ

$${}_0 D_t^{-\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\gamma}} d\tau. \quad (2.5)$$

Dada una función $f(t)$ continuamente diferenciable en el intervalo $[0, t]$, para $0 < \gamma < 1$ se verifica la siguiente relación:

$$\begin{aligned} {}_0D_t^{-\gamma} f(t)|_{t=0} &= \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\gamma}} d\tau = \\ & \lim_{t \rightarrow 0^+} \left[\frac{t^\gamma}{\Gamma(1+\gamma)} f(0) + \frac{1}{\Gamma(1+\gamma)} \int_0^t f'(\tau)(t-\tau)^\gamma d\tau \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

De esta manera, a partir de (2.2) se tiene que

$${}_0D_t^{\gamma-1} \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right) = {}_0D_t^{\gamma-1} \left\{ K_\gamma {}_0D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right\} \quad (2.7)$$

y haciendo uso de las relaciones (2.3) y (2.4) y simplificando, la ecuación (2.7) queda de la siguiente forma

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \left\{ {}_0D_t^{-\gamma} \left[K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right] \right\}_{t=0} \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)}. \quad (2.8)$$

Si $u(x, t) \in C_{x,t}^{2,1}([a, b] \times [0, T])$ a partir de (2.6) se concluye que

$$\left\{ {}_0D_t^{-\gamma} \left[K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right] \right\}_{t=0} = 0 \quad (2.9)$$

de modo que (2.10) es la ecuación subdifusiva fraccionaria con derivada de Caputo, esto es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.10)$$

Como viene siendo habitual cuando se implementan métodos en diferencias finitas, se comenzará por considerar un retículo o malla en la región espacio-temporal en la que se quiere obtener la estimación numérica $U_j^{(m)}$ de la solución exacta $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$, siendo (x_j, t_m) las coordenadas del nodo (j, m) del retículo. A tal fin, se va a proceder del modo siguiente:

- Dividimos el sistema unidimensional en partes iguales de longitud Δx , de modo que $x_j = j\Delta x$.
- Consideramos m instantes de duración Δt , de modo que $t_m = m\Delta t$.
- Definimos $U_j^{(m)}$ como la aproximación numérica del valor $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$, esto es, $U_j^{(m)} \simeq u(x_j, t_m)$.

- Sustituimos las derivadas, tanto las fraccionarias como las de orden entero, por sus correspondientes aproximaciones en términos de diferencias finitas.

Dada una ecuación subdifusiva fraccionaria sin término fuente del tipo que se muestra en (2.1) o equivalentemente en (2.2), será conveniente en ocasiones escribirla en forma simplificada como

$$\partial u = 0 \quad (2.11)$$

siendo $\partial \equiv {}_0^C D_t^\gamma - K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ para (2.1) o bien $\partial \equiv \frac{\partial}{\partial t} - {}_0 D_t^{1-\gamma} \left(K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)$ para (2.2).

La idea es reemplazar el operador continuo ∂ por un operador en diferencias δ y un error de truncamiento $T(x, t)$, esto es $\partial u \equiv \delta u + T$. De acuerdo con este procedimiento se van a desarrollar tres métodos explícitos para resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria. En la Sec. 2.1.1 se va a estudiar el método que se ha denominado como Yuste-Acedo. Se comenzará desarrollando el algoritmo explícito y seguidamente se hará un análisis de su error de truncamiento. A continuación, se determinará el límite de estabilidad y se demostrará la convergencia del esquema. Finalmente, se desarrollará un análisis numérico del error determinando la precisión del método cuando se aplica a la resolución de un problema sencillo pero representativo (si bien en la Sec. 2.1.1.5 se estudia la dependencia del error con el tamaño del discretizado para un par de problemas adicionales). En la Sec. 2.1.2 se comenzará desarrollando el algoritmo explícito que se ha denominado GMCP y a continuación se demostrará la equivalencia entre el algoritmo de Yuste-Acedo y el del método GMCP cuando se utiliza la discretización BDF1. En la Sec. 2.1.3 se va a estudiar el método que se ha denominado L1. Se empezará desarrollando el algoritmo explícito y seguidamente se hará un análisis de su error de truncamiento. A continuación, se determinará el límite de estabilidad y se demostrará la convergencia del esquema. Finalmente se desarrollará un estudio numérico del error determinando la precisión del método cuando se aplica a la resolución de un problema sencillo pero representativo. En la Sec. 2.1.4 se realizará una comparación tanto de la precisión como de la estabilidad de los tres algoritmos.

A fin de llevar a cabo el chequeo numérico de los límites de estabilidad de los algoritmos estudiados así como el análisis de sus precisiones y su ulterior comparación en la Sec. 2.1.4 se considerará, como ya se ha mencionado más arriba, un ejemplo sencillo pero representativo. De este modo, se plantea un problema con condiciones de contorno (CC) absorbentes y condición inicial (CI) $u(x, 0) = \sin x$ pues, con tales condiciones, la solución analítica es

particularmente simple. Además, atendiendo a la CI considerada, resulta conveniente elegir $x \in [0, \pi]$. En consecuencia, el ejemplo que se va a considerar es

$${}^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 0 < \gamma < 1 \quad (2.12a)$$

$$CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(\pi, t) = 0 \end{cases} \quad (2.12b)$$

$$CI : u(x, 0) = \text{sen } x \quad (2.12c)$$

donde ${}^C D_t^\gamma u(x, t)$ es la derivada de Caputo de orden γ de $u(x, t)$, o bien este otro, equivalente

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = K_\gamma {}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 0 < \gamma < 1 \quad (2.13a)$$

$$CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(\pi, t) = 0 \end{cases} \quad (2.13b)$$

$$CI : u(x, 0) = \text{sen } x \quad (2.13c)$$

donde ${}_0 D_t^{1-\gamma} u(x, t)$ es la derivada de Riemann-Liouville de orden $1 - \gamma$ de $u(x, t)$.

La solución analítica para ambos problemas es

$$u(x, t) = E_\gamma(-K_\gamma t^\gamma) \cdot \text{sen } x. \quad (2.14)$$

En los cálculos numéricos siempre se considerará $K_\gamma = 1$.

2.1.1. Método de Yuste-Acedo

El nombre elegido para designar este método tiene su origen en el hecho de que fue propuesto por S.B. Yuste y L. Acedo [66].

El desarrollo del algoritmo Yuste-Acedo parte de la ecuación subdifusiva fraccionaria planteada en términos de la derivada de Riemann-Liouville [66]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = K_\gamma {}_0 D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 0 < \gamma < 1. \quad (2.15)$$

Si se discretiza la derivada primera en el tiempo y la derivada espacial segunda, la ecuación queda en la forma

$$\begin{aligned} \frac{u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)}{\Delta t} &= K_\gamma {}_0 \delta_t^{1-\gamma} \frac{u(x_{j-1}, t_m) - 2u(x_j, t_m) + u(x_{j+1}, t_m)}{(\Delta x)^2} \\ &\quad + T(x_j, t_m) \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $T(x_j, t_m)$ es el error de truncamiento en el punto (x_j, t_m) y ${}_0\delta_t^{1-\gamma}$ se define como

$${}_0\delta_t^{1-\gamma}u(x_j, t_m) = \frac{1}{(\Delta t)^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} u(x_j, t_{m-k}). \quad (2.17)$$

Si se inserta en (2.16) la discretización de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville dada en (2.17), se desprecia el error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ y se reordenan los términos, se obtiene finalmente el siguiente esquema explícito:

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \quad (2.18)$$

donde $S_\gamma = K_\gamma \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2}$. Por simplicidad en la notación, cuando en el texto se haga alusión a valores numéricos concretos de S_γ se escribirá simplemente S . En la Sec. 2 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para este algoritmo aplicado a la resolución del problema (2.13).

Asimismo, debe quedar establecido que en nuestros cálculos vamos a trabajar con los coeficientes $\omega_k^{(1-\gamma)}$ de la aproximación BDF1 que vienen dados por la relación de recurrencia (1.18)

$$\omega_0^{(\gamma)} = 1, \quad \omega_k^{(\gamma)} = \left(1 - \frac{\gamma + 1}{k} \right) \omega_{k-1}^{(\gamma)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

A continuación se va a estudiar el error de truncamiento.

2.1.1.1. Error de Truncamiento

El error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ en el punto (x_j, t_m) es [véase (2.16)]

$$T(x_j, t_m) = \frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} - K_\gamma {}_0\delta_t^{1-\gamma} \frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} \quad (2.20)$$

donde se ha simplificado la notación escribiendo $u(x_j, t_m)$ como $u_j^{(m)}$. Pero por otra parte se sabe que

$$\frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} = u_t + \frac{1}{2} u_{tt} \Delta t + O[(\Delta t)^2] \quad (2.21)$$

siendo $u_t \equiv \left. \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \right|_{t=t_m}$ y $u_{tt} \equiv \left. \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} \right|_{t=t_m}$ y también se sabe que

$$\begin{aligned}
{}_0\delta_t^{1-\gamma} \left[u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)} \right] &= \frac{1}{(\Delta t)^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left[u_{xx} + \frac{1}{12} u_{xxxx} (\Delta x)^2 + \dots \right] \\
&+ O[(\Delta t)^p] \tag{2.22}
\end{aligned}$$

siendo $u_{xx} \equiv \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j}$ y $u_{xxxx} \equiv \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} \Big|_{x=x_j}$.

Así que, teniendo en cuenta que $u(x, t)$ es la solución exacta de la ecuación (2.15), se obtiene finalmente a partir de (2.20), (2.21) y (2.22) el siguiente resultado

$$\begin{aligned}
T(x_j, t_m) &= O[(\Delta t)^p] + \frac{1}{2} u_{tt} \Delta t - \frac{K_\gamma (\Delta x)^2}{12} {}_0D_t^{1-\gamma} u_{xxxx} + \dots \\
&= O[(\Delta t)^p] + O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \tag{2.23}
\end{aligned}$$

Como hemos elegido la discretización BDF1, para la cual $p = 1$, podemos concluir que

$$T(x_j, t_m) = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \tag{2.24}$$

2.1.1.2. Análisis de Estabilidad

Para llevar a cabo el análisis de estabilidad del esquema explícito dado en (2.18) se emplea un procedimiento de tipo Von Neumann desarrollado por S.B. Yuste en [66, 62]. Sean $\hat{U}_j^{(k)}$ y $U_j^{(k)}$ soluciones numéricas de (2.18) en el punto (x_j, t_k) que se diferencian inicialmente por una cantidad pequeña, la perturbación, $e_j^{(0)}$. Se define entonces $e_j^{(k)}$ de la siguiente manera:

$$e_j^{(k)} = \hat{U}_j^{(k)} - U_j^{(k)} . \tag{2.25}$$

En tal caso, el algoritmo (2.18) da lugar al siguiente esquema explícito que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$e_j^{(m+1)} = e_j^{(m)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left(e_{j+1}^{(m-k)} - 2e_j^{(m-k)} + e_{j-1}^{(m-k)} \right) . \tag{2.26}$$

A continuación, se escribe $e_j^{(k)}$ como una combinación de modos subdifusivos, $e_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.26) $e_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $e_j^{(m+1)}$, $e_{j-1}^{(m)}$ y $e_{j+1}^{(m)}$ por sus expresiones homólogas, se obtiene

$$\zeta_{m+1}e^{iqj\Delta x} = \zeta_m e^{iqj\Delta x} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \zeta_{m-k} (e^{iq(j-1)\Delta x} - 2e^{iqj\Delta x} + e^{iq(j+1)\Delta x}) \quad (2.27)$$

expresión que simplificada queda en la forma

$$\zeta_{m+1} = \zeta_m + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \zeta_{m-k} (e^{-iq\Delta x} - 2 + e^{iq\Delta x}) \quad (2.28)$$

asumiendo que

$$\zeta_{m+1} = \xi \zeta_m \quad (2.29)$$

donde ξ es un factor de amplificación, y aplicando la conocida relación

$$\text{sen} \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = \frac{e^{\frac{iq\Delta x}{2}} - e^{-\frac{iq\Delta x}{2}}}{2i} \quad (2.30)$$

la ecuación (2.28) queda como sigue

$$\xi = 1 - 4S_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \xi^{-k} . \quad (2.31)$$

Si $|\xi| > 1$ para algún valor de q , el factor temporal de la solución crece hasta infinito de acuerdo con la ecuación (2.29) y el modo es inestable. En consecuencia, para que el modo sea estable es preciso que $|\xi| \leq 1$. Considerando $\xi < 1$, se puede tomar el valor límite $\xi = -1$. De esta manera, para el valor límite independiente del tiempo, $\xi = -1$, la ecuación (2.31) pasa a tener el siguiente aspecto

$$2 = 4S_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} (-1)^{-k} . \quad (2.32)$$

Así, se llega a que

$$S_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \leq S_\times^{(m)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sum_{k=0}^m (-1)^k \omega_k^{(1-\gamma)}} \right] . \quad (2.33)$$

Considerando el caso de m muy grande, es decir, $m \rightarrow \infty$ se obtiene

$$S_\gamma^\times = \lim_{m \rightarrow \infty} S_\times^{(m)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \omega_k^{(1-\gamma)}} \right] . \quad (2.34)$$

Y teniendo en cuenta que se utiliza la aproximación BDF1, para la que se verifica

$$(1 - z)^{1-\gamma} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)} z^k, \quad (2.35)$$

bastaría con hacer en el paréntesis $z = -1$ para obtener la expresión del límite de estabilidad

$$S_\gamma^\times = \frac{1}{2^{2-\gamma}} = 2^{\gamma-2}. \quad (2.36)$$

Una vez determinado el límite de estabilidad, es de sumo interés llevar a cabo un chequeo numérico del mismo. Para ello se sigue el proceso propuesto por S.B. Yuste y L. Acedo en [66]. Dado un conjunto de valores de γ en el intervalo de interés y para valores de S_γ empezando en $S_\gamma = 0.98S_\gamma^\times$ (en particular, para $S_\gamma = 0.98 \cdot 2^{\gamma-2} + 0.001n$, $n = 0, 1, 2, \dots$) se aplica el esquema explícito que se ha obtenido hasta el paso M . Se toma como punto de partida $0.98S_\gamma^\times$ porque es un valor inferior al límite de estabilidad y muy próximo a él. Este valor se va incrementando paulatinamente milésima a milésima. La integración resultante para valores dados de S_γ y de γ se dirá que es inestable cuando se satisface la siguiente condición en cualquier posición j

$$\left| \frac{U_j^{(m-1)}}{U_j^{(m)}} - \Xi \right| > \Xi \quad \text{para algún } m = M - \Delta M, M - \Delta M + 1, \dots, M. \quad (2.37)$$

donde $\Xi = 5$ y $\Delta M = 10$. Esto quiere decir que la solución numérica se considera inestable si el cociente $U_j^{(m-1)}/U_j^{(m)}$ resulta negativo (nótese que $u_j^{(m)} > 0$) o mayor de 2Ξ en alguno de los últimos ΔM pasos. Se denotará como S_γ^{\min} el menor valor de $S_\gamma = 0.98S_\gamma^\times + 0.001n$ que verifica el criterio (2.37). Para el problema (2.13), se calcularán estos valores tomando $\Delta x = \pi/2N$ siendo $N = 10$ y considerando tres valores distintos de M ($M = 100$, $M = 200$ y $M = 1000$). Es bien sabido que para una malla con $2N + 1$ puntos (incluidos los extremos) el máximo valor de $\sin(q\Delta x/2)$ en (2.33) se da para el modo de vibración con $q = 2N - 1$, es decir para $q\Delta x = (2N - 1)\pi/(2N)$ de modo que en la Fig. 2.1 se representa $S_\gamma^{\min} \sin^2[(2n - 1)\pi/(4N)]$. Se observa que para valores grandes de M el límite de estabilidad predicho en (2.36) coincide con el resultado del chequeo numérico.

En la Fig. 2.2 podemos ver un ejemplo de cómo un valor de S_γ por encima del valor límite, conduce a una situación de inestabilidad, mientras que si trabajamos con un valor de S_γ por debajo del valor límite, el sistema es perfectamente estable, tal y como se puede comprobar en la Fig. 2.3.

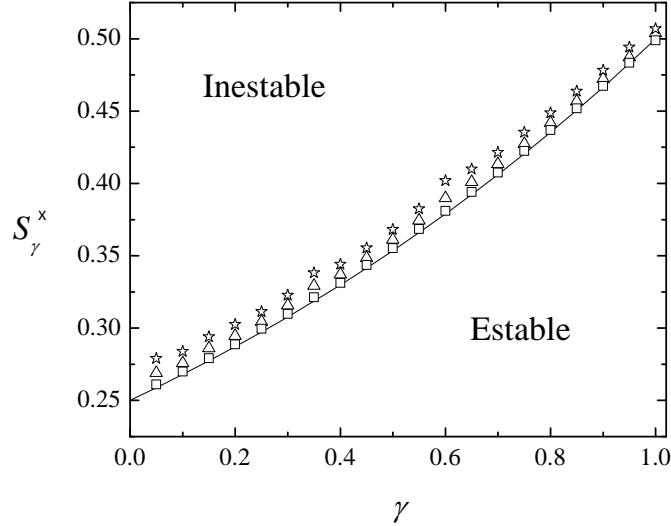


Figura 2.1: Valores de S_γ^x frente al exponente subdifusivo γ para (2.13) con $K_\gamma = 1$ cuando se emplea el método de Yuste-Acedo. La línea continua representa la predicción teórica resultado del análisis de Von Neumann, $2\gamma^{-2}$. Las estrellas, los triángulos y los cuadrados representan los resultados de los chequeos numéricos en base al criterio (2.37). Las estrellas corresponden a $M = 100$, los triángulos a $M = 200$ y los cuadrados a $M = 1000$.

2.1.1.3. Convergencia

Para realizar un análisis de la convergencia se seguirá un procedimiento del estilo del desarrollado por Liu et al. en [68]. El punto de partida es el esquema explícito para el método de Yuste-Acedo (2.18):

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right). \quad (2.38)$$

Si se define $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre el valor exacto y el valor numérico de la solución en el punto (x_j, t_k) , esto es

$$E_j^{(k)} = u(x_j, t_k) - U_j^{(k)} \quad (2.39)$$

entonces a partir del esquema (2.38) y teniendo en cuenta la definición del error de truncamiento (2.20) se obtiene la ecuación que describe el modo en

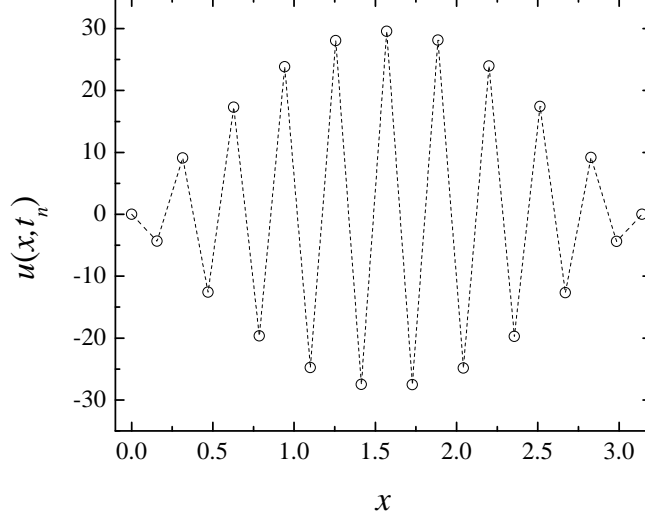


Figura 2.2: Solución del problema (2.13) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 0.5$ mediante el método de Yuste-Acedo. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , siendo $t_n = 0.025$, $\Delta t = 10^{-4}$, $\Delta x = \pi/20$ y $S \simeq 0.4053$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2^{-\frac{3}{2}} \simeq 0.3536$. Se ha trazado la línea discontinua como ayuda visual.

que evoluciona esta diferencia

$$E_j^{(m+1)} - E_j^{(m)} - S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left(E_{j+1}^{(m-k)} - 2E_j^{(m-k)} + E_{j-1}^{(m-k)} \right) = T_j^{(m)} \quad (2.40)$$

donde

$$T(x_j, t_m) \equiv T_j^{(m)}. \quad (2.41)$$

De manera análoga a como se hizo en el análisis de estabilidad, $E_j^{(k)}$ y $T_j^{(m)}$ se expresan como una combinación de modos subdifusivos, $E_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)} = \sum_q \chi_m^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.40) $E_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)}$ por $\chi_m e^{iqj\Delta x}$, se obtiene

$$\zeta_{m+1} - \zeta_m - S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \zeta_{m-k} = \chi_m \quad (2.42)$$

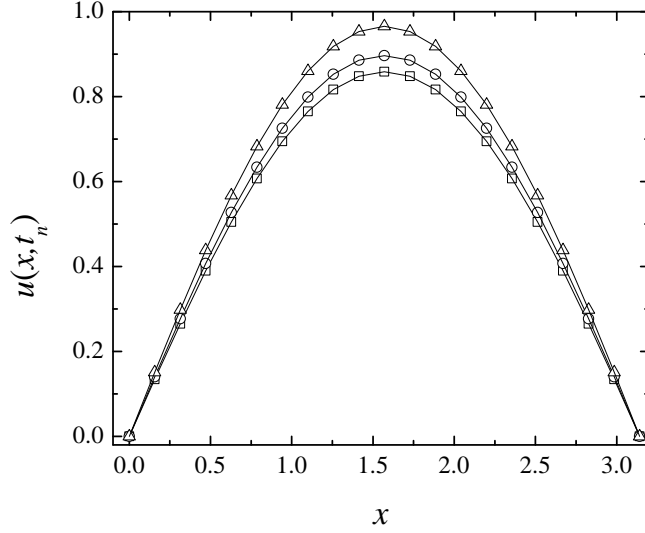


Figura 2.3: Solución del problema (2.13) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 0.5$ mediante el método de Yuste-Acedo. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , para tres tiempos finales, t_n . Se eligen $\Delta t = 10^{-5}$, $\Delta x = \pi/20$ y, por lo tanto, $S \simeq 0.1282$. Los triángulos corresponden a la solución para $t_n = 10^{-3}$, los círculos corresponden a la solución para $t_n = 10^{-2}$ y los cuadrados corresponden a la solución para $t_n = 2 \times 10^{-2}$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2^{-\frac{3}{2}} \simeq 0.3536$, claramente superior al considerado en los cálculos. Las líneas continuas corresponden a la solución analítica, $E_{0.5}(-t_n^{0.5}) \cdot \sin x$.

o lo que es equivalente

$$\zeta_{m+1} = \zeta_m + \hat{S}_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \zeta_{m-k} + \chi_m \quad (2.43)$$

donde hemos definido \hat{S}_γ como $\hat{S}_\gamma = 4 \sin^2\left(\frac{q\Delta x}{2}\right) S_\gamma$.

A continuación se probará que $|\zeta_m| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para todo m , o, lo que es equivalente, que $|\zeta_m| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ para todo m . Para empezar, se sabe que $U_j^{(0)}$ satisface la condición inicial por construcción, luego $E_j^{(0)} = 0$. Esto quiere decir que $\zeta_0 = 0$. Por lo tanto, de (2.43) se concluye que $\zeta_1 = \chi_0 = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ de modo que $|\zeta_1| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. Se asume ahora que $|\zeta_k| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Entonces, se va a

probar que $|\zeta_{m+1}| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. De (2.43) se tiene que

$$|\zeta_{m+1}| \leq |\zeta_m| + \hat{S}_\gamma |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=0}^m \left| \omega_k^{(1-\gamma)} \right| + |\chi_m| \quad (2.44)$$

donde $|\zeta_{\{m\}}|$ es el máximo valor de $|\zeta_k|$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Teniendo en cuenta que se utiliza la aproximación BDF1, se sabe que nuestros coeficientes satisfacen la siguiente relación

$$(1 - z)^{1-\gamma} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)}. \quad (2.45)$$

Si se hace $z = 1$ y se utiliza el hecho de que $\omega_0^{(1-\gamma)} = 1$ es fácil demostrar que $\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)} = -1$ o, equivalentemente, que $\sum_{k=1}^{\infty} |\omega_k^{(1-\gamma)}| = 1$, pues $\omega_k^{(1-\gamma)} < 0$ para $k \geq 1$. De esta manera $\sum_{k=0}^m |\omega_k^{(1-\gamma)}|$ es una cantidad acotada (de hecho es menor que 2). Usando este resultado en (2.44) y teniendo en cuenta que $|\zeta_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ y que $|\chi_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, finalmente se llega a

$$|\zeta_{m+1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2). \quad (2.46)$$

De esta manera, se ha demostrado que la amplitud del modo subdifusivo tiende a cero cuando el tamaño del mallado espacio-temporal tiende a cero. Haciendo uso de la identidad de Parseval esto significa que la norma del error $\|E^{(k)}\|^2 \equiv \sum_j |E_j^{(k)}|^2 = \sum_q |\zeta_k^{(q)}|^2$ tiende a cero cuando Δt y Δx tienden a cero.

2.1.1.4. Análisis de la precisión. Ejemplo numérico

Seguidamente se va a realizar una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica a la resolución del problema (2.13). Para ello se considera que el error es de la forma

$$error \equiv E = O[(\Delta t)^a] + O[(\Delta x)^2] \quad (2.47)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta x)^2. \quad (2.48)$$

En una primera fase, para un valor de γ dado, se fija el valor de Δt y para distintos valores $\Delta_i x$ se calculan los correspondientes errores E_i , esto es

$$E_i = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta_i x)^2 \quad (2.49)$$

$$E_j = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta_j x)^2 \quad (2.50)$$

...

Resulta evidente que

$$E_i - E_j = C_2((\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2) . \quad (2.51)$$

De esta manera, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

Se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{\pi}{20}$, $\Delta_2 x = \frac{\pi}{30}$, $\Delta_3 x = \frac{\pi}{40}$, $\Delta_4 x = \frac{\pi}{50}$ y $\Delta_5 x = \frac{\pi}{60}$). En los casos $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$ se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso $\gamma_1 = 0.3$ se fija $\Delta t = 2 \times 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-9}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.4 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es $O[(\Delta x)^2]$

A continuación, una vez conocido el valor de C_2 correspondiente a cada valor de γ considerado, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i

$$E_i = C_1(\Delta_i t)^a + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.52)$$

$$E_j = C_1(\Delta_j t)^a + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.53)$$

...

o lo que es equivalente

$$E_i - C_2(\Delta x)^2 = C_1(\Delta_i t)^a \quad (2.54)$$

$$E_j - C_2(\Delta x)^2 = C_1(\Delta_j t)^a \quad (2.55)$$

...

Si se toman logaritmos

$$\log |E_i - C_2(\Delta x)^2| = \log C_1 + a \cdot \log |\Delta_i t| \quad (2.56)$$

$$\log |E_j - C_2(\Delta x)^2| = \log C_1 + a \cdot \log |\Delta_j t| \quad (2.57)$$

...

resulta finalmente que

$$\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right| = a \cdot \log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right| . \quad (2.58)$$

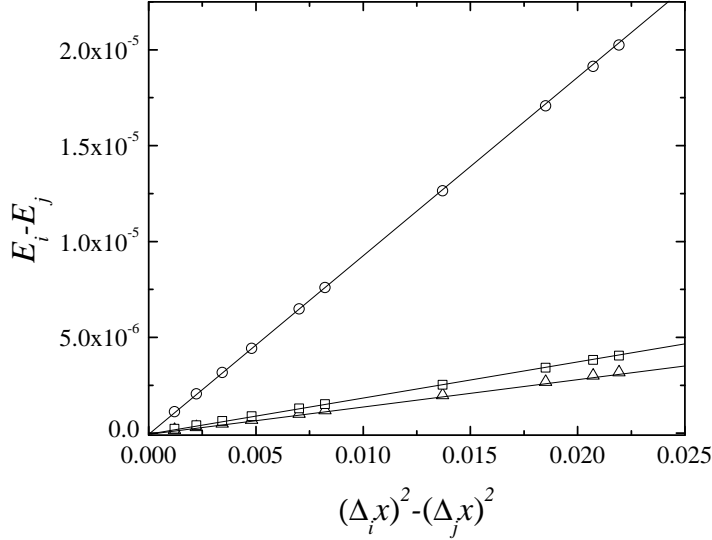


Figura 2.4: Ajuste lineal de $E_i - E_j$ con $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ (eje x) para cada valor de γ cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.13) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.372 \times 10^{-10} + 1.448 \times 10^{-4}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.091 \times 10^{-9} + 9.227 \times 10^{-4}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 4.282 \times 10^{-10} + 1.843 \times 10^{-4}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada γ .

De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$ y obtener el valor de a a partir de la pendiente de la recta de regresión.

Al igual que antes, se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$. En los tres casos se consideran cuatro valores distintos de Δt y se fija $\Delta x = \frac{\pi}{40}$. En los casos $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$ se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-6}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-7}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-7}$ y $\Delta_4 t = 10^{-7}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso $\gamma_1 = 0.3$ se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-11}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-12}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-12}$ y $\Delta_4 t = 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-9}$. Los resultados obtenidos se

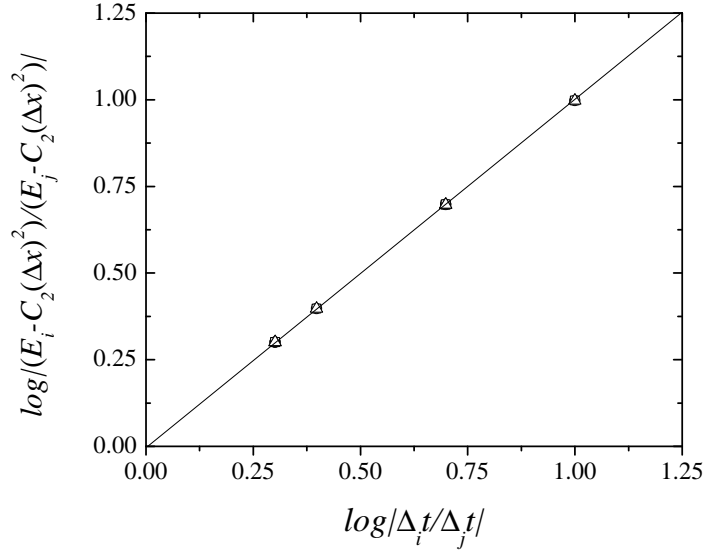


Figura 2.5: Ajuste lineal para cada valor de γ de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ (eje y) frente a $\log \left| \frac{\Delta t_i}{\Delta t_j} \right|$ siendo $i < j$ (eje x) cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.13) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -6.187 \times 10^{-5} + 0.9975x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -5.109 \times 10^{-5} + 0.9979x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -5.174 \times 10^{-5} + 0.9980x$.

recogen en la Fig. 2.5 y muestran que el error es $O(\Delta t)$ en todos los casos ya que las pendientes de las tres rectas de regresión son muy próximas a la unidad.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico es del mismo orden que el error de truncamiento [véase la ecuación (2.24)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.59)$$

Una vez que se ha definido y analizado el algoritmo numérico (2.18), se comprobará que, efectivamente, proporciona una buena aproximación de la solución exacta para el problema (2.13). En la Fig. 2.6 se puede ver el excelente acuerdo entre la solución analítica en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $E_\gamma(-t^\gamma)$, y la solución numérica para $\gamma = 0.3$, $\gamma = 0.5$ y $\gamma = 0.7$. En la Fig. 2.7 se ha representado para los mismos valores de γ el error en el punto medio ($x_0 = \pi/2$) que tomamos como el valor absoluto de la diferencia entre

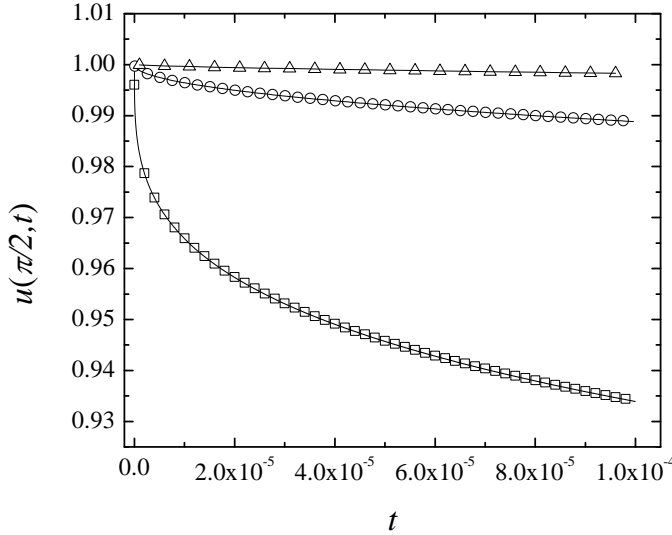


Figura 2.6: Soluciones para $u(x, t)$ en el punto medio, $x_0 = \pi/2$, cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.13) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan la solución numérica para $\gamma = 0.3$, $\Delta t = 10^{-8}$ y, por lo tanto, $S = 0.1613$. Los círculos representan la solución numérica para $\gamma = 0.5$, $\Delta t = 10^{-7}$ y, por lo tanto, $S = 0.01282$. Los triángulos representan la solución numérica para $\gamma = 0.7$, $\Delta t = 10^{-6}$ y, por lo tanto, $S = 2.557 \times 10^{-3}$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. Las líneas continuas representan las soluciones analíticas, $E_{0.3}(-t^{0.3})$, $E_{0.5}(-t^{0.5})$, $E_{0.7}(-t^{0.7})$, respectivamente.

la solución numérica y la teórica en $x_0 = \pi/2$, esto es, $|U_0^{(n)} - u(x_0, t_n)|$. Como se deduce de ambas figuras, el esquema numérico funciona bien y el error es pequeño, del orden de 10^{-4} veces menor que el valor típico de la función.

2.1.1.5. Análisis de la precisión para otros problemas

En el apartado anterior se ha realizado una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica para resolver el problema (2.13). En esta sección se va a comprobar que para otros problemas el error numérico también es $O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2]$. Para ello se van a considerar dos problemas distintos: uno similar al dado por (2.13) pero con la presencia de un término fuente de tipo cuasi-periódico y otro sin término fuente con condiciones de contorno no homogéneas. El código *Mathematica* para estos problemas sigue siendo el de la Sec. 1 del Apéndice pero con modificaciones correspondientes a las condiciones iniciales

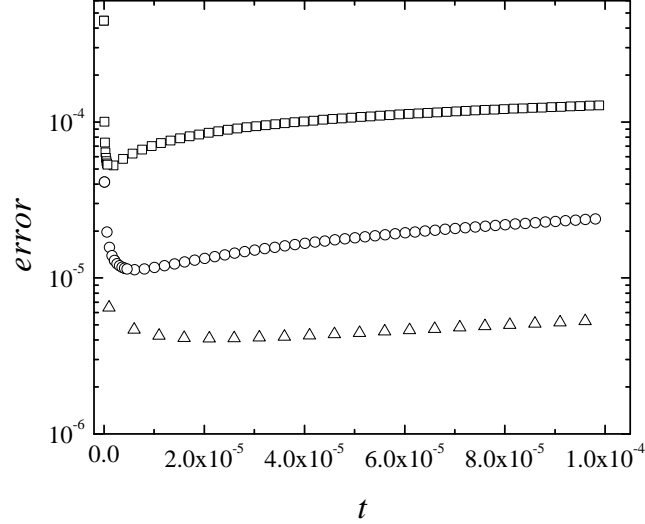


Figura 2.7: Errores en $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.13) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan el error para $\gamma = 0.3$, $\Delta t = 10^{-8}$ y, por lo tanto, $S = 0.1613$. Los círculos representan el error para $\gamma = 0.5$, $\Delta t = 10^{-7}$ y, por lo tanto, $S = 0.01282$. Los triángulos representan el error para $\gamma = 0.7$, $\Delta t = 10^{-6}$ y, por lo tanto, $S = 2.557 \times 10^{-3}$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. En el eje vertical se ha utilizado una escala logarítmica.

y de contorno en línea con lo establecido en las Secs. 6.4 y 6.5 del Apéndice. El procedimiento adoptado para estudiar la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización es una versión simplificada del que se ha utilizado en la sección previa. Para empezar se asume que el error es de la forma

$$error \equiv E = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] \quad (2.60)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta x)^2. \quad (2.61)$$

En una primera fase, para un valor de γ dado, se fija el valor de Δt y para distintos valores $\Delta_i x$ se calculan los correspondientes errores E_i , esto es

$$E_i = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta_i x)^2 \quad (2.62)$$

$$E_j = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta_j x)^2 \quad (2.63)$$

...

Resulta evidente que

$$|E_i - E_j| = C_2((\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2). \quad (2.64)$$

De esta manera, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

A continuación, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i

$$E_i = C_1(\Delta_i t) + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.65)$$

$$E_j = C_1(\Delta_j t) + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.66)$$

...

Resulta evidente que

$$|E_i - E_j| = C_1(\Delta_i t - \Delta_j t) \quad (2.67)$$

De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con Δt es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_1 . Seguidamente, se pasa a estudiar los dos problemas mencionados al comienzo de la sección.

Problema (2.13) con término fuente de tipo cuasi-periódico.

El problema que se estudiará, definido para $x \in [0, \pi]$, es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + F(x, t) \quad (2.68a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \quad (2.68b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = \text{sen } x \quad (2.68c)$$

donde $K_\gamma = 1$ y el término fuente, $F(x, t)$, viene dado por

$$f(x, t) = a [\text{sen}(\nu t) + \nu^\gamma \text{sen}(\nu t + \gamma\pi/2)] \text{sen } x. \quad (2.69)$$

La solución analítica viene dada por la siguiente expresión

$$u(x, t) = [E_\gamma(-t^\gamma) + a \text{sen}(\nu t)] \text{sen } x. \quad (2.70)$$

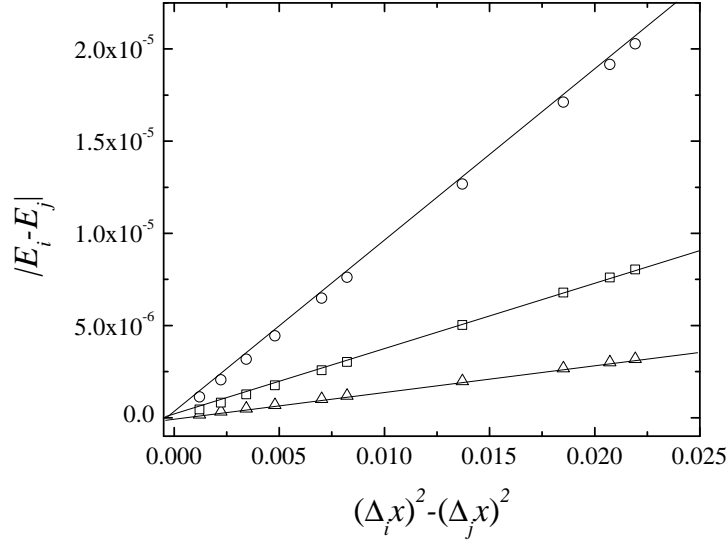


Figura 2.8: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ (eje x) para distintos valores de γ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.68) con $K = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 9.949 \times 10^{-11} + 1.450 \times 10^{-4}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.443 \times 10^{-9} + 9.244 \times 10^{-4}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 9.192 \times 10^{-10} + 3.665 \times 10^{-4}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada valor de γ .

Los valores asignados a los parámetros para resolver el problema son $a = 1/10$ y $\nu = 20\pi$.

Se han considerado tres casos distintos ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{\pi}{20}$, $\Delta_2 x = \frac{\pi}{30}$, $\Delta_3 x = \frac{\pi}{40}$, $\Delta_4 x = \frac{\pi}{50}$ y $\Delta_5 x = \frac{\pi}{60}$). En los dos casos correspondientes a $\gamma_3 = 0.7$ y $\gamma_2 = 0.5$ se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso $\gamma_1 = 0.3$ se fija $\Delta t = 2 \times 10^{-11}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-8}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.8 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es $O[(\Delta x)^2]$.

Para el estudio de la dependencia temporal se han considerado, al igual que antes, tres casos distintos ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada

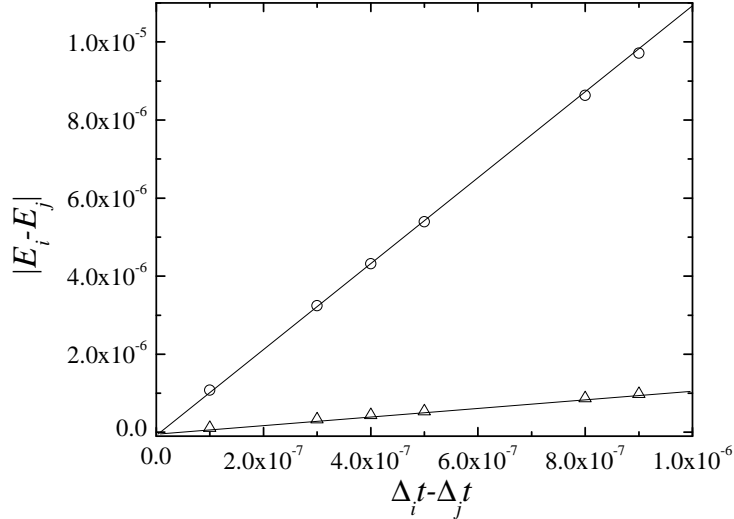


Figura 2.9: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ (eje x) para los casos $\gamma = 0.7$ y $\gamma = 0.5$ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.68) con $K = 1$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.609 \times 10^{-9} + 10.78x$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.609 \times 10^{-9} + 1.085x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_1 para cada γ .

uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$. En los dos casos correspondientes a $\gamma_3 = 0.7$ y $\gamma_2 = 0.5$ se fija el valor $\Delta x = \frac{\pi}{40}$ y se consideran cuatro valores distintos para Δt ($\Delta_1 t = 10^{-6}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-7}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-7}$ y $\Delta_4 t = 10^{-7}$) para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso de $\gamma_1 = 0.3$ se fija $\Delta x = \frac{\pi}{40}$ y se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-10}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-11}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-11}$ y $\Delta_4 t = 10^{-11}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-8}$. Los resultados obtenidos para los dos casos correspondientes a $\gamma_3 = 0.7$ y $\gamma_2 = 0.5$ se recogen en la Fig. 2.9. Los resultados obtenidos para el caso correspondiente a $\gamma_1 = 0.3$ se recogen en la Fig. 2.10. Ambas figuras muestran que el error es $O(\Delta t)$ en todos los casos ya que el ajuste de los puntos es magnífico.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico y el error de truncamiento son del mismo orden [véase la ecuación (2.24)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.71)$$

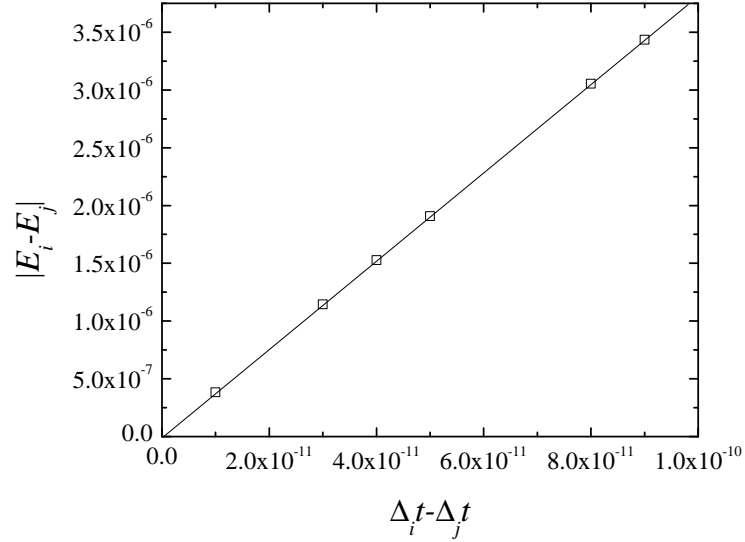


Figura 2.10: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma = 0.3$ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.68) con $K = 1$. Los cuadrados representan los valores obtenidos siendo, la ecuación de la recta de regresión $y = 2.898 \times 10^{-10} + 38160.9x$. El valor de la pendiente de la recta de regresión proporciona el valor de C_1 .

Problema con condiciones de contorno no homogéneas.

En términos matemáticos, el problema que se tiene que resolver, definido para $0 \leq x \leq L$, viene dado por

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.72a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u_0; \quad u(L, t) = 0 \quad (2.72b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = 0. \quad (2.72c)$$

La solución analítica puede obtenerse resolviendo el problema en el espacio de Laplace, o directamente mediante el método de las imágenes como puede

verse en [8]:

$$\begin{aligned}
u(x, t) = & u_0 \sum_{m=0}^M H_{10}^{11} \left[mz_c + z \left| \begin{matrix} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \\
& - u_0 \sum_{m=1}^M H_{10}^{11} \left[mz_c - z \left| \begin{matrix} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]
\end{aligned} \tag{2.73}$$

donde $M \rightarrow \infty$, $z = x/(K_\gamma t^\gamma)^{1/2}$, $z_c = 2L/(K_\gamma t^\gamma)^{1/2}$, y H_{10}^{11} es la función H de Fox [8, 7, 128]. Los valores de los parámetros elegidos para resolver el problema son $L = 4$, $u_0 = 1$ y $K_\gamma = 1$.

Se han considerado tres casos distintos ($\gamma_1 = 0.25$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.75$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{1}{5}$, $\Delta_2 x = \frac{2}{15}$, $\Delta_3 x = \frac{1}{10}$, $\Delta_4 x = \frac{2}{25}$ y $\Delta_5 x = \frac{1}{15}$). En el caso correspondiente a $\gamma_3 = 0.75$ se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ para un tiempo final $t_n = 0.1$. En el caso $\gamma_2 = 0.5$ se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-3}$. Por último, en el caso $\gamma_1 = 0.25$ se fija $\Delta t = 2 \times 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-7}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.11 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es $O[(\Delta x)^2]$.

Para el estudio de la dependencia temporal se han considerado, al igual que antes, tres casos distintos ($\gamma_1 = 0.25$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.75$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$. En el caso correspondiente a $\gamma_3 = 0.75$ se fija el valor $\Delta x = \frac{1}{10}$ y se consideran cuatro valores distintos para Δt ($\Delta_1 t = 5 \times 10^{-4}$, $\Delta_2 t = 2 \times 10^{-4}$, $\Delta_3 t = 10^{-4}$ y $\Delta_4 t = 8 \times 10^{-5}$) para un tiempo final $t_n = 0.1$. En el caso $\gamma_2 = 0.5$ se fija el valor $\Delta x = \frac{1}{10}$ y se consideran $\Delta_1 t = 10^{-5}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-6}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-6}$ y $\Delta_4 t = 10^{-6}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-3}$. Por último, para el caso de $\gamma_1 = 0.25$ se fija $\Delta x = \frac{1}{10}$ y se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-11}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-12}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-12}$ y $\Delta_4 t = 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-7}$. Los resultados obtenidos para el caso correspondiente a $\gamma_3 = 0.75$ se recogen en la Fig. 2.12, los correspondientes a $\gamma_2 = 0.5$ se recogen en la Fig. 2.13 y los del caso $\gamma_1 = 0.25$ en la Fig. 2.14. Las tres figuras confirman que el error es $O(\Delta t)$ en todos los casos ya que el ajuste de los puntos es muy bueno.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico y el error de truncamiento son del mismo orden [véase la ecuación (2.24)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \tag{2.74}$$

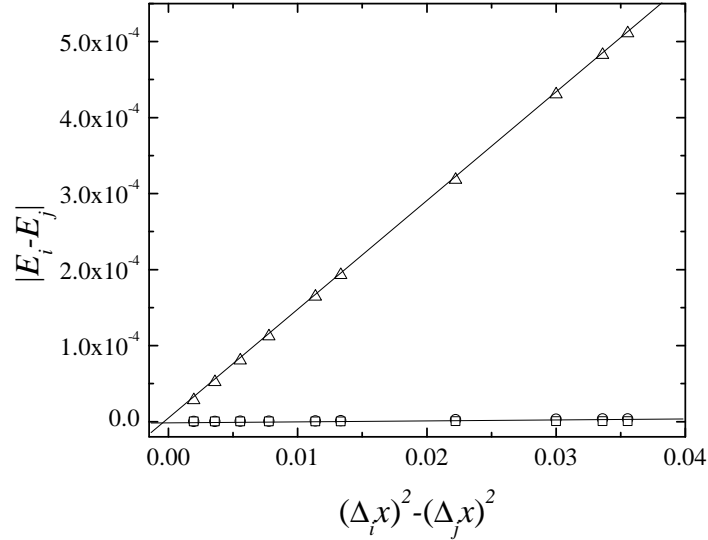


Figura 2.11: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ (eje x) para distintos valores de γ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.72) con $K = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.75$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 7.301 \times 10^{-7} + 1.434 \times 10^{-2}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -1.487 \times 10^{-7} + 1.056 \times 10^{-4}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.25$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -2.847 \times 10^{-8} + 1.577 \times 10^{-5}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada valor de γ .

En el resto de algoritmos desarrollados se va a evaluar la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización para un único problema con condiciones de contorno homogéneas, sin término fuente y condición inicial $u(x, 0) = \sin x$ (con la condición adicional $\partial u(x, t)/\partial t|_{t=0} = 0$ para el caso difusivo-ondulatorio).

2.1.2. Método de GMCP

El nombre elegido para designar este método tiene su origen en el trabajo desarrollado por Gorenflo, Mainardi, Cribisnet y Paradisi en [65]. Puesto que la derivada fraccionaria es de Caputo, primero haremos uso de la fórmula (1.13) que liga ambas definiciones y seguidamente, discretizaremos la derivada de Riemann-Liouville según la fórmula de Grünwald-Letnikov (1.15).

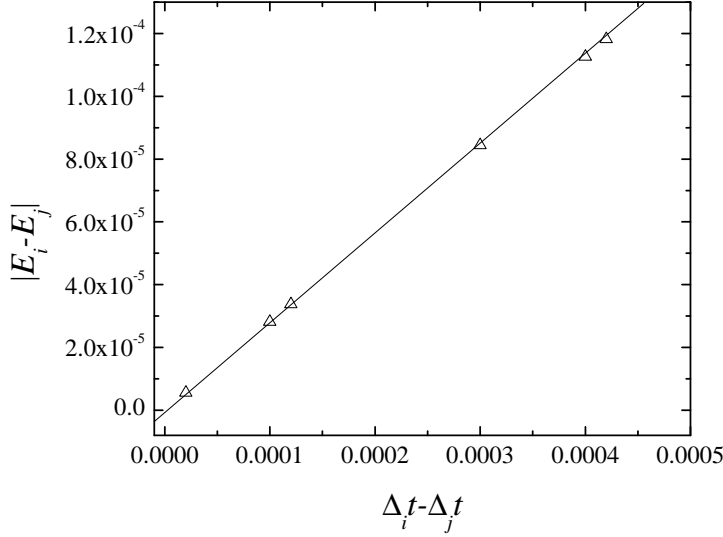


Figura 2.12: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma = 0.75$ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.72) con $K = 1$. Los triángulos representan los valores obtenidos, siendo la ecuación de la recta de regresión $y = -1.328 \times 10^{-19} + 0.2815x$. El valor de la pendiente de la recta de regresión proporciona el valor de C_1 .

De esta manera, siguiendo la fórmula (1.13) tenemos que para $0 < \gamma < 1$

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = {}_0 D_t^\gamma u(x, t) - \frac{u(x, 0^+) \cdot t^{-\gamma}}{\Gamma(1 - \gamma)} \quad (2.75)$$

y, si hacemos uso de que

$${}_0 D_t^\gamma 1 = \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1 - \gamma)} \quad (2.76)$$

es inmediato concluir que

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = {}_0 D_t^\gamma [u(x, t) - u(x, 0^+)] . \quad (2.77)$$

Finalmente, utilizando la discretización de Grünwald-Letnikov según la fórmula (1.15) y discretizando la derivada espacial segunda del mismo modo que hicimos en (2.16), obtenemos el siguiente esquema explícito

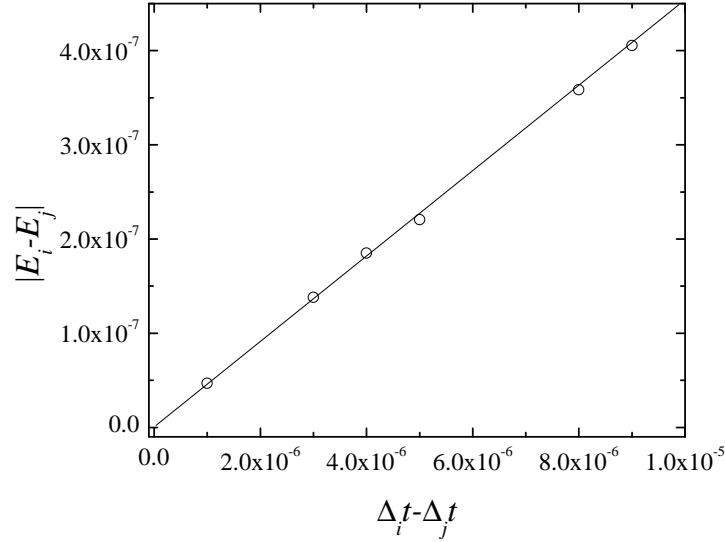


Figura 2.13: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta t_i - \Delta t_j$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma = 0.5$ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.72) con $K = 1$. Los círculos representan los valores obtenidos, siendo la ecuación de la recta de regresión $y = 3.081 \times 10^{-9} + 4.452 \times 10^{-2}x$. El valor de la pendiente de la recta de regresión proporciona el valor de C_1 .

$$U_j^{(m+1)} = S_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) - \sum_{k=1}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} + \sum_{k=0}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(0)} \quad (2.78)$$

donde

$$S_\gamma = K_\gamma \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2} \quad (2.79)$$

y donde los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ son los de la aproximación BDF1 dados por la relación (2.19).

A continuación, vamos a demostrar que el método de Yuste-Acedo y el método de GMCP son equivalentes si la derivada fraccionaria se discretiza mediante BDF1 y que, por lo tanto, conducen a los mismos resultados, de modo que el estudio del error de truncamiento y el estudio de la estabilidad y la convergencia desarrollados para el caso de Yuste-Acedo son también válidos para el algoritmo de GMCP.

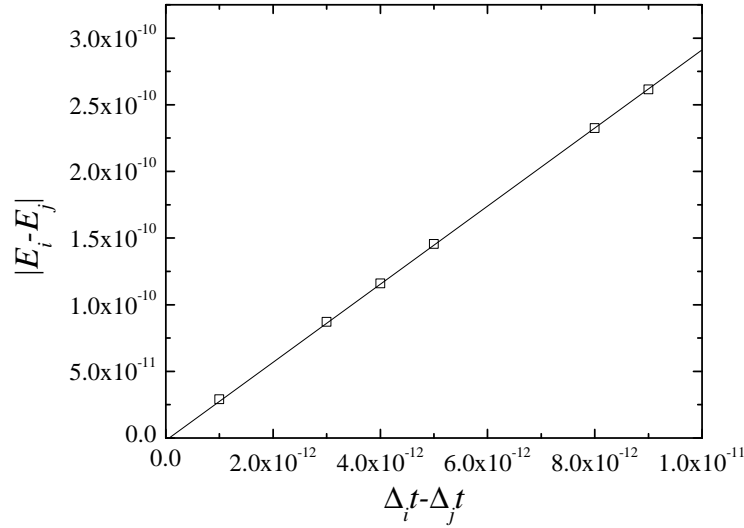


Figura 2.14: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma = 0.25$ cuando se emplea el algoritmo (2.18) para resolver el problema (2.72) con $K = 1$. Los cuadrados representan los valores obtenidos, siendo la ecuación de la recta de regresión $y = -3.188 \times 10^{-14} + 34.06x$. El valor de la pendiente de la recta de regresión proporciona el valor de C_1 .

2.1.2.1. Equivalencia entre el esquema de Yuste-Acedo y el de GMCP

Como ya se ha visto, el esquema de Yuste-Acedo es

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \quad (2.80)$$

y el de GMCP es

$$U_j^{(m+1)} = S_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) - \sum_{k=1}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} + U_j^{(0)} \sum_{k=0}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)}. \quad (2.81)$$

Se va a demostrar la equivalencia por inducción. Por sencillez en la notación, se hará $S_\gamma \equiv S$.

► Primero, se demostrará que ambas fórmulas son iguales para $m = 0$.

- En el método de Yuste-Acedo se tiene que

$$U_j^{(1)} = U_j^{(0)} + S\omega_0^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right). \quad (2.82)$$

- En el método GMCP se tiene que

$$\omega_0^{(\gamma)} U_j^{(1)} = S \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) + U_j^{(0)} \omega_0^{(\gamma)}. \quad (2.83)$$

Ambas fórmulas son iguales si $\omega_0^{(1-\gamma)} = 1/\omega_0^{(\gamma)}$, es decir, si $\omega_0^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = 1$. Esto se satisface en la discretización BDF1, pues $\omega_0^{(\gamma)} = 1$.

► A continuación, se demostrará que ambas fórmulas son iguales para $m = 1$.

- En el método de Yuste-Acedo se tiene que

$$U_j^{(2)} = U_j^{(1)} + S\omega_0^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(1)} - 2U_j^{(1)} + U_{j+1}^{(1)} \right) + S\omega_1^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right). \quad (2.84)$$

- En el método GMCP se tiene que

$$\omega_0^{(\gamma)} U_j^{(2)} = S \left(U_{j-1}^{(1)} - 2U_j^{(1)} + U_{j+1}^{(1)} \right) - \omega_1^{(\gamma)} U_j^{(1)} + U_j^{(0)} (\omega_0^{(\gamma)} + \omega_1^{(\gamma)}). \quad (2.85)$$

Pero por la fórmula de GMCP para $m = 0$ se sabe que

$$\omega_0^{(\gamma)} \left(U_j^{(1)} - U_j^{(0)} \right) = S \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) \quad (2.86)$$

e insertando esta relación en (2.84) se tiene que

$$U_j^{(2)} = S\omega_0^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(1)} - 2U_j^{(1)} + U_{j+1}^{(1)} \right) + U_j^{(1)} + \omega_0^{(\gamma)} \left(U_j^{(1)} - U_j^{(0)} \right). \quad (2.87)$$

Vemos que esta fórmula es igual que (2.85) si

$$\omega_0^{(1-\gamma)} = 1/\omega_0^{(\gamma)} \quad (2.88)$$

$$1 + \omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = -\omega_1^{(\gamma)} / \omega_0^{(\gamma)} \quad (2.89)$$

$$(\omega_0^{(\gamma)} + \omega_1^{(\gamma)}) / \omega_0^{(\gamma)} = -\omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} \quad (2.90)$$

es decir si

$$1 + \omega_0^{(\gamma)} \omega_1^{(1-\gamma)} = -\omega_1^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} \quad (2.91)$$

pues la tercera relación se verifica si se verifica la segunda (recuérdese que $\omega_0^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = 1$). Esta relación la satisface la discretización BDF1 pues en ella $\omega_0^\gamma = 1$ y $\omega_1^\gamma = -\gamma$.

► Se demostrará finalmente por inducción que ambas fórmulas son iguales para cualquier $m \geq 2$ asumiendo que su igualdad es cierta para $m-1, m-2, \dots, 1, 0$. Por la relación de GMCP (2.81) se sabe que

$$\begin{aligned} T_m &\equiv S \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) = \omega_0^{(\gamma)} U_j^{(m+1)} + \sum_{k=1}^m \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} - U_j^{(0)} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(\gamma)} \\ &= \sum_{k=0}^m \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} - U_j^{(0)} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(\gamma)}. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Del mismo modo, la expresión para el esquema de Yuste-Acedo (2.80) se puede escribir como sigue

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} + S \omega_0^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) + \sum_{k=1}^m \omega_k^{(1-\gamma)} T_{m-k}. \quad (2.93)$$

Insertando (2.92) en esta expresión se obtiene

$$U_j^{(m+1)} = S \omega_0^{(1-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) + U_j^{(m)} + P_m - U_j^{(0)} Q_m. \quad (2.94)$$

donde

$$P_m = \sum_{k=1}^m \sum_{n=0}^{m-k} \omega_k^{(1-\gamma)} \omega_n^{(\gamma)} U_j^{(m-k+1-n)} \equiv \sum_{k=1}^m \sum_{n=0}^{m-k} (k, n; m), \quad (2.95)$$

$$Q_m = \sum_{k=1}^m \sum_{n=0}^{m-k} \omega_k^{(1-\gamma)} \omega_n^{(\gamma)} \equiv \sum_{k=1}^m \sum_{n=0}^{m-k} (k, n). \quad (2.96)$$

Estas sumas son sobre las “filas” si imaginamos nuestro esquema en forma

matricial; si sumamos sobre las diagonales se tiene que

$$\begin{aligned}
P_m &= \sum_{q=1}^m \sum_{p=0}^{q-1} (q-p, p; m), [\text{suma por la diagonal de abajo hacia arriba}] \\
&= \sum_{q=1}^m \sum_{p=1}^q (p, q-p; m), [\text{suma por la diagonal de arriba hacia abajo}] \\
&= \sum_{k=1}^m \sum_{n=1}^k (n, k-n; m), [\text{igual que la anterior renombrando índices}] \\
&= \sum_{k=1}^m \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)}, [\text{deshaciendo la definición } (p, q; m)] \\
&= \sum_{k=1}^m U_j^{(m+1-k)} \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)}. \tag{2.97}
\end{aligned}$$

De igual modo se procedería para demostrar que

$$Q_m = \sum_{k=1}^m \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)}. \tag{2.98}$$

Si resultara que

$$\omega_0^{(1-\gamma)} = 1/\omega_0^{(\gamma)} \tag{2.99}$$

$$U_j^{(m)} + P_m = - \sum_{k=1}^m \frac{\omega_k^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} U_j^{(m+1-k)} = - \sum_{k=1}^m \omega_k^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} U_j^{(m+1-k)} \tag{2.100}$$

$$Q_m = - \sum_{k=0}^m \frac{\omega_k^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} = - \sum_{k=0}^m \omega_k^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} \tag{2.101}$$

tendríamos que la expresión de Yuste-Acedo y la de GMCP serían iguales también para $m \geq 2$. Ya hemos visto que el caso para $m = 0$ exige $\omega_0^{(1-\gamma)} = 1/\omega_0^{(\gamma)}$, y que el $m = 1$ exige $1 + \omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = -\omega_1^{(\gamma)}/\omega_0^{(\gamma)}$. Calculemos $U_j^{(m)} + P_m$:

$$\begin{aligned}
U_j^{(m)} + P_m &= \left(1 + \omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)}\right) U_j^{(m)} + \sum_{k=2}^m U_j^{(m+1-k)} \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} \\
&= -\omega_1^{(\gamma)}/\omega_0^{(\gamma)} U_j^{(m)} + \sum_{k=2}^m U_j^{(m+1-k)} \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)}. \tag{2.102}
\end{aligned}$$

Se ve claramente que $U_j^{(m)} + P_m = -\sum_{k=1}^m \frac{\omega_k^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} U_j^{(m+1-k)}$ si sucede que

$$\sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} = -\frac{\omega_k^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} = -\omega_k^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} \quad (2.103)$$

o lo que es equivalente, si

$$\sum_{n=0}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} = 0, \text{ para } k \geq 2 . \quad (2.104)$$

De forma análoga

$$\begin{aligned} Q_m &= \omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} + \sum_{k=2}^m \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} \\ &= -1 - \omega_0^{(1-\gamma)} \omega_1^{(\gamma)} + \sum_{k=2}^m \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} \\ &= -\omega_0^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} - \omega_0^{(1-\gamma)} \omega_1^{(\gamma)} + \sum_{k=2}^m \sum_{n=1}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} . \end{aligned} \quad (2.105)$$

Pero si se verifica (2.104) se tendría que

$$\begin{aligned} Q_m &= -\omega_0^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} - \omega_0^{(1-\gamma)} \omega_1^{(\gamma)} - \sum_{k=2}^m \omega_k^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} \\ &= -\omega_0^{(1-\gamma)} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(\gamma)} \end{aligned} \quad (2.106)$$

que es justamente la ecuación (2.101). Esto quiere decir que el método de Yuste-Acedo y el método de GMCP son equivalentes para todo m si se tiene que

$$\omega_0^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} = 1 , \quad (2.107)$$

$$1 + \omega_1^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} + \omega_1^{(1-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = 0 , \quad (2.108)$$

$$\sum_{n=0}^k \omega_n^{(1-\gamma)} \omega_{k-n}^{(\gamma)} = 0 , \text{ para } k \geq 2 . \quad (2.109)$$

Estas condiciones sólo pueden satisfacerse si los coeficientes son los de la aproximación BDF1. Sea $G(z; \gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n^{(\gamma)} z^n$ la función generatriz de los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ genéricos. Resulta que

$$\begin{aligned} G(z; \gamma)G(z; 1 - \gamma) &= \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n^{(\gamma)} z^n \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)} z^k \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{r=0}^m z^m \omega_{m-r}^{(\gamma)} \omega_r^{(1-\gamma)}. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Pero la relación (2.104) implica que

$$\begin{aligned} G(z; \gamma)G(z; 1 - \gamma) &= \omega_0^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} + \left[\omega_1^{(\gamma)} \omega_0^{(1-\gamma)} + \omega_0^{(\gamma)} \omega_1^{(1-\gamma)} \right] z \\ &= 1 - z. \end{aligned} \quad (2.111)$$

Así pues, por las relaciones (2.107), (2.108) y (2.111) concluimos que el esquema de Yuste-Acedo y el esquema de GMCP son equivalentes si y solo si la función generatriz de los coeficientes de discretización $\omega_k^{(\gamma)}$ satisface la relación

$$G(z; \gamma)G(z; 1 - \gamma) = 1 - z. \quad (2.112)$$

Esta relación exige, para funciones generatrices de la forma $G(z; \gamma) = [f(z)]^\gamma$, que $f(z) = 1 - z$, lo que conduce justamente a la función generatriz de la discretización BDF1, a saber, $G(z; \gamma) = (1 - z)^\gamma$.

2.1.3. Método L1

El nombre elegido para designar este método tiene su origen en el hecho de que emplea la discretización L1 que aparece en [6] para aproximar la derivada de Caputo. Puesto que la derivada fraccionaria temporal es de Caputo, se va a proceder a su discretización de modo directo aplicando la aproximación L1 que se ha visto en la Sec. 1.2.2. La derivada espacial segunda se discretizará empleando la misma fórmula que se empleó en (2.16). De esta manera se llega a una expresión del tipo

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) = K_\gamma \frac{u(x_{j-1}, t_m) - 2u(x_j, t_m) + u(x_{j+1}, t_m)}{(\Delta x)^2} + T(x_j, t_m) \quad (2.113)$$

siendo

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{u(x_j, t_{m-k}) - u(x_j, t_{m-1-k})}{\Delta t} \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} \frac{d\xi}{(t_m - \xi)^\gamma} \quad (2.114)$$

o equivalentemente

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) = \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} [(k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}] [u(x_j, t_{m-k}) - u(x_j, t_{m-1-k})] \quad (2.115)$$

y donde $T(x_j, t_m)$ es el denominado error de truncamiento en el punto (x_j, t_m) . Con vistas al ulterior análisis de $T(x_j, t_m)$, se ha de tener presente que de acuerdo con (1.20)

$${}_0^C D_t^\gamma u(x_j, t_m) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) + O[(\Delta t)^{2-\gamma}] \quad (2.116)$$

y además

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) + O(\Delta t). \quad (2.117)$$

Por último, utilizando (2.115), evaluada en t_{m+1} , en la ecuación (2.1) y discretizando la derivada espacial segunda, evaluada en t_m , del modo que se muestra en (2.113) se obtiene el siguiente esquema explícito:

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(U_j^{(m+1-k)} - U_j^{(m-k)} \right) + \bar{S}_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) \quad (2.118)$$

donde

$$\bar{S}_\gamma = K_\gamma \Gamma(2-\gamma) \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2} \quad (2.119)$$

y donde

$$b_k = (k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}, \text{ con } k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.120)$$

Por simplicidad en la notación, cuando aparecen referencias a valores numéricos concretos de \bar{S}_γ o de $S_\gamma = \bar{S}_\gamma / \Gamma(2-\gamma)$ se escribe \bar{S} o S respectivamente. En la Sec. 1 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para este algoritmo aplicado a la resolución del problema (2.12).

A continuación se va a estudiar el error de truncamiento.

2.1.3.1. Error de Truncamiento

El error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ se define a partir de (2.113) como

$$T(x_j, t_m) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) - K_\gamma \frac{u(x_{j-1}, t_m) - 2u(x_j, t_m) + u(x_{j+1}, t_m)}{(\Delta x)^2} \quad (2.121)$$

pero por otra parte

$$\frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} = u_{xx} + \frac{1}{12}u_{xxxx}(\Delta x)^2 + \dots \quad (2.122)$$

siendo $u_{xx} \equiv \left. \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \right|_{x=x_j}$ y $u_{xxxx} \equiv \left. \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} \right|_{x=x_j}$ y donde se ha empleado la notación simplificada $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$. También se sabe por (2.115) y (2.116) que

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\gamma u(x_j, t_m) &= \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} [(k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}] [u(x_j, t_{m-k}) - u(x_j, t_{m-1-k})] \\ &\quad + O[(\Delta t)^{2-\gamma}] . \end{aligned} \quad (2.123)$$

Así que, teniendo en cuenta que $u(x, t)$ es la solución exacta de la ecuación (2.1), finalmente se obtiene a partir de (2.117), (2.121), (2.122) y (2.123) el siguiente resultado

$$T(x_j, t_m) = O(\Delta t) + O[(\Delta t)^{2-\gamma}] - \frac{K_\gamma (\Delta x)^2}{12} u_{xxxx} + \dots = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.124)$$

2.1.3.2. Análisis de Estabilidad

Para llevar a cabo el análisis de estabilidad del esquema explícito dado en (2.118) se utiliza, al igual que en la Sec. 2.1.1, un procedimiento de tipo Von Neumann desarrollado por S.B. Yuste en [66, 62]. Sean $\hat{U}_j^{(k)}$ y $U_j^{(k)}$ soluciones numéricas de (2.118) en el punto (x_j, t_k) que se diferencian inicialmente por una cantidad pequeña, la perturbación, $e_j^{(0)}$. Se define entonces $e_j^{(k)}$ de la siguiente manera:

$$e_j^{(k)} = \hat{U}_j^{(k)} - U_j^{(k)} . \quad (2.125)$$

el algoritmo dado (2.118) se transforma en el siguiente esquema explícito que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$e_j^{(m+1)} = e_j^{(m)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(e_j^{(m+1-k)} - e_j^{(m-k)} \right) + \bar{S}_\gamma \left(e_{j+1}^{(m-k)} - 2e_j^{(m-k)} + e_{j-1}^{(m-k)} \right) \quad (2.126)$$

donde

$$\bar{S}_\gamma = \Gamma(2 - \gamma) \cdot S_\gamma \quad (2.127)$$

A continuación, se escribe $e_j^{(k)}$ como una combinación de modos subdifusivos, $e_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.126) $e_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $e_j^{(m+1)}$, $e_{j-1}^{(m)}$ y $e_{j+1}^{(m)}$ por sus expresiones homólogas, se obtiene

$$\begin{aligned} \zeta_{m+1} e^{iqj\Delta x} = & \zeta_m e^{iqj\Delta x} - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - \zeta_{m-k}) e^{iqj\Delta x} \\ & + \bar{S}_\gamma (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \zeta_m e^{iqj\Delta x} \end{aligned} \quad (2.128)$$

y simplificando queda

$$\zeta_{m+1} = \zeta_m - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - \zeta_{m-k}) + \bar{S}_\gamma (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \zeta_m . \quad (2.129)$$

Si se considera que

$$\zeta_{m+1} = \xi \zeta_m \quad (2.130)$$

donde ξ es un factor de amplificación, y se *asume* que, en principio, $\xi \equiv \xi(q)$ es independiente del tiempo, aplicando la conocida relación

$$\text{sen} \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = \frac{e^{\frac{iq\Delta x}{2}} - e^{-\frac{iq\Delta x}{2}}}{2i} \quad (2.131)$$

la ecuación (2.129) queda como sigue

$$\xi = 1 - \sum_{k=1}^m b_k (\xi^{1-k} - \xi^{-k}) + 4\bar{S}_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) . \quad (2.132)$$

Si $|\xi| > 1$ para algún valor de q , el factor temporal de la solución crece hasta infinito de acuerdo con la ecuación (2.181) y el modo es inestable. En consecuencia, para que el modo sea estable es preciso que $|\xi| \leq 1$. Considerando $\xi < 1$, podemos tomar el valor límite $\xi = -1$ independiente del tiempo. De esta manera, tomando $\xi = -1$ y sustituyendo b_k por su expresión en función de k , la ecuación (2.132) pasa a tener el siguiente aspecto

$$-4\bar{S}_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = 2 \cdot \left(1 + \sum_{k=1}^m (-1)^k [(k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}] \right) . \quad (2.133)$$

Y así se llega a que

$$\bar{S}_\gamma \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \leq \bar{S}_\times^{(m)} = \frac{-1}{2} \cdot \left(1 + \sum_{k=1}^m (-1)^k [(k+1)^{1-\gamma} - k^{1-\gamma}] \right). \quad (2.134)$$

Considerando el caso de m muy grande, es decir, $m \rightarrow \infty$, se tiene que

$$\bar{S}_\gamma^\times = \lim_{m \rightarrow \infty} \bar{S}_\times^{(m)} = \frac{-1}{2} \cdot (-2) \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k k^{1-\gamma} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k k^{1-\gamma} \quad (2.135)$$

y expresando esta relación en términos de la función zeta, $\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s}$, se llega a que el límite de estabilidad para el esquema L1 toma la forma

$$\bar{S}_\gamma^\times = \zeta(\gamma - 1) \cdot (1 - 2^{2-\gamma}). \quad (2.136)$$

Una vez determinado el límite de estabilidad, resulta de gran utilidad llevar a cabo un chequeo numérico del mismo. Con tal propósito se sigue el proceso propuesto para el método de Yuste-Acedo pero introduciendo una variación en el criterio utilizado en [74]. La razón de tal variación es simplemente operativa: el programa funciona mejor con el nuevo criterio elegido. Puesto que la elección de criterio es arbitraria, el hecho de que haya un cambio en el mismo, no afecta a la validez de los resultados obtenidos. La rutina es similar: dado un conjunto de valores de γ en el intervalo de interés y para valores de \bar{S}_γ empezando en $\bar{S}_\gamma = 0.245 \cdot (1 + \gamma)$ (en particular, para $\bar{S}_\gamma = 0,245 \cdot (1 + \gamma) + 0,001n$, $n = 0, 1, 2, \dots$) aplicamos el esquema explícito que hemos obtenido hasta el paso M . Se toma como punto de partida la expresión $\bar{S}_\gamma = 0.245 \cdot (1 + \gamma)$ por cuanto para cada γ proporciona un valor algo inferior al del límite teórico de estabilidad (2.136), aunque muy próximo a éste (recuérdese que para $\gamma = 0$ el límite teórico de estabilidad es 0.25), que se irá incrementando milésima a milésima. Se establece que la integración resultante para valores dados de \bar{S}_γ y de γ es inestable cuando se satisface la siguiente condición en cualquier posición j (aquí es donde se introduce el nuevo criterio)

$$\left| U_j^{(m-1)} - U_j^{(m)} \right| > \Xi \quad \text{para algún } m = M - \Delta M, M - \Delta M + 1, \dots, M. \quad (2.137)$$

siendo $\Xi = 1$ (aunque los resultados no cambiarían sustancialmente para cualquier otra elección razonable) y $\Delta M = 10$. Esto quiere decir que la solución numérica se considera inestable si la diferencia $|U_j^{(m-1)} - U_j^{(m)}|$ resulta mayor que 1 en alguno de los últimos ΔM pasos. Se denotará como S_γ^{\min} el

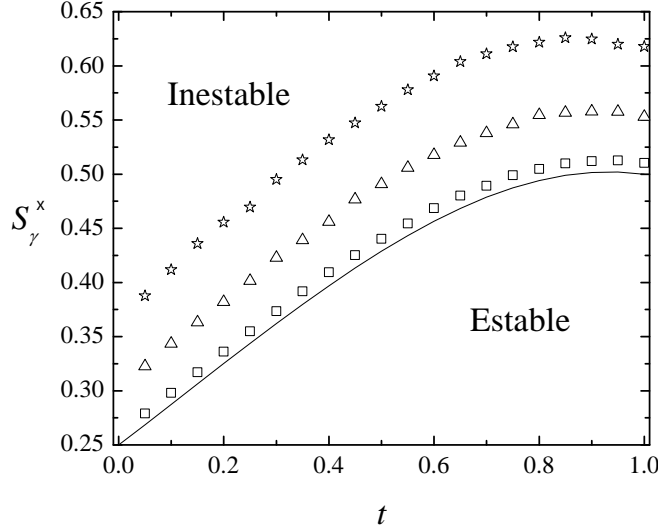


Figura 2.15: Valores de $S_\gamma^x = \bar{S}_\gamma^x / \Gamma(2 - \gamma)$ frente al exponente subdifusivo γ para el problema (2.12) con $K_\gamma = 1$ cuando se emplea el método L1. La línea continua representa la predicción teórica resultado del análisis de Von Neumann, $\zeta(\gamma - 1) \cdot (1 - 2^{2-\gamma}) / \Gamma(2 - \gamma)$. Las estrellas, los triángulos y los cuadrados representan los resultados de los chequeos numéricos en base al criterio (2.137). Las estrellas corresponden a $M = 100$, los triángulos a $M = 200$ y los cuadrados a $M = 1000$.

menor valor de $\bar{S}_\gamma = 0.245 \cdot (1 + \gamma) + 0,001n$ que verifica el criterio (2.137). Para el problema (2.12), se calcularán estos valores tomando $\Delta x = \pi/2N$ siendo $N = 10$ y considerando tres valores distintos de M ($M = 100$, $M = 200$ y $M = 1000$). Para una malla con $2N + 1$ puntos (incluidos los extremos) el máximo valor de $\text{sen}(q\Delta x/2)$ en (2.134) se da para el modo de vibración con $q = 2N - 1$, es decir para $q\Delta x = (2N - 1)\pi/(2N)$, de manera que en la Fig. 2.15 se representa $S_\gamma^{min} \text{sen}^2[(2n - 1)\pi/(4N)]$. Se elige S_γ en lugar de \bar{S}_γ para poder establecer ulteriores comparaciones con el límite de estabilidad obtenido para el método de Yuste-Acedo (que a la sazón es el mismo del método de GMCP). Se puede observar que para valores grandes de M el límite de estabilidad predicho en (2.136) coincide con el resultado del chequeo numérico.

En la Fig. 2.16 se puede ver un ejemplo de cómo un valor de S_γ por encima del valor límite, conduce a una situación de inestabilidad, mientras que si se trabaja con un valor de S_γ por debajo del valor límite, el sistema es perfectamente estable, tal y como se puede comprobar en la Fig. 2.17.

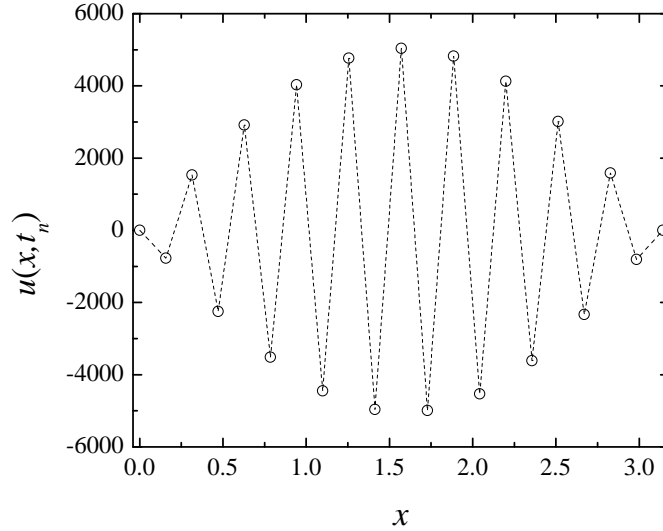


Figura 2.16: Solución del problema (2.12) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 0.5$ mediante el método L1. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , siendo $t_n = 0.024$, $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$, $\Delta x = \pi/20$ y $S \simeq 0.57316$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = \zeta(-0.5) \cdot (1 - 2^{1.5}) / \Gamma(1.5) \simeq 0.43$. Se ha trazado la línea discontinua como ayuda visual.

2.1.3.3. Convergencia

Para realizar un análisis de la convergencia es muy conveniente continuar el procedimiento desarrollado para el método de Yuste-Acedo al estilo del desarrollado por Liu et al. en [68]. Nuestro punto de partida es el esquema explícito para el método L1 (2.118)

$$U_j^{(m+1)} = U_j^{(m)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(U_j^{(m+1-k)} - U_j^{(m-k)} \right) + \bar{S}_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right). \quad (2.138)$$

Si definimos $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre el valor exacto y el valor numérico de la solución en el punto (x_j, t_k) , esto es

$$E_j^{(k)} = u(x_j, t_k) - U_j^{(k)} \quad (2.139)$$

entonces a partir del esquema (2.138) y teniendo en cuenta la definición del error de truncamiento (2.121) se obtiene la ecuación que describe el modo en

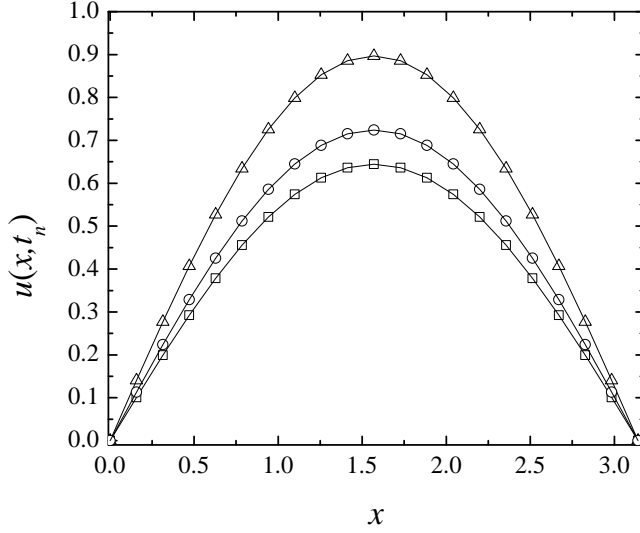


Figura 2.17: Solución del problema (2.12) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 0.5$ mediante el método L1. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , para tres tiempos finales, t_n . Elegimos $\Delta t = 10^{-4}$, $\Delta x = \pi/20$ y $S \simeq 0.40529$. Los triángulos corresponden a la solución para $t_n = 10^{-2}$, los círculos corresponden a la solución para $t_n = 10^{-1}$ y los cuadrados corresponden a la solución para $t_n = 2 \times 10^{-1}$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = \zeta(-0.5) \cdot (1 - 2^{1.5})/\Gamma(1.5) \simeq 0.43$, claramente superior al considerado en los cálculos. Las líneas continuas corresponden a la solución analítica, $E_{0.5}(-t_n^{0.5}) \cdot \sin x$.

que evoluciona esta diferencia

$$E_j^{(m+1)} - E_j^{(m)} - \bar{S}_\gamma \left(E_{j+1}^{(m-k)} - 2E_j^{(m-k)} + E_{j-1}^{(m-k)} \right) + \sum_{k=1}^m b_k \left(E_j^{(m+1-k)} - E_j^{(m-k)} \right) = T_j^{(m)} \quad (2.140)$$

donde

$$T(x_j, t_m) \equiv T_j^{(m)}. \quad (2.141)$$

De igual manera que se hizo en el análisis de estabilidad, $E_j^{(k)}$ y $T_j^{(m)}$ se escriben como una combinación de modos subdifusivos, $E_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)} = \sum_q \chi_m^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.140) $E_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)}$ por $\chi_m e^{iqj\Delta x}$, se obtiene

$$\zeta_{m+1} - \zeta_m - 4\bar{S}_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \zeta_m + \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - \zeta_{m-k}) = \chi_m \quad (2.142)$$

o lo que es equivalente

$$\zeta_{m+1} = (1 + \hat{S}_\gamma) \zeta_m - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - \zeta_{m-k}) + \chi_m \quad (2.143)$$

donde se ha definido \hat{S}_γ como $\hat{S}_\gamma = 4 \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \bar{S}_\gamma$. Esta ecuación puede ser reescrita en la siguiente forma

$$\zeta_{m+1} = (1 + \hat{S}_\gamma) \zeta_m - b_1 \zeta_m + \sum_{k=1}^{m-1} (b_k - b_{k+1}) \zeta_{m-k} + b_m \zeta_0 + \chi_m . \quad (2.144)$$

A continuación se probará que $|\zeta_m| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para todo m , o, lo que es equivalente, que $|\zeta_m| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ para todo m . Para empezar, se sabe que $U_j^{(0)}$ satisface la condición inicial por construcción, luego $E_j^{(0)} = 0$. Esto quiere decir que $\zeta_0 = 0$. Por lo tanto, de (2.143) se concluye que $\zeta_1 = \chi_0 = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ de modo que $|\zeta_1| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. Se asume ahora que $|\zeta_k| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Entonces, se va a probar que $|\zeta_{m+1}| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. De (2.143) se tiene que

$$|\zeta_{m+1}| \leq \left| 1 + \hat{S}_\gamma - b_1 \right| |\zeta_m| + |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=1}^{m-1} |b_k - b_{k+1}| + |\chi_m| \quad (2.145)$$

donde $|\zeta_{\{m\}}|$ es el máximo valor de $|\zeta_k|$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Teniendo en cuenta que

$$b_k > b_{k+1} \quad \forall k \quad (2.146a)$$

$$b_1 \leq 1 \quad (2.146b)$$

resulta

$$\sum_{k=1}^{m-1} |b_k - b_{k+1}| = \sum_{k=1}^{m-1} b_k - b_{k+1} = b_1 - b_m > 0 . \quad (2.147)$$

Es claro que de (2.146) y de la propia definición de \hat{S}_γ se puede concluir que tanto $b_1 - b_m$ como $1 + \hat{S}_\gamma - b_1$ son cantidades acotadas y positivas. Usando este resultado en (2.145) y teniendo en cuenta que $|\zeta_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ y que $|\chi_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, finalmente llegamos a

$$|\zeta_{m+1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2) . \quad (2.148)$$

De esta manera, se ha demostrado que la amplitud del modo subdifusivo tiende a cero cuando el tamaño del mallado espacio-temporal tiende a cero. Haciendo uso de la identidad de Parseval esto significa que la norma del error $\|E^{(k)}\|^2 \equiv \sum_j |E_j^{(k)}|^2 = \sum_q |\zeta_k^{(q)}|^2$ tiende a cero cuando Δt y Δx tienden a cero.

2.1.3.4. Análisis de la precisión. Ejemplo numérico

A continuación se va a llevar a cabo una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica a la resolución del problema (2.12). Para ello se sigue el procedimiento descrito en la Sec. 2.1.1. Se empieza por considerar que el error es de la forma

$$error \equiv E = O[(\Delta t)^a] + O[(\Delta x)^2] \quad (2.149)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.150)$$

En una primera fase, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

A tal fin, se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{\pi}{20}$, $\Delta_2 x = \frac{\pi}{30}$, $\Delta_3 x = \frac{\pi}{40}$, $\Delta_4 x = \frac{\pi}{50}$ y $\Delta_5 x = \frac{\pi}{60}$). En los casos $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$ se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso $\gamma_1 = 0.3$ se fija $\Delta t = 2 \times 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-9}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.18 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es de orden $(\Delta x)^2$.

A continuación, una vez conocido el valor de C_2 correspondiente a cada valor de γ considerado, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i . De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$ y obtener el valor de a a partir de la pendiente de la recta de regresión.

Al igual que antes, se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 0.3$, $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$. En los tres casos se

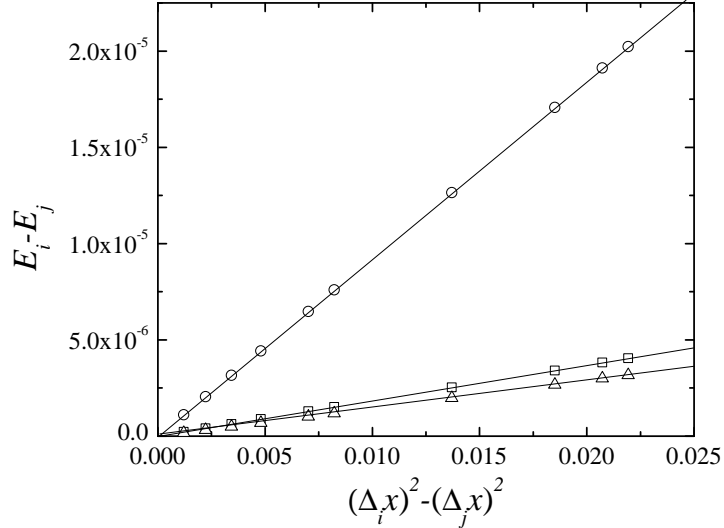


Figura 2.18: Ajuste lineal de $E_i - E_j$ para $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ para $i < j$ (eje x) para cada valor de γ cuando se emplea el algoritmo L1 para resolver el problema (2.12) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.411 \times 10^{-10} + 1.448 \times 10^{-4}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.098 \times 10^{-9} + 9.224 \times 10^{-4}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 4.279 \times 10^{-10} + 1.843 \times 10^{-4}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada γ .

consideran cuatro valores distintos de Δt y se fija $\Delta x = \frac{\pi}{40}$. En los casos $\gamma_2 = 0.5$ y $\gamma_3 = 0.7$ se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-6}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-7}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-7}$ y $\Delta_4 t = 10^{-7}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$, mientras que en el caso $\gamma_1 = 0.3$ se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-11}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-12}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-12}$ y $\Delta_4 t = 10^{-12}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-9}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.19 y muestran que el error es de orden Δt en todos los casos ya que las pendientes de las tres rectas de regresión son muy próximas a la unidad.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico es del mismo orden que el error de truncamiento [véase la ecuación (2.124)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.151)$$

Una vez que se ha definido y analizado el algoritmo numérico (2.118), se

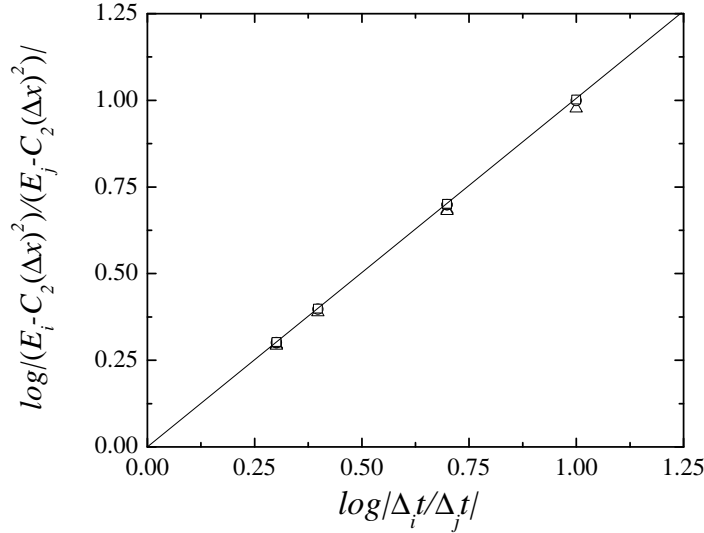


Figura 2.19: Ajuste lineal para cada valor de γ de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ (eje y) frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ siendo $i < j$ (eje x) cuando se emplea el algoritmo L1 para resolver el problema (2.12) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 0.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -9.711 \times 10^{-5} + 0.9766x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -2.556 \times 10^{-5} + 0.9992x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 0.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 9.223 \times 10^{-6} + 1.002x$.

procederá a comprobar que, en efecto, proporciona una buena aproximación de la solución exacta. En la Fig. 2.20 se puede ver el excelente acuerdo entre la solución analítica en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $E_\gamma(-t^\gamma)$, y la solución numérica para $\gamma = 0.3$, $\gamma = 0.5$ y $\gamma = 0.7$. En la Fig. 2.21 se ha representado para los mismos valores de γ el error en el punto medio ($x_0 = \pi/2$) que se toma como el valor absoluto de la diferencia entre la solución numérica y la teórica en $x_0 = \pi/2$, esto es, $|U_0^{(n)} - u(x_0, t_n)|$. Como se deduce de ambas figuras, el esquema numérico funciona bien y el error es pequeño, del orden de 10^{-4} veces menor que el valor típico de la solución.

2.1.4. Comparación entre los tres métodos

Como se anunció al principio de este capítulo, el objetivo último del estudio de diferentes algoritmos explícitos es establecer una comparación entre las precisiones y los límites de estabilidad. En la Fig. 2.22 se puede observar

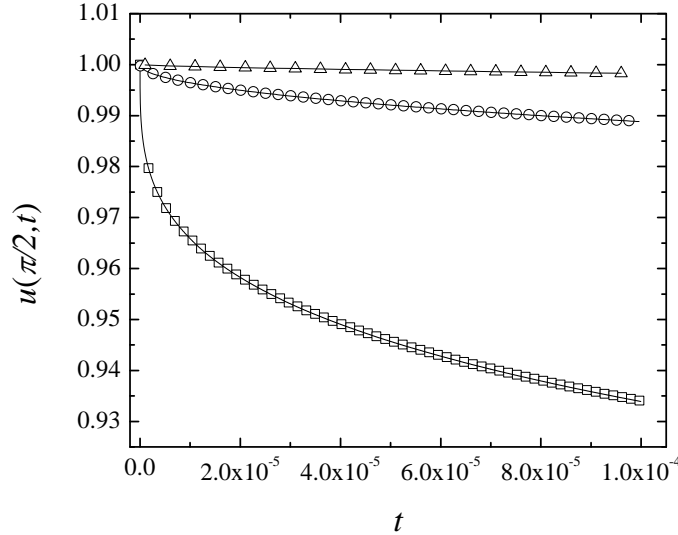


Figura 2.20: Soluciones para $u(x, t)$ en el punto medio, $x_0 = \pi/2$, cuando se emplea el algoritmo L1 para resolver el problema (2.12) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan la solución numérica para $\gamma = 0.3$, $\Delta t = 10^{-8}$ y, por lo tanto, $\bar{S} = 0.1466$. Los círculos representan la solución numérica para $\gamma = 0.5$, $\Delta t = 10^{-7}$ y, por lo tanto, $\bar{S} = 0.01136$. Los triángulos representan la solución numérica para $\gamma = 0.7$, $\Delta t = 10^{-6}$ y, por lo tanto, $\bar{S} = 2.295 \times 10^{-3}$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. Las líneas continuas representan las soluciones analíticas, $E_{0.3}(-t^{0.3})$, $E_{0.5}(-t^{0.5})$, $E_{0.7}(-t^{0.7})$, respectivamente.

una comparativa de los errores para $\gamma = 0.5$ correspondientes a los algoritmos de Yuste-Acedo (y GMCP) y L1, que aparecen recogidos en las Figs. 2.7 y 2.21, respectivamente. Como se ha visto con anterioridad, los métodos de Yuste-Acedo y de GMCP son un mismo método para discretización BDF1, por lo que, en sentido estricto, se están comparando los errores de dos algoritmos numéricos distintos, no de tres. La gráfica es muy ilustrativa en cuanto al comportamiento de los errores de los tres (dos) métodos cuando se aplican a la resolución de los problemas (2.12) y (2.13): en los dos casos el error es de orden $O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2]$ y va disminuyendo a medida que t crece (aunque para apreciar claramente esta disminución hay que ir a tiempos mayores que los considerados en la Fig. 2.21, cosa que ya se apunta en el caso de $\gamma = 0.3$). Si bien los errores son muy similares, para el algoritmo L1 se tiene que el error es algo mayor que el correspondiente al método Yuste-Acedo para valores pequeños de t , aproximándose ambos paulatinamente a medida

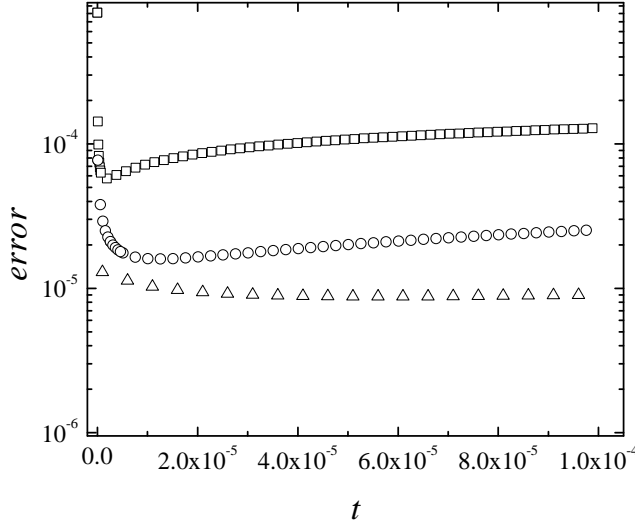


Figura 2.21: Errores en $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, cuando se emplea el algoritmo L1 para resolver el problema (2.12) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan el error para $\gamma = 0.3$, $\Delta t = 10^{-8}$ y, por lo tanto, $\bar{S} = 0.1466$. Los círculos representan el error para $\gamma = 0.5$, $\Delta t = 10^{-7}$ y, por lo tanto, $\bar{S} = 0.01136$. Los triángulos representan el error para $\gamma = 0.7$, $\Delta t = 10^{-6}$ y $\bar{S} = 2.295 \times 10^{-3}$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. En el eje vertical se ha utilizado una escala logarítmica.

que t crece. El comportamiento exhibido para $\gamma = 0.5$ es generalizable para cualquier $\gamma \in (0, 1)$, como se deduce de la información recogida en las Figs. 2.7 y 2.21 para $\gamma = 0.3$ y $\gamma = 0.7$.

El estudio comparado de los límites de estabilidad proporciona información relevante sobre el comportamiento de los diferentes algoritmos. La Fig. 2.23 muestra que la región de estabilidad correspondiente al método L1 es mayor que la región de estabilidad correspondiente a los métodos de Yuste-Acedo y GMCP, es decir, que para cada valor de γ , el valor límite de S_γ^\times para L1 es mayor o igual que el valor de S_γ^\times para los otros dos métodos. Nótese que las regiones de estabilidad obtenidas son propias de cada algoritmo, independientemente del problema particular a cuya resolución se apliquen.

De esta manera, la comparación entre los tres métodos nos lleva a concluir que cuando se trata de resolver los problemas (2.12) y (2.13), aunque para tiempos pequeños el algoritmo de Yuste-Acedo (GMCP) es el que presenta un error más reducido, para tiempos mayores el método L1 es preferible pues su precisión es similar y su límite de estabilidad asociado es superior.

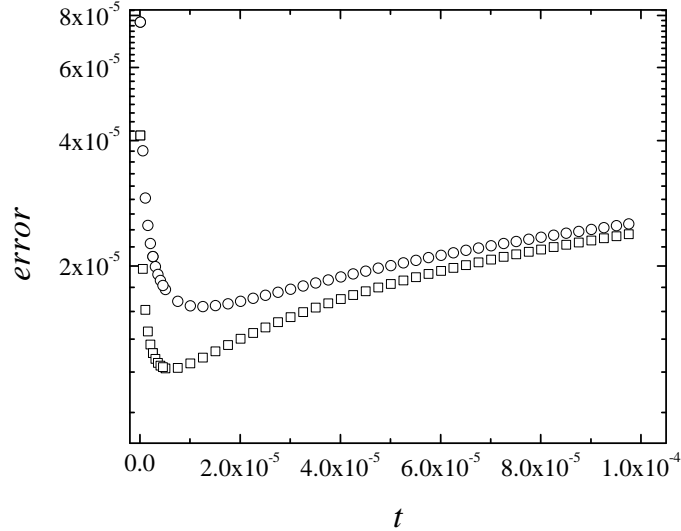


Figura 2.22: En la gráfica principal tenemos una comparación de los errores en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, correspondientes a los algoritmos de Yuste-Acedo y GMCP (cuadrados) y L1 (círculos) para los problemas descritos por (2.13) y (2.12), respectivamente, siendo $K_\gamma = 1$ y $\gamma = 0.5$. En ambos casos hemos empleado $\Delta t = 10^{-7}$, $\Delta x = \pi/20$. En el eje vertical se ha utilizado una escala logarítmica.

2.2. Métodos explícitos para la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria

En esta sección vamos a resolver la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria unidimensional sin término fuente mediante la extensión de los algoritmos numéricos explícitos desarrollados en la sección correspondiente a la ecuación subdifusiva fraccionaria. Puesto que la derivada temporal fraccionaria puede venir definida tanto en el sentido de Caputo como en el de Riemann-Liouville, se comenzará demostrando, al igual que en el caso subdifusivo, la equivalencia entre la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria con derivada de Caputo

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 1 < \gamma < 2 \quad (2.152)$$

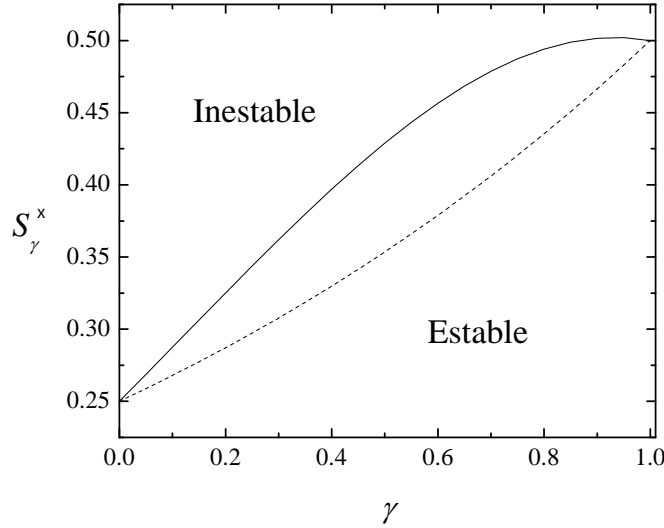


Figura 2.23: Límite teórico de estabilidad para el algoritmo L1, $S_\gamma^x = \zeta(\gamma - 1) \cdot (1 - 2^{2-\gamma}) / \Gamma(2 - \gamma)$, (línea continua) y para los algoritmos de Yuste-Acedo y GMCP $S_\gamma^x = 2^{\gamma-2}$ (línea discontinua). Aparecen indicadas las regiones de estabilidad y de inestabilidad.

y la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria planteada en términos de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville [66]

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = K_\gamma {}_0D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 1 < \gamma < 2. \quad (2.153)$$

La demostración es bastante sencilla. Para $1 < \gamma < 2$ se tienen las siguientes relaciones [9]

$${}_0D_t^{\gamma-2} (f''(t)) = {}_0D_t^\gamma f(t) - \sum_{k=0}^1 \frac{t^{k-\gamma}}{\Gamma(1+k-\gamma)} f^{(k)}(0) = {}_0^C D_t^\gamma f(t) \quad (2.154)$$

$${}_0D_t^{-\gamma} ({}_0D_t^\gamma f(t)) = f(t) - \sum_{k=1}^2 \left[{}_0D_t^{\gamma-k} f(t) \right]_{t=0} \frac{t^{\gamma-k}}{\Gamma(\gamma-k+1)} \quad (2.155)$$

mientras que para $0 < \gamma < 1$ se tiene que

$${}_0D_t^{-\gamma} ({}_0D_t^\gamma f(t)) = f(t) - \left[{}_0D_t^{\gamma-1} f(t) \right]_{t=0} \frac{t^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)}. \quad (2.156)$$

En (2.155) y (2.156) ${}_0D_t^{-\gamma}$ representa la integral fraccionaria de Riemann-Liouville de orden γ

$${}_0D_t^{-\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\gamma}} d\tau. \quad (2.157)$$

Dada una función $f(t)$ continuamente diferenciable en el intervalo $[0, t]$, para $0 < \gamma < 1$ se tiene que

$$\begin{aligned} {}_0D_t^{-\gamma} f(t)|_{t=0} &= \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\gamma}} d\tau = \\ & \lim_{t \rightarrow 0^+} \left[\frac{t^\gamma}{\Gamma(1+\gamma)} f(0) + \frac{1}{\Gamma(1+\gamma)} \int_0^t f'(\tau) (t-\tau)^\gamma d\tau \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.158)$$

De esta manera, a partir de (2.153) se tiene que

$${}_0D_t^{\gamma-2} \left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \right) = {}_0D_t^{\gamma-2} \left\{ K_\gamma {}_0D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right\} \quad (2.159)$$

y haciendo uso de las relaciones (2.154) y (2.156) y simplificando, la ecuación (2.159) queda de la siguiente manera

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \left\{ {}_0D_t^{1-\gamma} \left[K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right] \right\}_{t=0} \frac{t^{1-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} \quad (2.160)$$

Si $u(x, t) \in C_{x,t}^{2,1}([a, b] \times [0, T])$ (de hecho $u(x, t) \in C_{x,t}^{2,2}([a, b] \times [0, T])$ en el caso difusivo-ondulatorio objeto de análisis) a partir de (2.158) se concluye que

$$\left\{ {}_0D_t^{1-\gamma} \left[K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right] \right\}_{t=0} = 0. \quad (2.161)$$

de modo que (2.160) es la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria con derivada de Caputo, esto es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.162)$$

Como viene siendo habitual cuando se implementan métodos en diferencias finitas, se comenzará por considerar un retículo o malla en la región espacio-temporal en la que se quiere obtener la estimación numérica $U_j^{(m)}$ de la solución exacta $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$, siendo (x_j, t_m) las coordenadas del nodo (j, m) del retículo. Dada una ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria

sin término fuente del tipo que se muestra en (2.152) o equivalentemente en (2.153), es posible escribirla en forma simplificada como

$$\partial u = 0 \quad (2.163)$$

siendo $\partial \equiv {}_0^C D_t^\gamma - K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ para (2.152) o bien $\partial \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2} - {}_0 D_t^{2-\gamma} \left(K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)$ para (2.153).

La idea es reemplazar el operador continuo ∂ por un operador en diferencias δ y un error de truncamiento $T(x, t)$, esto es $\partial u \equiv \delta u + T$. De acuerdo con este procedimiento se van a desarrollar tres métodos explícitos para resolver la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria. En la Sec. 2.2.1 se va a estudiar el método que se ha denominado como Yuste-Acedo. Se comenzará desarrollando el algoritmo explícito y seguidamente se hará un análisis de su error de truncamiento. A continuación, se determinará el límite de estabilidad y se demostrará la convergencia del esquema. Finalmente, se desarrollará un análisis de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización y se determinará la precisión del método cuando se aplica a la resolución de un problema sencillo pero representativo. En la Sec. 2.2.2 se comenzará desarrollando el algoritmo explícito que se ha denominado como GMCP y a continuación se demostrará la no equivalencia entre el algoritmo de Yuste-Acedo y el del método GMCP, salvo en el caso estudiado en esta tesis. En la Sec. 2.2.3 se va a estudiar el método que se ha denominado como L2. Se empezará desarrollando el algoritmo explícito y seguidamente se hará un análisis de su error de truncamiento. A continuación, se determinará el límite de estabilidad y se demostrará la convergencia del esquema. Finalmente se desarrollará un análisis de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización y se determinará la precisión del método cuando se aplica a la resolución de un problema sencillo pero representativo. En la Sec. 2.2.4 se realizará una comparación tanto de la precisión como de la estabilidad de los tres algoritmos.

A fin de llevar a cabo el chequeo numérico de los límites de estabilidad de los algoritmos estudiados así como el análisis de sus precisiones y su ulterior comparación en la Sec. 2.2.4 se considerará, como ya se ha mencionado más arriba, un ejemplo sencillo pero representativo. De este modo, se plantea un problema con condiciones de contorno (CC) absorbentes y condiciones iniciales (CI) $u(x, 0) = \sin x$ y $\partial u(x, t)/\partial t|_{t=0} = 0$ pues, con tales condiciones, la solución analítica es particularmente simple. Además, atendiendo a las CI consideradas, resulta conveniente elegir $x \in [0, \pi]$. En consecuencia, el

ejemplo que se va a considerar es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 1 < \gamma < 2 \quad (2.164a)$$

$$CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(\pi, t) = 0 \end{cases} \quad (2.164b)$$

$$CI : \begin{cases} u(x, 0) = \text{sen } x \\ \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \end{cases} \quad (2.164c)$$

donde ${}_0^C D_t^\gamma u(x, t)$ es la derivada de Caputo de orden γ de $u(x, t)$, o bien este otro, equivalente

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = K_\gamma {}_0 D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 1 < \gamma < 2 \quad (2.165a)$$

$$CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(\pi, t) = 0 \end{cases} \quad (2.165b)$$

$$CI : \begin{cases} u(x, 0) = \text{sen } x \\ \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \end{cases} \quad (2.165c)$$

donde ${}_0 D_t^{2-\gamma} u(x, t)$ es la derivada de Riemann-Liouville de orden $2 - \gamma$ de $u(x, t)$.

La solución analítica para ambos problemas es

$$u(x, t) = E_\gamma(-K_\gamma t^\gamma) \cdot \text{sen } x \quad (2.166)$$

En los cálculos numéricos siempre se tomará $K_\gamma = 1$.

2.2.1. Método de Yuste-Acedo

El nombre elegido para designar este método se debe a que se trata de una extensión directa del método de Yuste-Acedo para la ecuación subdifusiva fraccionaria que se ha estudiado en la Sec. 2.1.1, si bien se debe aclarar que los citados autores no desarrollaron un método para el caso difu-onda. El desarrollo del algoritmo Yuste-Acedo parte de la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria planteada en términos de la derivada de Riemann-Liouville

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = K_\gamma {}_0 D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \text{ para } 1 < \gamma < 2. \quad (2.167)$$

Si se discretiza la derivada de orden dos en el tiempo y la derivada espacial

segunda, la ecuación queda como sigue

$$\frac{u(x_j, t_{m-1}) - 2u(x_j, t_m) + u(x_j, t_{m+1}))}{(\Delta t)^2} = K_\gamma {}_0\delta_t^{2-\gamma} \frac{u(x_{j-1}, t_m) - 2u(x_j, t_m) + u(x_{j+1}, t_m)}{(\Delta x)^2} + T(x_j, t_m) \quad (2.168)$$

donde $T(x, t)$ es el error de truncamiento en el punto (x_j, t_m) y ${}_0\delta_t^{2-\gamma}$ se define como

$${}_0\delta_t^{2-\gamma} u(x_j, t_m) = \frac{1}{(\Delta t)^{2-\gamma}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} u(x_j, t_{m-k}). \quad (2.169)$$

Si insertamos en (2.168) la discretización de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville dada en (2.169), despreciamos el error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ y reordenamos los términos, obtenemos finalmente el siguiente esquema explícito:

$$U_j^{(m+1)} = 2U_j^{(m)} - U_j^{(m-1)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \quad (2.170)$$

donde $S_\gamma = K_\gamma \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2}$. Por simplicidad en la notación, cuando nos referimos a valores numéricos concretos de S_γ escribimos simplemente S . En la Sec. 4 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para este algoritmo aplicado a la resolución del problema (2.165).

Asimismo, debe quedar establecido que en nuestros cálculos vamos a trabajar con los coeficientes $\omega_k^{(2-\gamma)}$ de la aproximación BDF1 que vienen dados por la siguiente relación de recurrencia

$$\omega_0^{(\gamma)} = 1, \quad \omega_k^{(\gamma)} = \left(1 - \frac{\gamma + 1}{k} \right) \omega_{k-1}^{(\gamma)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.171)$$

A continuación se va a estudiar el error de truncamiento.

2.2.1.1. Error de Truncamiento

El error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ se define a partir de (2.168) como

$$T(x_j, t_m) = \frac{u_j^{(m-1)} - 2u_j^{(m)} + u_j^{(m+1)}}{(\Delta t)^2} - K_\gamma {}_0\delta_t^{2-\gamma} \frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} \quad (2.172)$$

donde se ha simplificado la notación escribiendo $u(x_j, t_m)$ como $u_j^{(m)}$. Pero por otra parte se sabe que

$$\frac{u_j^{(m-1)} - 2u_j^{(m)} + u_j^{(m+1)}}{(\Delta t)^2} = u_{tt} + \frac{1}{12}u_{tttt}(\Delta t)^2 + O[(\Delta t)^4] \quad (2.173)$$

siendo $u_{tt} \equiv \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} \Big|_{t=t_m}$ y $u_{tttt} \equiv \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial t^4} \Big|_{t=t_m}$. También sabemos que

$$\begin{aligned} {}_0\delta_t^{2-\gamma} \left[u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)} \right] &= \frac{1}{(\Delta t)^{2-\gamma}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left[u_{xx} + \frac{1}{12}u_{xxxx}(\Delta x)^2 + \dots \right] \\ &+ O[(\Delta t)^p] \end{aligned} \quad (2.174)$$

siendo $u_{xx} \equiv \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j}$ y $u_{xxxx} \equiv \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} \Big|_{x=x_j}$.

Así que, teniendo en cuenta que $u(x, t)$ es la solución exacta de la ecuación (2.167), a partir de (2.20), (2.173) y (2.174) se obtiene el siguiente resultado

$$\begin{aligned} T(x_j, t_m) &= O[(\Delta t)^p] + \frac{1}{12}u_{tttt}(\Delta t)^2 - \frac{K_\gamma(\Delta x)^2}{12} {}_0\delta_t^{1-\gamma}u_{xxxx} + \dots \\ &= O[(\Delta t)^p] + O[(\Delta t)^2] + O[(\Delta x)^2] . \end{aligned} \quad (2.175)$$

Como se ha elegido la discretización BDF1, para la cual $p = 1$, se puede concluir que

$$T(x_j, t_m) = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.176)$$

2.2.1.2. Análisis de Estabilidad

Para llevar a cabo el análisis de estabilidad del esquema explícito dado en (2.170) se utiliza, al igual que en los métodos de la Sec. 2.1, un procedimiento de tipo Von Neumann desarrollado por S.B. Yuste en [66, 62]. Sean $\hat{U}_j^{(k)}$ y $U_j^{(k)}$ soluciones numéricas de (2.170) en el punto (x_j, t_k) que se diferencian inicialmente por una cantidad pequeña, la perturbación, $e_j^{(0)}$. Se define entonces $e_j^{(k)}$ de la siguiente manera:

$$e_j^{(k)} = \hat{U}_j^{(k)} - U_j^{(k)} . \quad (2.177)$$

A partir del algoritmo (2.170) se obtiene el siguiente esquema explícito que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$e_j^{(m+1)} = 2e_j^{(m)} - e_j^{(m-1)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left(e_{j+1}^{(m-k)} - 2e_j^{(m-k)} + e_{j-1}^{(m-k)} \right) . \quad (2.178)$$

A continuación, se escribe $e_j^{(k)}$ como una combinación de modos difusivo-ondulatorios, $e_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.178) $e_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $e_j^{(m+1)}$, $e_{j-1}^{(m)}$ y $e_{j+1}^{(m)}$ por sus expresiones homólogas, se obtiene

$$\begin{aligned} \zeta_{m+1} e^{iqj\Delta x} = & 2\zeta_m e^{iqj\Delta x} - \zeta_{m-1} e^{iqj\Delta x} \\ & + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \zeta_{m-k} (e^{iq(j-1)\Delta x} - 2e^{iqj\Delta x} + e^{iq(j+1)\Delta x}) \end{aligned} \quad (2.179)$$

y simplificando queda

$$\zeta_{m+1} = 2\zeta_m - \zeta_{m-1} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \zeta_{m-k} (e^{-iq\Delta x} - 2 + e^{iq\Delta x}) . \quad (2.180)$$

Si se considera que

$$\zeta_{m+1} = \xi \zeta_m \quad (2.181)$$

donde ξ es un factor de amplificación, y se *asume* que, en principio, $\xi \equiv \xi(q)$ es independiente del tiempo, aplicando la conocida relación

$$\text{sen} \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = \frac{e^{\frac{iq\Delta x}{2}} - e^{-\frac{iq\Delta x}{2}}}{2i} \quad (2.182)$$

la ecuación (2.180) queda como sigue

$$\xi = 2 - \xi^{-1} - 4S_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \xi^{-k} . \quad (2.183)$$

Si $|\xi| > 1$ para algún valor de q , el factor temporal de la solución crece hasta infinito de acuerdo con la ecuación (2.181) y el modo es inestable. En consecuencia, para que el modo sea estable es preciso que $|\xi| \leq 1$. Considerando $\xi < 1$, podemos tomar el valor límite $\xi = -1$. De esta manera, haciendo $\xi = -1$ en la ecuación (2.183) se tiene que

$$S_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \leq S_\gamma^\times = \frac{1}{\sum_{k=0}^m (-1)^k \omega_k^{(2-\gamma)}} \quad (2.184)$$

para el caso de m muy grande, es decir, $m \rightarrow \infty$ obtenemos

$$S_\gamma^\times = \lim_{m \rightarrow \infty} S_\gamma^\times = \frac{1}{\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \omega_k^{(2-\gamma)}} \quad (2.185)$$

y teniendo en cuenta que utilizamos la aproximación BDF1, para la que se verifica

$$(1 - z)^{2-\gamma} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(2-\gamma)} z^k . \quad (2.186)$$

Bastaría con hacer en el paréntesis $z = -1$ para obtener la expresión del límite de estabilidad

$$S_{\gamma}^{\times} = \frac{1}{2^{2-\gamma}} = 2^{\gamma-2} . \quad (2.187)$$

Una vez determinado el límite de estabilidad, resulta pertinente realizar un chequeo numérico del mismo. Para ello se seguirá un procedimiento idéntico al que se ha desarrollado en la Sec. 2.1.3 para el chequeo del límite de estabilidad del algoritmo L1 en el caso subdifusivo (que a su vez está basado en el propuesto por S.B. Yuste y L. Acedo en [66]) pero para valores de S_{γ} empezando en $S_{\gamma} = 0.98S_{\gamma}^{\times}$. De este modo, en la Fig. 2.24 representamos $S_{\gamma}^{\min} \sin^2[(2n-1)\pi/(4N)]$ frente a γ tomando $\Delta x = \pi/2N$ y $N = 10$. Se observa que para valores grandes de M el límite de estabilidad predicho en (2.187) coincide con el resultado del chequeo numérico.

En la Fig. 2.25 se puede ver un ejemplo de cómo un valor de S_{γ} por encima del valor límite, conduce a una situación de inestabilidad, mientras que si se considera un valor de S_{γ} por debajo del valor límite, el sistema es perfectamente estable, tal y como se puede comprobar en la Fig. 2.26.

2.2.1.3. Convergencia

Para realizar un análisis de la convergencia se sigue el mismo procedimiento que se desarrolló en la Sec. 2.1. Nuestro punto de partida es el esquema explícito para el método de Yuste-Acedo (2.170)

$$U_j^{(m+1)} = 2U_j^{(m)} - U_j^{(m-1)} + S_{\gamma} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) . \quad (2.188)$$

Si se define $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre el valor exacto y el valor numérico de la solución en el punto (x_j, t_k) , esto es

$$E_j^{(k)} = u(x_j, t_k) - U_j^{(k)} \quad (2.189)$$

entonces a partir del esquema (2.188) y teniendo en cuenta la definición del error de truncamiento (2.172) se obtiene la ecuación que nos describe el modo

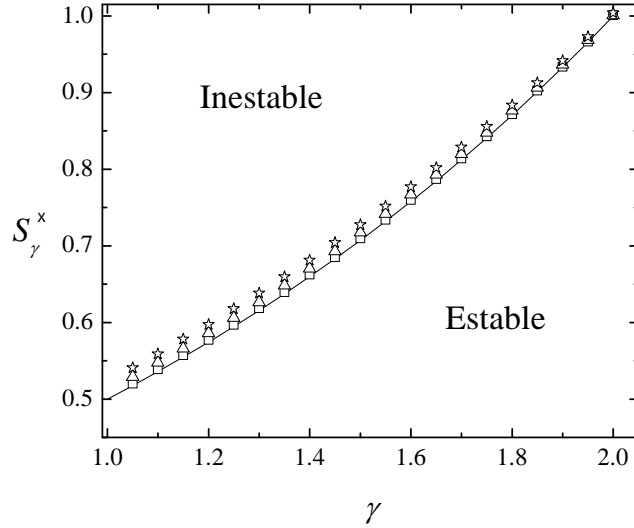


Figura 2.24: Valores de S_γ^x frente al exponente difusivo-ondulatorio γ para el problema (2.165) con $K_\gamma = 1$ cuando se emplea el método de Yuste-Acedo. La línea continua representa la predicción teórica resultado del análisis de Von Neumann, $2^{\gamma-2}$. Las estrellas, los triángulos y los cuadrados representan los resultados de los chequeos numéricos en base al criterio (2.137). Las estrellas corresponden a $M = 100$, los triángulos a $M = 200$ y los cuadrados a $M = 1000$.

en que evoluciona esta diferencia

$$E_j^{(m+1)} - 2E_j^{(m)} + E_j^{(m-1)} - S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left(E_{j+1}^{(m-k)} - 2E_j^{(m-k)} + E_{j-1}^{(m-k)} \right) = T_j^{(m)} \quad (2.190)$$

donde

$$T(x_j, t_m) \equiv T_j^{(m)}. \quad (2.191)$$

De igual manera que se hizo en el análisis de estabilidad, $E_j^{(k)}$ y $T_j^{(m)}$ se escriben como una combinación de modos difusivo-ondulatorios, $E_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)}$.

$e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)} = \sum_q \chi_m^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.190) $E_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)}$ por $\chi_m e^{iqj\Delta x}$, se obtiene

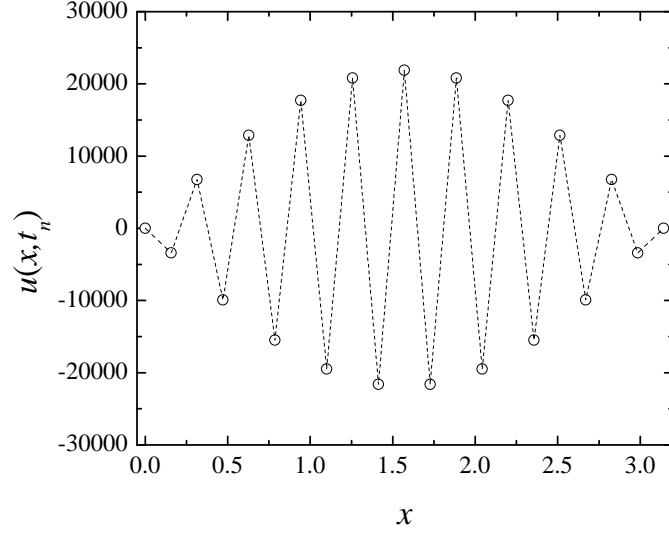


Figura 2.25: Solución del problema (2.165) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 1.5$ mediante el método de Yuste-Acedo. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , siendo $t_n = 17.5$, $\Delta t = 7 \times 10^{-2}$, $\Delta x = \pi/20$ y, por lo tanto, $S \simeq 0.7506$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2^{-\frac{1}{2}} \simeq 0.7071$. Se ha trazado la línea discontinua como ayuda visual.

$$\zeta_{m+1} - 2\zeta_m + \zeta_{m-1} - S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \zeta_{m-k} = \chi_m$$

o lo que es equivalente

$$\zeta_{m+1} = 2\zeta_m - \zeta_{m-1} + \bar{S}_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \zeta_{m-k} + \chi_m \quad (2.192)$$

donde se ha definido \bar{S}_γ como $\bar{S}_\gamma = 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) S_\gamma$.

A continuación se probará que $|\zeta_m| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para todo m , o, lo que es equivalente, que $|\zeta_m| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ para todo m . Para empezar, se tiene que $U_j^{(0)}$ satisface la condición inicial por construcción, luego $E_j^{(0)} = 0$. Esto quiere decir que $\zeta_0 = 0$. Imponiendo que $|\zeta_{-1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, de (2.192) se concluye que $\zeta_1 = \zeta_{-1} + \chi_0 = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ de modo que $|\zeta_1| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. Asumiendo ahora que $|\zeta_k| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$

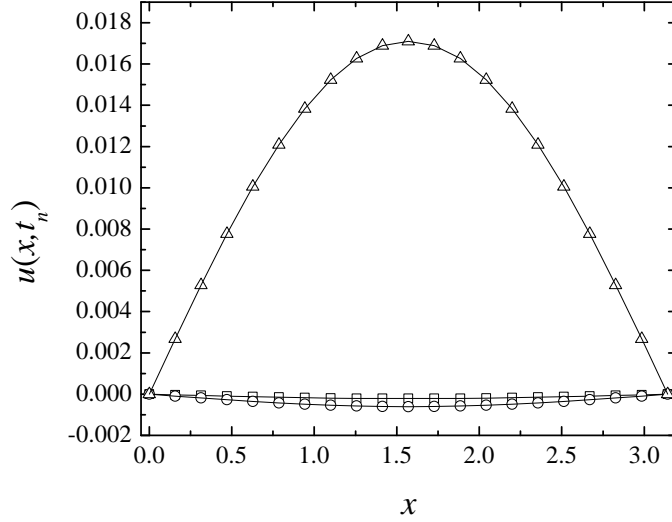


Figura 2.26: Solución del problema (2.165) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 1.5$ mediante el método de Yuste-Acedo. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , para tres tiempos finales, t_n . Se elige $\Delta t = 6 \times 10^{-2}$, $\Delta x = \pi/20$ y, por lo tanto, $S \simeq 0.5956$. Los triángulos corresponden a la solución para $t_n = 6$, los círculos corresponden a la solución para $t_n = 60$ y los cuadrados corresponden a la solución para $t_n = 120$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2^{-\frac{1}{2}} \simeq 0.7071$, claramente superior al considerado en los cálculos. Las líneas continuas corresponden a la solución analítica, $E_{1.5}(-t_n^{1.5}) \cdot \sin x$.

para $k = 0, 1, \dots, m$, se va a probar que $|\zeta_{m+1}| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. De (2.192) se tiene que

$$|\zeta_{m+1}| \leq 2|\zeta_m| + |\zeta_{m-1}| + \bar{S}_\gamma |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=0}^m \left| \omega_k^{(2-\gamma)} \right| + |\chi_m| \quad (2.193)$$

donde $|\zeta_{\{m\}}|$ es el máximo valor de $|\zeta_k|$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Teniendo en cuenta que se emplea la aproximación BDF1, se sabe que nuestros coeficientes satisfacen la siguiente relación

$$(1 - z)^{2-\gamma} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(2-\gamma)}. \quad (2.194)$$

Si hacemos $z = 1$ y utilizamos el hecho de que $\omega_0^{(2-\gamma)} = 1$ es fácil demostrar que $\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k^{(2-\gamma)} = -1$ o, equivalentemente, que $\sum_{k=1}^{\infty} |\omega_k^{(2-\gamma)}| = 1$,

pues $\omega_k^{(2-\gamma)} < 0$ para $k \geq 1$. De esta manera $\sum_{k=0}^m |\omega_k^{(2-\gamma)}|$ es una cantidad acotada (de hecho es menor que 2). Usando este resultado en (2.193) y teniendo en cuenta que $|\zeta_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ y que $|\chi_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, finalmente llegamos a

$$|\zeta_{m+1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2) . \quad (2.195)$$

De esta manera, se ha demostrado que la amplitud del modo difusivo-ondulatorio tiende a cero cuando el tamaño del retículo espacio-temporal tiende a cero. Haciendo uso de la identidad de Parseval esto significa que la norma del error $\|E^{(k)}\|^2 \equiv \sum_j |E_j^{(k)}|^2 = \sum_q |\zeta_k^{(q)}|^2$ tiende a cero cuando Δt y Δx tienden a cero.

2.2.1.4. Análisis de la precisión. Ejemplo numérico

Seguidamente se va a realizar una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica a la resolución del problema (2.165). Para ello se siguen los mismos pasos que se emplearon para los algoritmos correspondientes a la ecuación subdifusiva fraccionaria en la sección 2.1. Se empieza por considerar que el error es de la forma

$$error \equiv E = O[(\Delta t)^a] + O[(\Delta x)^2] \quad (2.196)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta x)^2 . \quad (2.197)$$

En una primera fase, para un valor de γ dado, se fija el valor de Δt y para distintos valores $\Delta_i x$ se calculan los correspondientes errores E_i . De esta manera, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

Se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = 1.5$ y $\gamma_3 = 1.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se fija el valor $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ y se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{\pi}{20}$, $\Delta_2 x = \frac{\pi}{30}$, $\Delta_3 x = \frac{\pi}{40}$, $\Delta_4 x = \frac{\pi}{50}$ y $\Delta_5 x = \frac{\pi}{60}$) para un tiempo final $t_n = 1$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.27 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es de orden $(\Delta x)^2$.

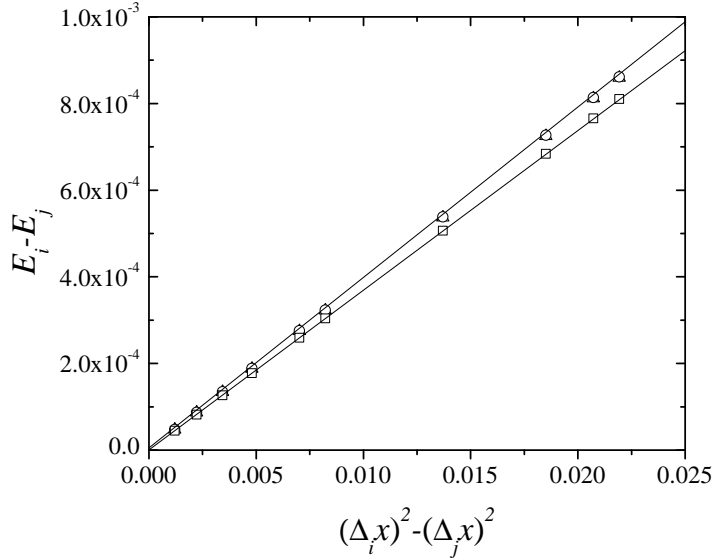


Figura 2.27: Ajuste lineal de $E_i - E_j$ para $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ para $i < j$ (eje x) para cada valor de γ cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.165) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 1.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 5.288 \times 10^{-8} + 3.918 \times 10^{-2}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 1.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.497 \times 10^{-8} + 3.927 \times 10^{-2}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 1.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 1.121 \times 10^{-8} + 3.695 \times 10^{-2}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada γ .

A continuación, una vez conocido el valor de C_2 correspondiente a cada valor de γ considerado, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i . De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$ y obtener el valor de a a partir de la pendiente de la recta de regresión.

Al igual que antes, se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = 1.5$ y $\gamma_3 = 1.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$. En los tres casos se fija $\Delta x = \frac{\pi}{40}$ y se consideran cuatro valores distintos de Δt ($\Delta_1 t = 10^{-2}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-3}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-3}$ y $\Delta_4 t = 10^{-3}$) para un tiempo final $t_n = 1$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.28 y muestran que el error es de orden Δt en todos los casos ya que las pendientes de las tres rectas de regresión son

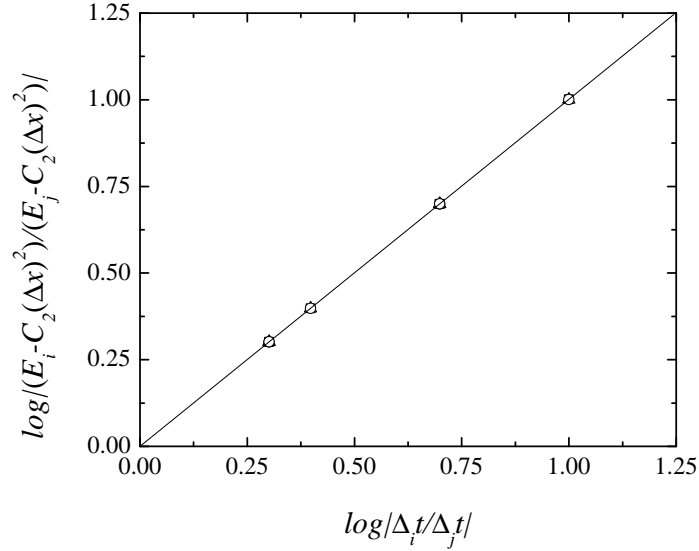


Figura 2.28: Ajuste lineal para cada valor de γ de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ (eje y) frente a $\log \left| \frac{\Delta t_i}{\Delta t_j} \right|$ siendo $i < j$ (eje x) cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para resolver el problema (2.165) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 1.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 1.299 \times 10^{-5} + 1.001x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 1.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.117 \times 10^{-5} + 1.001x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 1.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 2.42 \times 10^{-5} + 1.001x$.

iguales a la unidad.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico y el error de truncamiento son del mismo orden [véase la ecuación (2.176)], esto es

$$error = O(\Delta t) + [(\Delta x)^2] . \quad (2.198)$$

Una vez que se ha definido y analizado el algoritmo numérico (2.170), se comprobará que, efectivamente, proporciona una buena aproximación de la solución exacta. En la Fig. 2.29 se puede ver el buen acuerdo entre la solución analítica en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $E_\gamma(-t^\gamma)$, y la solución numérica para $\gamma = 1.3$, $\gamma = 1.5$ y $\gamma = 1.7$. En la Fig. 2.30 se han representado para los mismos valores de γ el error en el punto medio ($x_0 = \pi/2$) que se toma como el valor absoluto de la diferencia entre la solución numérica y la teórica en $x_0 = \pi/2$, esto es, $|U_0^{(n)} - u(x_0, t_n)|$. Como se deduce de ambas figuras, el esquema numérico funciona bien y el error es aceptable, del orden de 10^{-2}

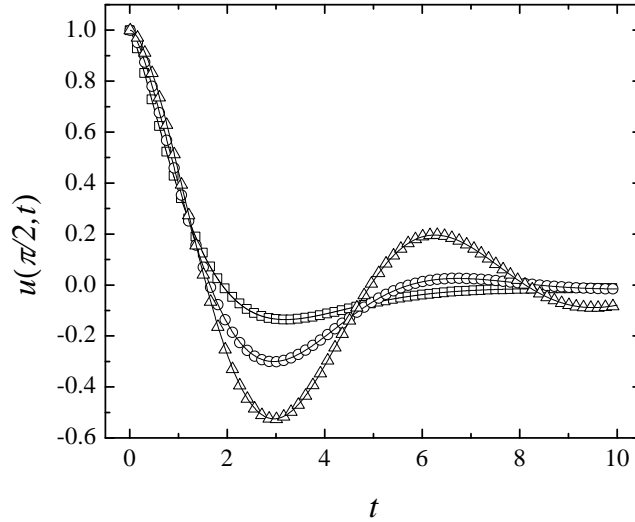


Figura 2.29: Soluciones para $u(x, t)$ en el punto medio, $x_0 = \pi/2$, cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para el problema (2.165) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan la solución numérica para $\gamma = 1.3$, $\Delta t = 10^{-3}$ y $S = 5.102 \times 10^{-3}$. Los círculos representan la solución numérica para $\gamma = 1.5$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $S = 0.04053$. Los triángulos representan la solución numérica para $\gamma = 1.7$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $S = 0.01613$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. Las líneas continuas representan las soluciones analíticas, $E_{1.3}(-t^{1.3})$, $E_{1.5}(-t^{1.5})$, $E_{1.7}(-t^{1.7})$, respectivamente.

veces más pequeño que el valor típico de la función. No obstante, se observa que los errores son mayores que los correspondientes al caso subdifusivo, lo cual constituye una primera evidencia (junto con el carácter oscilante de las soluciones) del distinto comportamiento exhibido por ambos regímenes.

2.2.2. Método de GMCP

El nombre elegido para designar este método tiene su origen en que se trata de una extensión al caso difusivo-ondulatorio del método desarrollado por Gorenflo, Mainardi, Cribisnet y Paradisi [65]. Puesto que la derivada fraccionaria es de Caputo, primero se hará uso de la fórmula (1.13) que liga ambas definiciones y seguidamente, se discretizará la derivada de Riemann-Liouville según la fórmula de Grünwald-Letnikov (1.15).

De esta manera, siguiendo la fórmula (1.13) se tiene que para $1 < \gamma < 2$

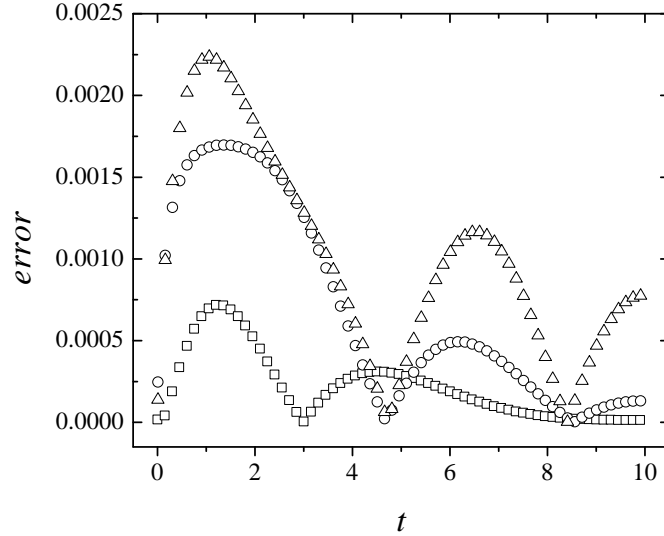


Figura 2.30: Errores en $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, cuando se emplea el algoritmo de Yuste-Acedo para el problema (2.165) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan el error para $\gamma = 1.3$, $\Delta t = 10^{-3}$ y $S = 5.102 \times 10^{-3}$. Los círculos representan el error para $\gamma = 1.5$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $S = 0.04053$. Los triángulos representan el error para $\gamma = 1.7$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $S = 0.01613$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$.

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = {}_0 D_t^\gamma u(x, t) - \frac{u(x, 0^+) \cdot t^{-\gamma}}{\Gamma(1 - \gamma)} - \frac{u'(x, 0^+) \cdot t^{1-\gamma}}{\Gamma(2 - \gamma)}. \quad (2.199)$$

Y si se hace uso de que

$$\begin{aligned} {}_0 D_t^\gamma 1 &= \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1 - \gamma)} \\ {}_0 D_t^\gamma t &= \frac{t^{1-\gamma}}{\Gamma(2 - \gamma)} \end{aligned} \quad (2.200)$$

es inmediato concluir que

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = {}_0 D_t^\gamma \left[u(x, t) - u(x, 0^+) - t \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} \right]. \quad (2.201)$$

Finalmente, utilizando la discretización de Grünwald-Letnikov según la fórmula (1.15) y discretizando la derivada espacial segunda del mismo modo que se hizo en (2.168), se obtiene el siguiente esquema explícito:

$$\begin{aligned} \omega_0^{(\gamma)} U_j^{(m+1)} = & S_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) - \sum_{k=1}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} + \sum_{k=0}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(0)} \\ & + u'(x_j, t=0) \Delta t \sum_{k=0}^{m+1} k \omega_k^{(\gamma)} \end{aligned} \quad (2.202)$$

donde

$$S_\gamma = K_\gamma \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2} \quad (2.203)$$

y donde los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ son los de la aproximación BDF1 dados por (2.19).

En general, el método de Yuste-Acedo y el método de GMCP para el caso difusivo-ondulatorio no son equivalentes. Sin embargo, cuando se evalúan los coeficientes $\omega_k^{(\gamma)}$ con la aproximación BDF1 y se toma como condición inicial $u'(x, 0) = 0$, tal y como se hace en el problema (2.164), ambos esquemas son el mismo, de modo que el estudio del error de truncamiento y el análisis de estabilidad desarrollados para el caso de Yuste-Acedo son perfectamente válidos para el algoritmo de GMCP que, además, es convergente en el mismo sentido que lo es el esquema de Yuste-Acedo. A continuación vamos a demostrar esa no equivalencia general y la equivalencia en el caso particular que se estudia en esta tesis.

2.2.2.1. No equivalencia entre el esquema de Yuste-Acedo y el de GMCP

El esquema de GMCP es

$$\begin{aligned} \omega_0^{(\gamma)} U_j^{(m+1)} = & S_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) - \sum_{k=1}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(m+1-k)} + \sum_{k=0}^{m+1} \omega_k^{(\gamma)} U_j^{(0)} \\ & + u'(x_j, t=0) \cdot \Delta t \sum_{k=0}^{m+1} k \omega_k^{(\gamma)} \end{aligned} \quad (2.204)$$

y el esquema de Yuste-Acedo es

$$U_j^{(m+1)} = 2U_j^{(m)} - U_j^{(m-1)} + S_\gamma \sum_{k=0}^m \omega_k^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \quad (2.205)$$

siendo

$$S_\gamma = \frac{K_\gamma(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2} \quad (2.206)$$

Se van a comparar ambos esquemas para $m = 0$. El algoritmo de GMCP queda

$$\omega_0^{(\gamma)} U_j^{(1)} = S_\gamma \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) + U_j^{(0)} \omega_0^{(\gamma)} + g_j \Delta t \omega_1^{(\gamma)} \quad (2.207)$$

o, equivalentemente

$$U_j^{(1)} = \frac{S_\gamma}{\omega_0^{(\gamma)}} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) + U_j^{(0)} + g_j \Delta t \frac{\omega_1^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} . \quad (2.208)$$

Por otra parte, el método de Yuste-Acedo para $m = 0$ queda

$$U_j^{(1)} = 2U_j^{(0)} - U_j^{(-1)} + S_\gamma \omega_0^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) . \quad (2.209)$$

Se considerarán dos posibilidades para estimar $U_j^{(-1)}$ a partir de la condición inicial sobre la derivada:

- **[Método dt2]**. Se usa la fórmula de derivada *central* cuyo error es de orden $(\Delta t)^2$

$$\left. \frac{\partial u(x_j, t)}{\partial t} \right|_{t=0} \equiv g_j \simeq \frac{U_j^{(1)} - U_j^{(-1)}}{2\Delta t} \Rightarrow U_j^{(-1)} \simeq U_j^{(1)} - 2g_j \Delta t \quad (2.210)$$

de modo que el esquema de Yuste-Acedo para $m = 0$ puede reescribirse en la forma

$$U_j^{(1)} = 2U_j^{(0)} + g_j \Delta t + \frac{1}{2} S_\gamma \omega_0^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) . \quad (2.211)$$

En tales circunstancias, para que los métodos de Yuste-Acedo y GMCP sean equivalentes debe ocurrir que

$$\frac{\omega_0^{(2-\gamma)}}{2} = \frac{1}{\omega_0^{(\gamma)}} \Leftrightarrow \omega_0^{(2-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = 2 , \quad (2.212)$$

$$\frac{\omega_1^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} = -1 . \quad (2.213)$$

Estas relaciones no son satisfechas por los esquemas de discretización habituales. En particular, no las satisface ningún esquema BDFn.

• [Método dt1]. Se usa la fórmula de derivada *lateral* cuyo error es de orden Δt

$$\left. \frac{\partial u(x_j, t)}{\partial t} \right|_{t=0} \equiv g_j \simeq \frac{U_j^{(0)} - U_j^{(-1)}}{\Delta t} \Rightarrow U_j^{(-1)} \simeq U_j^{(0)} - g_j \Delta t \quad (2.214)$$

de modo que el esquema de Yuste-Acedo para $m = 0$ puede reescribirse en la forma

$$U_j^{(1)} = U_j^{(0)} + g_j \Delta t + S_\gamma \omega_0^{(2-\gamma)} \left(U_{j-1}^{(0)} - 2U_j^{(0)} + U_{j+1}^{(0)} \right) . \quad (2.215)$$

En tales circunstancias, para que los métodos de Yuste-Acedo y GMCP sean equivalentes debe ocurrir que

$$\omega_0^{(2-\gamma)} = \frac{1}{\omega_0^{(\gamma)}} \Leftrightarrow \omega_0^{(2-\gamma)} \omega_0^{(\gamma)} = 1 , \quad (2.216)$$

$$\frac{\omega_1^{(\gamma)}}{\omega_0^{(\gamma)}} = -1 . \quad (2.217)$$

La primera relación se satisface para la aproximación BDF1, pero la segunda no. Sin embargo, si $g_j \equiv \partial u(x_j, t)/\partial t|_{t=0} = 0$, como es nuestro caso, sólo se tiene que satisfacer la primera relación y, puesto que en nuestros cálculos empleamos la discretización BDF1, la equivalencia entre ambos esquemas es evidente y se puede demostrar por inducción con idéntico procedimiento al que hemos desarrollado para el caso subdifusivo. Las relaciones (2.216) no se satisfacen para las aproximaciones BDFn con $n = 2, 3$.

2.2.3. Método L2

El nombre elegido para designar este método tiene su origen en el hecho de que emplea la discretización L2 que aparece en [6] para aproximar la derivada de Caputo. En realidad, este método es la extensión al caso difusivo-ondulatorio del método L1 que se ha estudiado en la Sec. 2.1.3. Puesto que la derivada fraccionaria temporal es de Caputo, se va a proceder a su discretización de modo directo aplicando la aproximación L2 que hemos visto en la Sec. 1.2.2. La derivada espacial segunda se discretizará empleando la misma fórmula que se ha visto en (2.168). De esta manera se llega a una expresión del tipo

$$\partial_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) = K_\gamma \frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} + T(x_j, t_m) \quad (2.218)$$

siendo

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} \left(\frac{u(x_j, t_{m-k}) - 2u(x_j, t_{m-1-k}) + u(x_j, t_{m-2-k})}{(\Delta t)^2} \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} \frac{d\xi}{(t_m - \xi)^{\gamma-1}} \right) \quad (2.219)$$

o equivalentemente

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) = \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(3-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} ([u(x_j, t_{m-k}) - 2u(x_j, t_{m-1-k}) + u(x_j, t_{m-2-k})] \cdot [(k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}]) \quad (2.220)$$

y donde $T(x_j, t_m)$ es el denominado error de truncamiento en el punto (x_j, t_m) . Con vistas al ulterior análisis de $T(x_j, t_m)$, se ha de tener presente que de acuerdo con (1.24)

$${}_0^C D_t^\gamma u(x_j, t_m) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) + O(\Delta t) \quad (2.221)$$

y además

$${}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_m) + O(\Delta t) . \quad (2.222)$$

Finalmente, utilizando (2.220), evaluada en t_{m+1} , en la ecuación (2.152) y discretizando la derivada espacial segunda, evaluada en t_m , del modo que se muestra en (2.218) se obtiene el siguiente esquema explícito:

$$U_j^{(m+1)} = 2U_j^{(m)} - U_j^{(m-1)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(U_j^{(m+1-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_j^{(m-1-k)} \right) + \bar{S}_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right) \quad (2.223)$$

donde

$$\bar{S}_\gamma = K_\gamma \Gamma(3-\gamma) \frac{(\Delta t)^\gamma}{(\Delta x)^2} \quad (2.224)$$

y donde

$$b_k = (k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}, \text{ con } k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.225)$$

Por simplicidad en la notación, cuando se hace referencia a valores numéricos concretos de \bar{S}_γ o de $S_\gamma = \bar{S}_\gamma / \Gamma(3-\gamma)$ se escribe \bar{S} o S respectivamente. En la Sec. 3 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para este algoritmo aplicado a la resolución del problema (2.164).

A continuación se va a estudiar el error de truncamiento.

2.2.3.1. Error de Truncamiento

El error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ se define a partir de (2.218) como

$$T(x_j, t_m) = {}_0\delta_t^\gamma u(x_j, t_{m+1}) - K_\gamma \frac{u(x_{j-1}, t_m) - 2u(x_j, t_m) + u(x_{j+1}, t_m)}{(\Delta x)^2} \tag{2.226}$$

pero por otra parte

$$\frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} = u_{xx} + \frac{1}{12}u_{xxxx}(\Delta x)^2 + \dots \tag{2.227}$$

siendo $u_{xx} \equiv \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j}$ y $u_{xxxx} \equiv \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} \Big|_{x=x_j}$ y donde se ha empleado la notación simplificada $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$. También se sabe por (2.220) y (2.221) que

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\gamma u(x_j, t_m) &= \frac{(\Delta t)^{-\gamma}}{\Gamma(3-\gamma)} \sum_{k=0}^{m-1} [(k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}] [u(x_j, t_{m-k}) \\ &\quad - 2u(x_j, t_{m-1-k}) + u(x_j, t_{m-2-k})] + O(\Delta t) . \end{aligned} \tag{2.228}$$

Así que, teniendo en cuenta que $u(x, t)$ es la solución exacta de la ecuación (2.152), finalmente se obtiene a partir de (2.222), (2.226), (2.227) y (2.228) el siguiente resultado

$$T(x_j, t_m) = O(\Delta t) - \frac{K_\gamma(\Delta x)^2}{12}u_{xxxx} + \dots = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \tag{2.229}$$

2.2.3.2. Análisis de Estabilidad

Para llevar a cabo el análisis de estabilidad del esquema explícito dado en (2.223) se utiliza, al igual que en el caso correspondiente al método de Yuste-Acedo para la ecuación difusivo-ondulatoria en la Sec. 2.2.1, el procedimiento de tipo Von Neumann desarrollado por S.B. Yuste en [66, 62]. Sean $\hat{U}_j^{(k)}$ y $U_j^{(k)}$ soluciones numéricas de (2.170) en el punto (x_j, t_k) que se diferencian inicialmente por una cantidad pequeña, la perturbación, $e_j^{(0)}$. Se define entonces $e_j^{(k)}$ de la siguiente manera:

$$e_j^{(k)} = \hat{U}_j^{(k)} - U_j^{(k)} . \tag{2.230}$$

El algoritmo (2.223) se transforma en el siguiente esquema explícito que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$e_j^{(m+1)} = 2e_j^{(m)} - e_j^{(m-1)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(e_j^{(m+1-k)} - 2e_j^{(m-k)} + e_j^{(m-1-k)} \right) \\ \bar{S}_\gamma \left(e_{j+1}^{(m)} - 2e_j^{(m)} + e_{j-1}^{(m)} \right) \quad (2.231)$$

donde

$$\bar{S}_\gamma = \Gamma(3 - \gamma) S_\gamma . \quad (2.232)$$

A continuación, se escribe $e_j^{(k)}$ como una combinación de modos difusivo-ondulatorios, $e_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.231) $e_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $e_j^{(m+1)}$, $e_{j-1}^{(m)}$ y $e_{j+1}^{(m)}$ por sus expresiones homólogas, se obtiene

$$\zeta_{m+1} e^{iqj\Delta x} = 2\zeta_m e^{iqj\Delta x} - \zeta_{m-1} e^{iqj\Delta x} - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - 2\zeta_{m-k} + \zeta_{m-1-k}) e^{iqj\Delta x} \\ + \bar{S}_\gamma (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \zeta_m e^{iqj\Delta x} \quad (2.233)$$

expresión que simplificada queda en la forma

$$\zeta_{m+1} = 2\zeta_m - \zeta_{m-1} - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - 2\zeta_{m-k} + \zeta_{m-1-k}) \\ + \bar{S}_\gamma (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \zeta_m . \quad (2.234)$$

Si tenemos en cuenta que

$$\zeta_{m+1} = \xi \zeta_m \quad (2.235)$$

donde ξ es un factor de amplificación, y aplicando la conocida relación

$$\text{sen} \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = \frac{e^{\frac{iq\Delta x}{2}} - e^{-\frac{iq\Delta x}{2}}}{2i} \quad (2.236)$$

la ecuación (2.234) queda como sigue

$$\xi = 2 - \xi^{-1} - \sum_{k=1}^m b_k [\xi^{1-k} - 2\xi^{-k} + \xi^{-1-k}] - 4\bar{S}_\gamma \text{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) . \quad (2.237)$$

Si $|\xi| > 1$ para algún valor de q , el factor temporal de la solución crece hasta infinito de acuerdo con la ecuación (2.235) y el modo es inestable.

En consecuencia, para que el modo sea estable es preciso que $|\xi| \leq 1$. Considerando $\xi < 1$, podemos tomar el valor límite $\xi = -1$. De esta manera, haciendo $\xi = -1$ en la ecuación (2.237) se tiene que

$$-4\bar{S}_\gamma \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) = -4 - 4 \sum_{k=1}^m (-1)^k [(k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}] . \quad (2.238)$$

Así, se llega a que

$$\bar{S}_\gamma \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \leq \bar{S}_\times^{(m)} = 1 + \sum_{k=1}^m (-1)^k [(k+1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}] \quad (2.239)$$

Considerando el caso de m muy grande, es decir, $m \rightarrow \infty$, se tiene que

$$\bar{S}_\gamma^\times = \lim_{m \rightarrow \infty} \bar{S}_\times^{(m)} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k k^{2-\gamma} . \quad (2.240)$$

Y expresando esta relación en términos de la función zeta, $\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s}$, llegamos a que el límite de estabilidad para el esquema L2 toma la forma

$$\bar{S}_\gamma^\times = 2 \cdot \zeta(\gamma - 2) \cdot (1 - 2^{3-\gamma}) . \quad (2.241)$$

Una vez determinado el límite de estabilidad, es de gran interés realizar un chequeo numérico del mismo. Para ello se seguirá un procedimiento idéntico al que se ha desarrollado en la Sec. 2.2.1 para el chequeo del límite de estabilidad del algoritmo Yuste-Acedo en el caso difusivo-ondulatorio (que a su vez está basado en el propuesto por S.B. Yuste y L. Acedo en [66]) pero para valores de S_γ empezando en $S_\gamma = 0.98 \cdot 0.5\gamma$. Con esta elección, nos aseguramos valores inferiores y cercanos al valor del límite teórico de estabilidad dado en (2.241) (obsérvese que 0.5 es el valor del límite de estabilidad dado por (2.241) para $\gamma = 1$). De este modo, en la Fig. 2.31 representamos $S_\gamma^{\min} \operatorname{sen}^2[(2n-1)\pi/(4N)]$ frente a γ tomando $\Delta x = \pi/2N$ y $N = 10$. Se observa que para valores grandes de M el límite de estabilidad predicho en (2.241) coincide con el resultado del chequeo numérico. Elegimos representar S_γ en lugar de \bar{S}_γ para poder establecer ulteriores comparaciones con el límite de estabilidad obtenido para el método de Yuste-Acedo (que a la sazón es el mismo del método de GMCP).

En la Fig. 2.32 se puede ver un ejemplo de cómo un valor de S_γ por encima del valor límite, conduce a una situación de inestabilidad, mientras que si se considera con un valor de S_γ por debajo del valor límite, el sistema es perfectamente estable, tal y como se puede comprobar en la Fig. 2.33

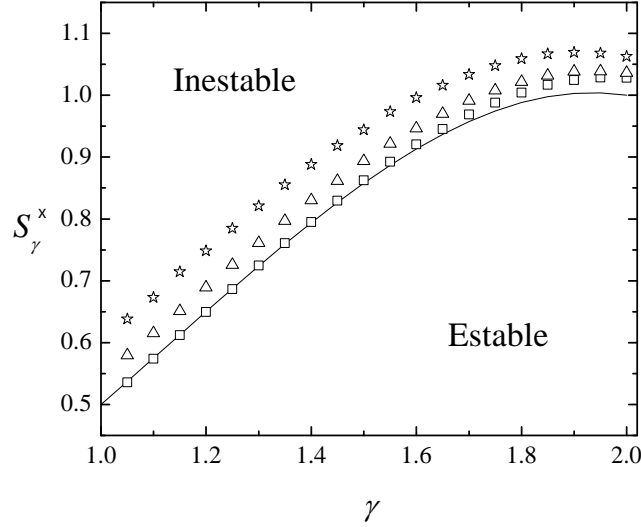


Figura 2.31: Valores de $S_\gamma^x = \bar{S}_\gamma^x / \Gamma(3 - \gamma)$ frente al exponente difusivo-ondulatorio γ para el problema (2.164) con $K_\gamma = 1$ cuando empleamos el método L2. La línea continua representa la predicción teórica resultado del análisis de Von Neumann, $2 \cdot \zeta(\gamma - 2) \cdot (1 - 2^{3-\gamma}) / \Gamma(3 - \gamma)$. Las estrellas, los triángulos y los cuadrados representan los resultados de los chequeos numéricos en base al criterio (2.137). Las estrellas corresponden a $M = 100$, los triángulos a $M = 200$ y los cuadrados a $M = 1000$.

2.2.3.3. Convergencia

Para realizar un análisis de la convergencia se sigue el mismo procedimiento desarrollado en la Sec. 2.2.1 para el método de Yuste-Acedo al estilo del desarrollado por Liu et al. en [68]. Se parte del esquema explícito para el método L2 (2.223)

$$U_j^{(m+1)} = 2U_j^{(m)} - U_j^{(m-1)} - \sum_{k=1}^m b_k \left(U_j^{(m+1-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_j^{(m-1-k)} \right) + \bar{S}_\gamma \left(U_{j-1}^{(m)} - 2U_j^{(m)} + U_{j+1}^{(m)} \right). \quad (2.242)$$

Si se define $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre el valor exacto y el valor numérico de la solución en el punto (x_j, t_k) , esto es

$$E_j^{(k)} = u(x_j, t_k) - U_j^{(k)} \quad (2.243)$$

entonces a partir del esquema (2.242) y teniendo en cuenta la definición del error de truncamiento (2.226) se obtiene la ecuación que describe el modo en

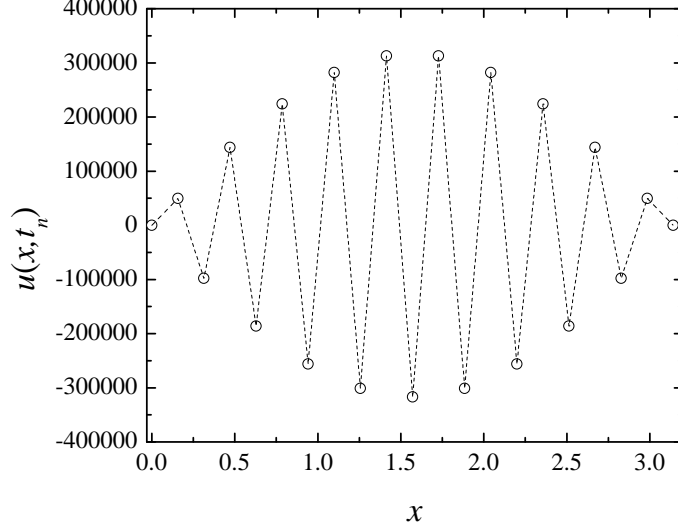


Figura 2.32: Solución del problema (2.164) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 1.5$ mediante el método L2. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , siendo $t_n = 16$, $\Delta t = 8 \times 10^{-2}$, $\Delta x = \pi/20$ y, por tanto, $S \simeq 0.917$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2 \cdot \zeta(-0.5) \cdot (1 - 2^{1.5})/\Gamma(1.5) \simeq 0.86$. Se ha trazado la línea discontinua como ayuda visual.

que evoluciona esta diferencia

$$\begin{aligned}
 & E_j^{(m+1)} - 2E_j^{(m)} + E_j^{(m-1)} - \bar{S}_\gamma \left(E_{j+1}^{(m-k)} - 2E_j^{(m-k)} + E_{j-1}^{(m-k)} \right) \\
 & + \sum_{k=1}^m b_k \left(E_j^{(m+1-k)} - E_j^{(m-k)} + E_j^{(m-1-k)} \right) = T_j^{(m)}
 \end{aligned} \tag{2.244}$$

donde

$$T(x_j, t_m) \equiv T_j^{(m)}. \tag{2.245}$$

De igual manera que se hizo en el análisis de estabilidad, $E_j^{(k)}$ y $T_j^{(m)}$ se escriben como una combinación de modos difusivo-ondulatorios, $E_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)} = \sum_q \chi_m^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.244) $E_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$

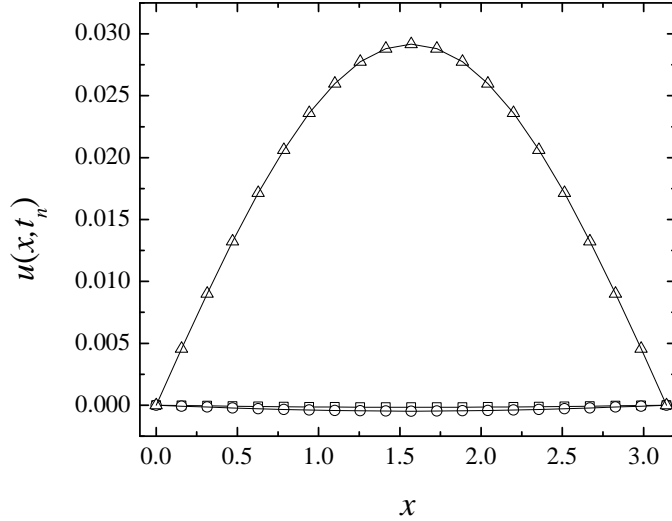


Figura 2.33: Solución del problema (2.164) con $K_\gamma = 1$ para el caso $\gamma = 1.5$ mediante el método L2. Se han representado los valores de $u(x, t_n)$ frente a x , para tres tiempos finales, t_n . Elegimos $\Delta t = 7 \times 10^{-2}$, $\Delta x = \pi/20$ y, por lo tanto, $S \simeq 0.7505$. Los triángulos corresponden a la solución para $t_n = 7$, los círculos corresponden a la solución para $t_n = 70$ y los cuadrados corresponden a la solución para $t_n = 140$. El valor límite de estabilidad deducido mediante el procedimiento de Von Neumann es $S = 2 \cdot \zeta(-0.5) \cdot (1 - 2^{1.5})/\Gamma(1.5) \simeq 0.86$, claramente superior al considerado en los cálculos. Las líneas continuas corresponden a la solución analítica, $E_{1.5}(-t_n^{1.5}) \cdot \sin x$.

y $T_j^{(m)}$ por $\chi_m e^{iqj\Delta x}$, se obtiene

$$\begin{aligned} & \zeta_{m+1} - 2\zeta_m + \zeta_{m-1} - 4\bar{S}_\gamma \sin^2\left(\frac{q\Delta x}{2}\right) \zeta_m \\ & + \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - 2\zeta_{m-k} + \zeta_{m-1-k}) = \chi_m \end{aligned} \quad (2.246)$$

o lo que es equivalente

$$\zeta_{m+1} = (2 + \hat{S}_\gamma)\zeta_m - \zeta_{m-1} - \sum_{k=1}^m b_k (\zeta_{m+1-k} - 2\zeta_{m-k} + \zeta_{m-1-k}) + \chi_m \quad (2.247)$$

donde se ha definido \hat{S}_γ como $\hat{S}_\gamma = 4 \sin^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \bar{S}_\gamma$. Esta ecuación puede ser reescrita en la siguiente forma para $k > 1$

$$\begin{aligned} \zeta_{m+1} = & \left(2 + \hat{S}_\gamma - b_1 \right) \zeta_m + b_{m+1} \zeta_0 - \sum_{k=1}^{m-1} (b_k - 2b_{k+1} + b_{k+2}) \zeta_{m-1-k} \\ & + (2b_1 - b_2 - 1) \zeta_{m-1} - b_m \zeta_{-1} + \chi_m \end{aligned} \quad (2.248)$$

donde se ha de tener en cuenta que

$$b_k > b_{k+1} \quad \forall k, \quad (2.249a)$$

$$b_1 \leq 1, \quad (2.249b)$$

$$b_k - 2b_{k+1} - b_{k+2} > 0. \quad (2.249c)$$

A continuación se probará que $|\zeta_m| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para todo m , o, lo que es equivalente, que $|\zeta_m| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ para todo m . Para empezar, se sabe que $U_j^{(0)}$ satisface la condición inicial por construcción, luego $E_j^{(0)} = 0$. Esto quiere decir que $\zeta_0 = 0$. Imponiendo que $|\zeta_{-1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ a partir de (2.247) se concluye que $\zeta_1 = -\zeta_{-1} + \chi_0 = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ de modo que $|\zeta_1| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. Se asume ahora que $|\zeta_k| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Entonces, se va a probar que $|\zeta_{m+1}| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. De (2.143) se tiene que

$$\begin{aligned} |\zeta_{m+1}| \leq & \left| 2 + \hat{S}_\gamma - b_1 \right| |\zeta_m| + |b_{m+1}| |\zeta_0| + |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=1}^{m-1} |b_k - 2b_{k+1} + b_{k+2}| \\ & + |2b_1 - b_2 - 1| |\zeta_{m-1}| + |b_m| |\zeta_{-1}| + |\chi_m| \end{aligned} \quad (2.250)$$

donde $|\zeta_{\{m\}}|$ es el máximo valor de $|\zeta_k|$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Teniendo en cuenta (2.249) resulta

$$\sum_{k=1}^{m-1} |b_k - 2b_{k+1} + b_{k+2}| = \sum_{k=1}^{m-1} b_k - 2b_{k+1} + b_{k+2} = b_1 - b_2 + b_{m+1} - b_m > 0. \quad (2.251)$$

Es claro que de (2.249) y de la propia definición de \hat{S}_γ se puede concluir que todos los coeficientes que multiplican a las $|\zeta_k|$ en (2.250) son cantidades acotadas. Usando este resultado en (2.250) y teniendo en cuenta que $|\zeta_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ y que $|\chi_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, finalmente se llega a

$$|\zeta_{m+1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2). \quad (2.252)$$

De esta manera, se ha demostrado que la amplitud del modo difusivo-ondulatorio tiende a cero cuando el tamaño de la malla espacio-temporal tiende a cero. Haciendo uso de la identidad de Parseval esto significa que la norma del error $\|E^{(k)}\|^2 \equiv \sum_j |E_j^{(k)}|^2 = \sum_q |\zeta_k^{(q)}|^2$ tiende a cero cuando Δt y Δx tienden a cero.

2.2.3.4. Análisis de la precisión. Ejemplo numérico

A continuación se va a llevar a cabo una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica a la resolución del problema (2.164). Para ello se sigue el procedimiento descrito en la Sec. 2.2.1 que es el mismo que se ha utilizado para los algoritmos de la ecuación subdifusiva fraccionaria. Se empieza por considerar que el error es de la forma

$$\text{error} \equiv E = O((\Delta t)^a) + O((\Delta x)^2) \quad (2.253)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t)^a + C_2(\Delta x)^2. \quad (2.254)$$

En una primera fase, para un valor de γ dado, se fija el valor de Δt y para distintos valores $\Delta_i x$ se calculan los correspondientes errores E_i . De esta manera, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

Se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = 1.5$ y $\gamma_3 = 1.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $E_i - E_j$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los tres casos se fija $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ y se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{\pi}{20}$, $\Delta_2 x = \frac{\pi}{30}$, $\Delta_3 x = \frac{\pi}{40}$, $\Delta_4 x = \frac{\pi}{50}$ y $\Delta_5 x = \frac{\pi}{60}$) para un tiempo final $t_n = 10^{-4}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.34 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es de orden $(\Delta x)^2$.

A continuación, una vez conocido el valor de C_2 correspondiente a cada valor de γ considerado, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i . De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$ y obtener el valor de a a partir de la pendiente de la recta de regresión.

Al igual que antes, se han considerado tres valores distintos de γ ($\gamma_1 = 1.3$, $\gamma_2 = 1.5$ y $\gamma_3 = 1.7$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ con $i < j$. En los tres casos se se fija $\Delta x = \frac{\pi}{40}$ y se consideran cuatro valores distintos de Δt ($\Delta_1 t = 10^{-6}$, $\Delta_2 t = 5 \times 10^{-7}$, $\Delta_3 t = 2 \times 10^{-7}$ y $\Delta_4 t = 10^{-7}$) para un tiempo final $t_n = 1$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.35 y muestran que el error

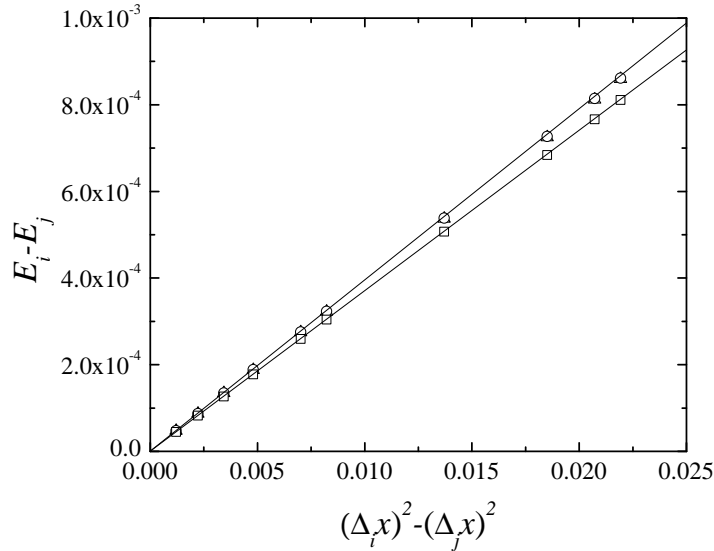


Figura 2.34: Ajuste lineal de $E_i - E_j$ para $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ para $i < j$ (eje x) para cada valor de γ cuando empleamos el algoritmo L2 para resolver el problema (2.164) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 1.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 5.296 \times 10^{-8} + 3.918 \times 10^{-2}x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 1.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.524 \times 10^{-8} + 3.928 \times 10^{-2}x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 1.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 1.099 \times 10^{-8} + 3.696 \times 10^{-2}x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión nos proporcionan el valor de C_2 para cada γ .

es de orden Δt en todos los casos ya que las pendientes de las tres rectas de regresión son muy próximas a la unidad.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico y el error de truncamiento son del mismo orden [véase la ecuación (2.229)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \tag{2.255}$$

Una vez definido y estudiado el algoritmo numérico (2.223), se comprobará que, efectivamente, proporciona una buena aproximación de la solución exacta. En la Fig. 2.36 podemos ver el buen acuerdo entre la solución analítica en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $E_\gamma(-t^\gamma)$, y la solución numérica para $\gamma = 1.3$, $\gamma = 1.5$ y $\gamma = 1.7$. En la Fig. 2.37 se ha representado para los mismos valores de γ el error en el punto medio ($x_0 = \pi/2$) que tomamos como el valor absoluto de la diferencia entre la solución numérica y la teórica en $x_0 = \pi/2$, esto

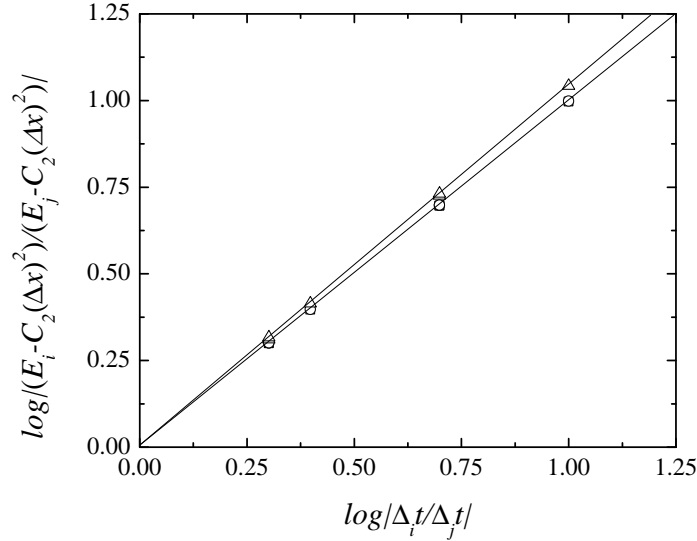


Figura 2.35: Ajuste lineal para cada valor de γ de $\log \left| \frac{E_i - C_2(\Delta x)^2}{E_j - C_2(\Delta x)^2} \right|$ (eje y) frente a $\log \left| \frac{\Delta_i t}{\Delta_j t} \right|$ siendo $i < j$ (eje x) cuando empleamos el algoritmo L2 para resolver el problema (2.164) con $K_\gamma = 1$. Los triángulos corresponden al caso $\gamma = 1.7$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 8.983 \times 10^{-5} + 1.043x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma = 1.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 1.674 \times 10^{-5} + 0.9984x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma = 1.3$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -2.247 \times 10^{-5} + 0.9967x$.

es, $|U_0^{(n)} - u(x_0, t_n)|$. Como se deduce de ambas figuras, el esquema numérico funciona bien y el error es del orden de 10^{-2} veces más pequeño que el valor típico de la solución.

2.2.4. Comparación entre los tres métodos

Al igual que en el caso subdifusivo, se compararán a continuación las precisiones y los límites de estabilidad de los tres algoritmos explícitos desarrollados. En la Fig. 2.38 se puede observar una comparativa de los errores para $\gamma = 1.5$ correspondientes a los algoritmos de Yuste-Acedo (y GMCP) y L2, que aparecen recogidos en las Figs. 2.30 y 2.37, respectivamente. Como ya se ha comentado con anterioridad, los métodos de Yuste-Acedo y de GMCP son un mismo método para los problemas equivalentes (2.164) y (2.165) considerados, por lo que, en sentido estricto, se comparan los errores de dos algoritmos numéricos distintos, no de tres. La gráfica es muy ilustrativa: los

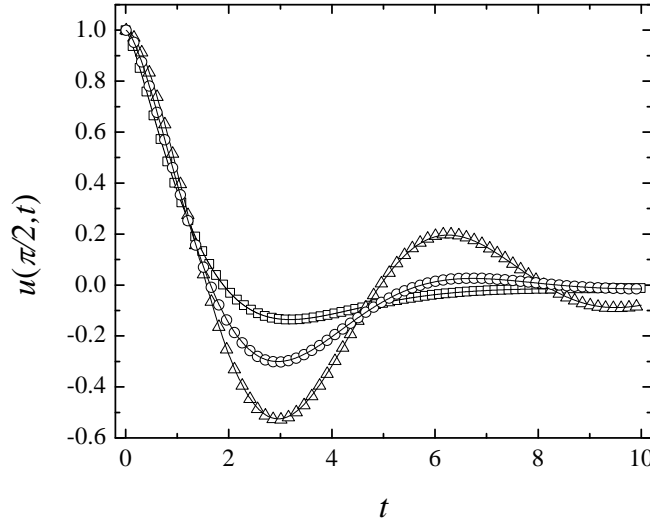


Figura 2.36: Soluciones para $u(x, t)$ en el punto medio, $x_0 = \pi/2$, cuando se emplea el algoritmo L2 para el problema (2.164) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan la solución numérica para $\gamma = 1.3$, $\Delta t = 10^{-3}$ y $\bar{S} = 4.636 \times 10^{-3}$. Los círculos representan la solución numérica para $\gamma = 1.5$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $\bar{S} = 0.03592$. Los triángulos representan la solución numérica para $\gamma = 1.7$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $\bar{S} = 0.01448$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$. Las líneas continuas representan las soluciones analíticas, $E_{1.3}(-t^{1.3})$, $E_{1.5}(-t^{1.5})$, $E_{1.7}(-t^{1.7})$, respectivamente.

errores, de una magnitud similar, son de orden $O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2]$ y disminuyen a medida que t crece. Para tiempos pequeños (inferiores a $t = 2$) el método L2 arroja un error más pequeño que el de Yuste-Acedo (y GMCP) pero para tiempos mayores ($t > 2$) es el algoritmo de Yuste-Acedo (y GMCP) el que ofrece mejores resultados, con un menor error. El comportamiento exhibido para $\gamma = 1.5$ es generalizable para cualquier $\gamma \in (1, 2)$, como se deduce de la información recogida en las Figs. 2.30 y 2.37 para $\gamma = 1.3$ y $\gamma = 1.7$.

El estudio comparado de los límites de estabilidad proporciona información relevante sobre el comportamiento de los diferentes algoritmos. La Fig. 2.39 muestra que la región de estabilidad correspondiente al método L2 es mayor que la región de estabilidad correspondiente a los métodos de Yuste-Acedo y GMCP, es decir, que para cada valor de γ , el valor límite de S_γ^\times para L2 es mayor o igual que el valor de S_γ^\times para los otros dos métodos.

De esta manera, si se comparan los tres métodos cuando se aplican a la resolución de los problemas (2.164) y (2.165), se puede concluir que para

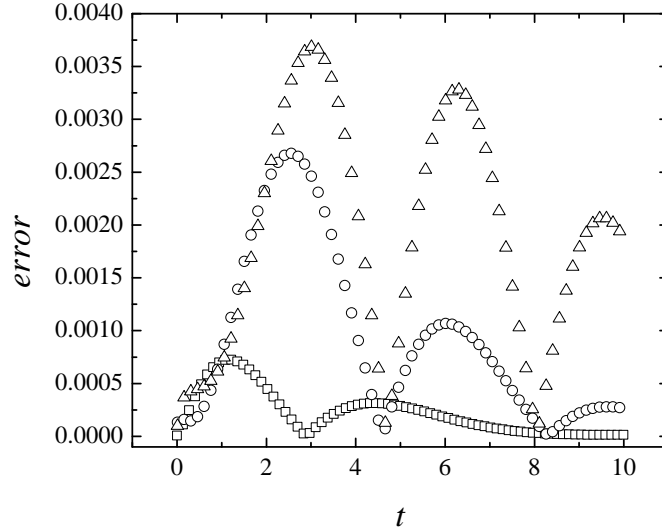


Figura 2.37: Errores en $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, cuando se emplea el algoritmo L2 para el problema (2.164) con $K_\gamma = 1$. Los cuadrados representan el error para $\gamma = 1.3$, $\Delta t = 10^{-3}$ y $\bar{S} = 4.636 \times 10^{-3}$. Los círculos representan el error para $\gamma = 1.5$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $\bar{S} = 0.03592$. Los triángulos representan el error para $\gamma = 1.7$, $\Delta t = 10^{-2}$ y $\bar{S} = 0.01448$. En todos los casos $\Delta x = \pi/20$.

tiempos pequeños el algoritmo L2 es el que proporciona un error más reducido, lo cual, sumado a la ventaja comparativa que supone el hecho de poseer un mayor límite de estabilidad, hace de éste el esquema más adecuado para ese régimen de tiempos. No obstante, para un rango temporal superior, el algoritmo de Yuste-Acedo (GMCP) resulta más preciso.

2.3. Ecuación de cable fraccionaria

En las dos secciones anteriores se han desarrollado diferentes algoritmos explícitos que tienen su origen en distintas discretizaciones de la derivada temporal fraccionaria y que han permitido resolver tanto la ecuación subdifusiva como la ecuación difusivo-ondulatoria, ambas fraccionarias. Asimismo, se ha desarrollado un exitoso procedimiento de tipo Von Neumann para la determinación del límite de estabilidad de los esquemas implementados. Llegados a este punto, cabe preguntarse si los esquemas explícitos son una buena opción para resolver ecuaciones en derivadas parciales fraccionarias que sean

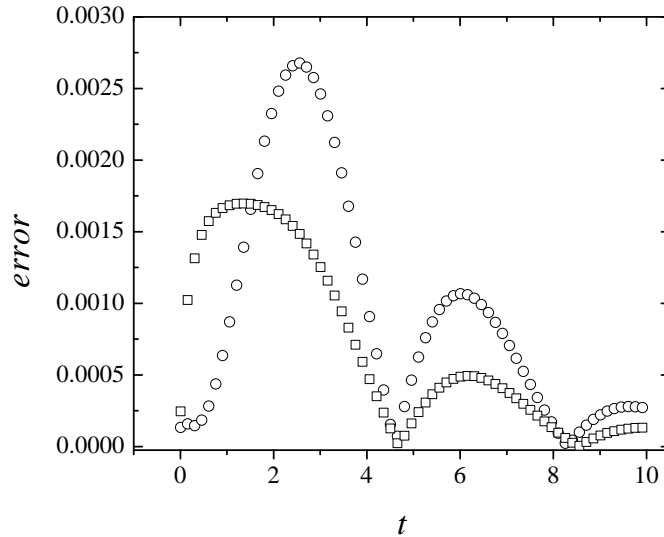


Figura 2.38: En la gráfica principal tenemos una comparación de los errores en el punto medio $x_0 = \pi/2$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, correspondientes a los algoritmos de Yuste-Acedo y GMCP (cuadrados) y L2 (círculos) para $\gamma = 1.5$. En ambos casos se ha empleado $\Delta t = 10^{-2}$ y $\Delta x = \pi/20$.

de una mayor complejidad y si el procedimiento establecido para determinar el límite de estabilidad sigue siendo igual de válido cuando se aplica sobre estas ecuaciones. Aquí se va a discutir un ejemplo que muestra que los métodos son también útiles para otro tipo de ecuaciones fraccionarias [74].

La ecuación de cable fraccionaria (también conocida como ecuación de Cattaneo fraccionaria) en una dimensión viene dada por la siguiente expresión

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\gamma_1} \left(K \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right) - \mu^2 {}_0D_t^{1-\gamma_2} u(x, t), \quad (2.256)$$

donde ${}_0D_t^{1-\gamma_1}$ y ${}_0D_t^{1-\gamma_2}$ son las derivadas de Riemann-Liouville de órdenes respectivos $1 - \gamma_1$ y $1 - \gamma_2$ de acuerdo con la definición dada en (1.6). Los coeficientes subdifusivos γ_1 y γ_2 verifican que $0 < \gamma_1 \leq 1$ y $0 < \gamma_2 \leq 1$.

Los trabajos de Langlands et al. [26, 27] han constituido el punto de partida de este análisis. En el contexto de estudio del mecanismo de la sinapsis neuronal que describen estos autores, $u(x, t)$ representa la diferencia entre el potencial de membrana celular y el potencial de membrana en reposo, el

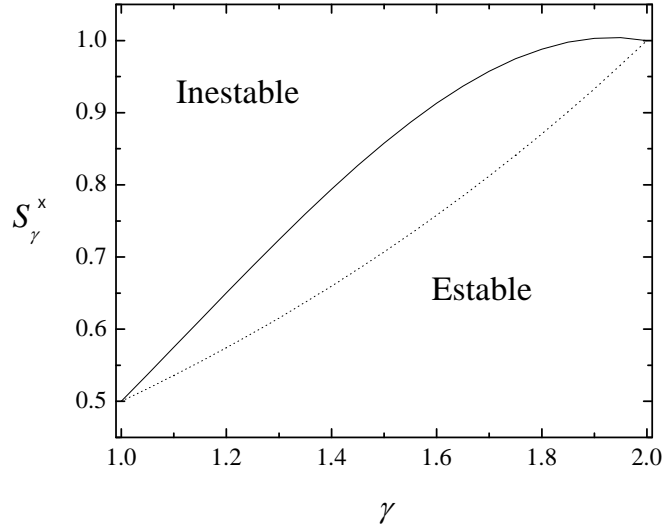


Figura 2.39: Límite teórico de estabilidad para el algoritmo L2, $S_\gamma^x = 2 \cdot \zeta(\gamma - 2) \cdot (1 - 2^{3-\gamma}) / \Gamma(3 - \gamma)$, (línea continua) y para los algoritmos de Yuste-Acedo y GMCP en el caso difusivo-ondulatorio, $S_\gamma^x = 2^{\gamma-2}$ (línea discontinua). Aparecen indicadas las regiones de estabilidad y de inestabilidad.

coeficiente γ_1 caracteriza el flujo anómalo de iones a lo largo de la célula nerviosa y γ_2 caracteriza el flujo anómalo de iones a través de la membrana celular.

El objetivo es desarrollar un algoritmo explícito para resolver la ecuación dada en (2.256). Resolver el problema mediante un algoritmo explícito implica la discretización del sistema en la forma habitual, considerando un retículo o malla en la región espacio-temporal en la que se quiere obtener la estimación numérica $U_j^{(m)}$ de la solución exacta $u(x_j, t_m) \equiv u_j^{(m)}$ siendo (x_j, t_m) las coordenadas del nodo (j, m) del retículo. Al igual que se ha hecho en los casos anteriores, se analizará el error de truncamiento, el límite de estabilidad y la precisión cuando se aplica a un problema concreto. A tal fin, se considera la ecuación de referencia (2.256) definida en el intervalo $-L/2 \leq x \leq L/2$, con condiciones de contorno absorbentes, $u(x = -L/2, t) = u(x = L/2, t) = 0$ y condición inicial dada por una función delta de Dirac centrada en el origen $x = 0$, esto es, $u(x, 0) = \delta(x)$. De esta manera, el problema que se va a resolver queda planteado en los siguientes términos

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\gamma_1} \left(K \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \right) - \mu^2 {}_0D_t^{1-\gamma_2} u(x,t) \quad (2.257a)$$

$$CC : \begin{cases} u(-L/2, t) = 0 \\ u(L/2, t) = 0 \end{cases} \quad (2.257b)$$

$$CI : u(x, 0) = \delta(x) \quad (2.257c)$$

En los cálculos numéricos se considerará $K = 1$. La solución analítica para este problema cuando $L \rightarrow \infty$ es

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4t^{\gamma_1}\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\mu^2 t^{\gamma_2})^k}{k!} H_{1,2}^{2,0} \left[\frac{x^2}{4t^{\gamma_1}} \middle| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2 k, \gamma_1) \\ (0, 1), (\frac{1}{2} + k, 1) \end{matrix} \right]. \quad (2.258)$$

En nuestro algoritmo numérico, la condición inicial exacta, $u(x, 0) = \delta(x)$, se aproxima de la siguiente manera

$$u(x_j, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x}, & j = 0 \\ 0, & j \neq 0 \end{cases} \quad (2.259)$$

La ecuación (2.257) viene planteada en términos de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville y se empleará la aproximación BDF1 (2.171) que ya se ha utilizado en la construcción de los algoritmos de Yuste-Acedo tanto en el caso de la ecuación subdifusiva fraccionaria como en el caso de la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria.

Si se discretiza la derivada primera en el tiempo y la derivada espacial segunda en la misma forma que se ha hecho en los casos anteriores, la ecuación queda como sigue

$$\frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} = K {}_0\delta_t^{1-\gamma_1} \frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} - \mu^2 {}_0\delta_t^{1-\gamma_2} u_j^{(m)} + T(x_j, t_m) \quad (2.260)$$

donde $T(x_j, t_m)$ es el error de truncamiento en el punto (x_j, t_m) , $u_j^{(m)}$ es la notación simplificada de $u(x_j, t_m)$ y se define ${}_0\delta_t^{1-\gamma}$ como

$${}_0\delta_t^{1-\gamma} u(x_j, t_m) = \frac{1}{(\Delta t)^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{1-\gamma} u(x_j, t_{m-k}). \quad (2.261)$$

Si se inserta en (2.260) la discretización de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville dada en (2.261), se desprecia el error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ y se reordenan los términos, se obtiene finalmente el siguiente esquema explícito:

$$\begin{aligned}
U_j^{(m+1)} = & U_j^{(m)} + S_{\gamma_1} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \\
& - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} U_j^{(m-k)}
\end{aligned} \tag{2.262}$$

donde $S_{\gamma_1} = K \frac{(\Delta t)^{\gamma_1}}{(\Delta x)^2}$. Por simplicidad en la notación, cuando se consideren valores numéricos concretos de S_{γ_1} se escribirá simplemente S . En la Sec. 5 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para este algoritmo aplicado a la resolución del problema (2.257).

Una vez más, debe notarse que en los cálculos se trabajará con los coeficientes $\omega_k^{(1-\gamma_1)}$ y $\omega_k^{(1-\gamma_2)}$ de la aproximación BDF1.

A continuación, siguiendo los mismos pasos que en las secciones anteriores, se estudiará el error de truncamiento, se determinará el límite de estabilidad y se analizarán la precisión y la convergencia.

2.3.1. Error de Truncamiento

El error de truncamiento $T(x_j, t_m)$ en el punto (x_j, t_m) se define a partir de (2.260) como

$$T(x_j, t_m) = \frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} - K {}_0\delta_t^{1-\gamma_1} \frac{u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} + \mu^2 {}_0\delta_t^{1-\gamma_2} u_j^{(m)}. \tag{2.263}$$

Pero por otra parte se sabe que

$$\frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} = u_t + \frac{1}{2} u_{tt} \Delta t + O[(\Delta t)^2] \tag{2.264}$$

siendo $u_t \equiv \left. \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \right|_{t=t_m}$ y $u_{tt} \equiv \left. \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} \right|_{t=t_m}$. También se sabe que

$$\begin{aligned}
{}_0\delta_t^{1-\gamma_1} \left[u_{j-1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j+1}^{(m)} \right] = & \frac{1}{(\Delta t)^{1-\gamma_1}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \left[u_{xx} + \frac{1}{12} u_{xxxx} (\Delta x)^2 + \right. \\
& \left. \dots \right] + O((\Delta t)^p)
\end{aligned} \tag{2.265}$$

siendo $u_{xx} \equiv \left. \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \right|_{x=x_j}$ y $u_{xxxx} \equiv \left. \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} \right|_{x=x_j}$ y que

$${}_0\delta_t^{1-\gamma_2} u_j^{(m)} = \frac{1}{(\Delta t)^{1-\gamma_2}} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} u(x_j, t_{m-k}) + O[(\Delta t)^p] . \quad (2.266)$$

Así que, teniendo en cuenta que $u(x, t)$ es la solución exacta de nuestra ecuación (2.257), se obtiene finalmente a partir de (2.263), (2.264) y (2.265) el siguiente resultado

$$\begin{aligned} T(x_j, t_m) &= O[(\Delta t)^p] + O[(\Delta t)^p] + \frac{1}{2} u_{tt} \Delta t - \frac{K_\gamma (\Delta x)^2}{12} {}_0\delta_t^{1-\gamma_1} u_{xxxx} + \dots \\ &= O[(\Delta t)^p] + O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \end{aligned} \quad (2.267)$$

Como se ha elegido la discretización BDF1, para la cual $p = 1$, se puede concluir que

$$T(x_j, t_m) = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.268)$$

2.3.2. Análisis de Estabilidad

Empleamos el procedimiento de tipo Von Neumann desarrollado por S.B. Yuste en [66, 62] y que se ha venido desarrollando en los casos anteriores. Sean $\hat{U}_j^{(k)}$ y $U_j^{(k)}$ soluciones numéricas de (2.170) en el punto (x_j, t_k) que se diferencian inicialmente por una cantidad pequeña, la perturbación, $e_j^{(0)}$. Se define entonces $e_j^{(k)}$ de la siguiente manera:

$$e_j^{(k)} = \hat{U}_j^{(k)} - U_j^{(k)} . \quad (2.269)$$

El algoritmo dado en (2.262) se transforma en el siguiente esquema explícito que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$\begin{aligned} e_j^{(m+1)} &= e_j^{(m)} + S_{\gamma_1} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \left(e_{j-1}^{(m-k)} - 2e_j^{(m-k)} + e_{j+1}^{(m-k)} \right) \\ &\quad - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} e_j^{(m-k)} \end{aligned} \quad (2.270)$$

donde

$$S_{\gamma_1} = K \frac{(\Delta t)^{\gamma_1}}{(\Delta x)^2} \quad (2.271)$$

A continuación, se escribe $e_j^{(k)}$ como una combinación de modos subdifusivos, $e_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analiza la convergencia de un único q -modo

genérico. De esta forma, reemplazando en (2.270) $e_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $e_j^{(m+1)}$, $e_{j-1}^{(m)}$ y $e_{j+1}^{(m)}$ por sus expresiones homólogas, se obtiene

$$\zeta_{m+1} = \zeta_m + S \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \zeta_{m-k} - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} \zeta_{m-k} \quad (2.272)$$

donde por simplicidad se ha reemplazado S_{γ_1} por S . La estabilidad del modo difusivo viene determinada por el comportamiento de ζ_m . Admitiendo que

$$\zeta_{m+1} = \xi \zeta_m \quad (2.273)$$

y asumiendo que el factor de amplificación ξ es independiente del tiempo, se tiene que

$$\xi = 1 + S \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} (e^{iq\Delta x} - 2 + e^{-iq\Delta x}) \xi^{-k} - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} \xi^{-k}. \quad (2.274)$$

Si $|\xi| > 1$ para algún valor de q , el factor temporal de la solución crece hasta infinito de acuerdo con la ecuación (2.273) y el modo es inestable. En consecuencia, para que el modo sea estable es preciso que $|\xi| \leq 1$. Considerando $\xi < 1$, se puede tomar el valor límite $\xi = -1$. De esta manera, haciendo $\xi = -1$ en la ecuación (2.274) se tiene que

$$S \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \leq S_{\times}^{(m)} = \frac{-2 + \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} (-1)^k}{-4 \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} (-1)^k}. \quad (2.275)$$

Para m muy grande, es decir, $m \rightarrow \infty$, se define $S^{\times} = \lim_{m \rightarrow \infty} S_{\times}^{(m)}$, de modo que

$$S^{\times} = \frac{-2 + \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma_2)} (-1)^k}{-4 \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma_1)} (-1)^k}. \quad (2.276)$$

Teniendo en cuenta que para la aproximación BDF1

$$\sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)} (-1)^k = 2^{1-\gamma} \quad (2.277)$$

se llega finalmente a la siguiente expresión para el límite de estabilidad

$$S^{\times} = \frac{2^{\gamma_2} - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2}}{2^{2+\gamma_2-\gamma_1}}. \quad (2.278)$$

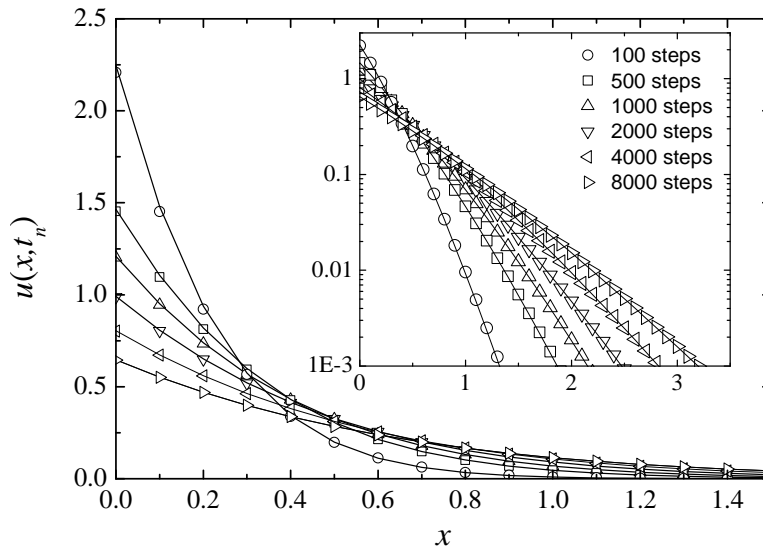


Figura 2.40: Soluciones exactas (líneas) y numéricas (símbolos) proporcionadas por el método explícito para la ecuación fraccionaria de cable cuando $\gamma_1 = \gamma_2 = 1/2$ donde se ha considerado diferentes números de iteraciones indicados en la leyenda para los símbolos. $\Delta x = 1/10$, $\Delta t = 10^{-5}$, $K = \mu = 1$, $L = 5$, $t_n = 1.3 \times 10^{-3}$ y $S = (\Delta t)^{\gamma_1} / (\Delta x)^2 = 0.316$. Nótese que este valor de S está dentro de la región de estabilidad pues es menor que el límite $S^\times = (2^{\gamma_2} - \mu^2(\Delta t)^{\gamma_2}) / (2^{2+\gamma_2-\gamma_1}) \simeq 0.352$ proporcionado por (2.278). En la gráfica interior se muestran los resultados en escala logarítmica

De esta manera, puesto que $S \leq S \sin^2\left(\frac{q\Delta x}{2}\right)$, una condición suficiente de estabilidad para nuestro método es que $S \leq S^\times$. En la Fig. 2.40 y la Fig. 2.41 se muestran dos ejemplos representativos del problema (2.257) con $\gamma_1 = 1/2$ para dos valores de S respectivamente más grande y más pequeño que el valor límite proporcionado por (2.278). Es inmediato comprobar que la elección del valor de S es crucial: cuando S es menor que S^\times se trabaja dentro de la región de estabilidad y se obtiene una solución numérica bastante buena y sensible, como puede verse en la Fig. 2.40, pero, en caso contrario, véase la Fig. 2.41, la solución es inestable. Estos resultados demuestran de forma contundente que el procedimiento tipo Von Neumann-Fourier desarrollado para el análisis de estabilidad es muy eficaz, aun en el caso de que trabajemos con esquemas construidos a partir de ecuaciones más complejas que las puramente difusivas o difusivo-ondulatorias.

Una vez determinado el límite de estabilidad, vamos a realizar un chequeo

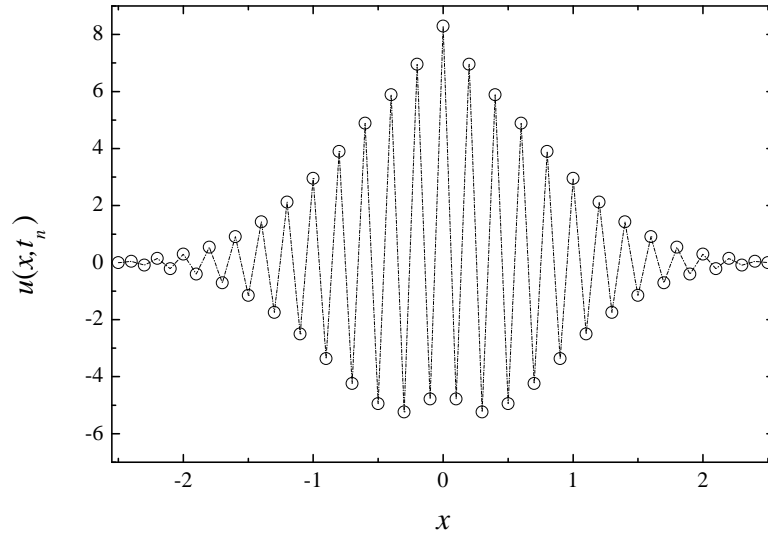


Figura 2.41: Solución numérica (círculos) proporcionada por el método explícito para la ecuación fraccionaria de cable cuando $\gamma_1 = \gamma_2 = 1/2$ después de 100 iteraciones. $\Delta x = 1/10$, $\Delta t = 1.3 \times 10^{-5}$, $K = \mu = 1$, $L = 5$, $t_n = 1.3 \times 10^{-3}$ y $S = (\Delta t)^{\gamma_1} / (\Delta x)^2 = 0.36$. Nótese que este valor de S es mayor que el límite de estabilidad $S^\times = (2^{\gamma_2} - \mu^2(\Delta t)^{\gamma_2}) / (2^{2+\gamma_2-\gamma_1}) \simeq 0.352$ proporcionado por (2.278). Empleamos la línea discontinua para guiar al ojo.

numérico del mismo. Para ello seguiremos un procedimiento que tiene cierta similitud al que hemos empleado en los casos anteriores, aunque no es exactamente igual puesto que en el caso de la ecuación de cable tenemos que trabajar con dos coeficientes subdifusivos distintos γ_1 y γ_2 . La idea es considerar muchos valores diferentes de γ_1 , γ_2 , Δt y Δx y chequear si en todos los casos el límite de estabilidad es conforme con lo que predice la ecuación (2.278). Asumiremos que $K = \mu = 1$ en todos los casos, sin que ello comporte pérdida de generalidad en los resultados.

El modo de proceder es el siguiente: primero, elegimos un conjunto de valores de γ_1 , γ_2 , Δx y S e integramos la ecuación fraccionaria de cable correspondiente. Si

$$\left| U_j^{(m-1)} - U_j^{(m)} \right| > \lambda \quad (2.279)$$

para $\lambda = 10$ dentro de las primeras 1000 iteraciones, entonces diremos que el método es inestable. En caso contrario, etiquetaremos el método como estable. Hemos generado la Fig. 2.42 comenzando la integración para valores de S claramente por debajo del valor límite de estabilidad dado por (2.278) y vamos incrementando su valor añadiendo 0.001 cada vez hasta que la condi-

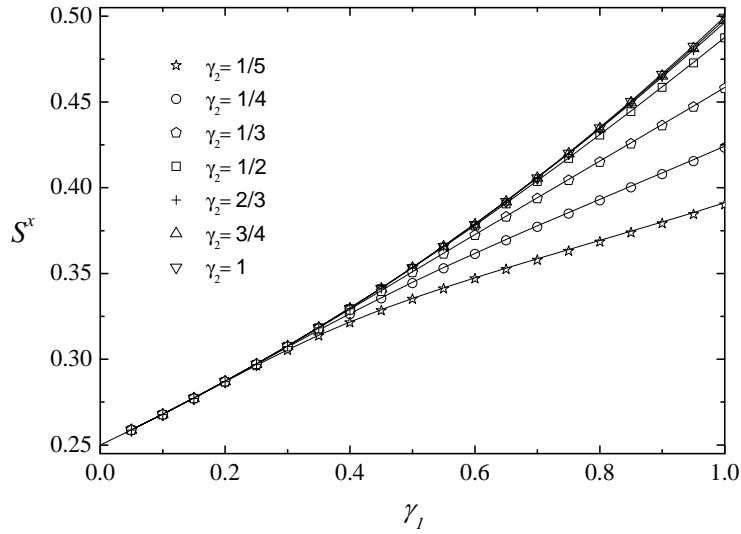


Figura 2.42: Límite de estabilidad, S^\times , frente a γ_1 para diferentes valores de γ_2 indicados en la leyenda correspondiente a los símbolos. $\Delta x = 1/20$ y $K = \mu = 1$. Los símbolos corresponden a las estimaciones numéricas mientras que las líneas corresponden a las predicciones teóricas dadas por (2.278).

ción (2.279) se alcanza por primera vez. Retenemos el último valor para el cual el método resultó estable y lo representamos en la Fig. 2.42. El valor $\lambda = 10$ es arbitrario, de modo que para cualquier otra elección razonable los resultados se mantienen con mínimas variaciones.

2.3.3. Convergencia

Resulta interesante llevar a cabo un análisis de convergencia basado en el procedimiento de Liu et al. [68], al estilo del desarrollado para los métodos de las secciones anteriores. El punto de partida es el esquema explícito para la ecuación fraccionaria de cable (2.262)

$$\begin{aligned}
 U_j^{(m+1)} = & U_j^{(m)} + S \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \left(U_{j-1}^{(m-k)} - 2U_j^{(m-k)} + U_{j+1}^{(m-k)} \right) \\
 & - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} U_j^{(m-k)}. \quad (2.280)
 \end{aligned}$$

Si se define $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre el valor exacto y el valor numérico

de la solución en el punto (x_j, t_k)

$$E_j^{(k)} = u(x_j, t_k) - U_j^{(k)} \quad (2.281)$$

entonces a partir del esquema (2.280) y teniendo en cuenta la definición del error de truncamiento (2.263) se obtiene la ecuación que describe el modo en que evoluciona esta diferencia

$$\begin{aligned} E_j^{(m+1)} - E_j^{(m)} - S \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \left(E_{j+1}^{(m-k)} - 2E_j^{(m-k)} + E_{j-1}^{(m-k)} \right) \\ + \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} E_j^{(m-k)} = T(x_j, t_m) \equiv T_j^{(m)}. \end{aligned} \quad (2.282)$$

De igual manera que se hizo con $e_j^{(k)}$ en el análisis de estabilidad, $E_j^{(k)}$ y $T_j^{(m)}$ se escriben como una combinación de modos subdifusivos, $E_j^{(k)} = \sum_q \zeta_k^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)} = \sum_q \chi_m^{(q)} e^{iqj\Delta x}$ y se analizan la convergencia de un único q -modo genérico. De esta forma, reemplazando en (2.282) $E_j^{(k)}$ por $\zeta_k e^{iqj\Delta x}$ y $T_j^{(m)}$ por $\chi_m e^{iqj\Delta x}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \zeta_{m+1} - \zeta_m - S \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) \zeta_{m-k} \\ + \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} \zeta_{m-k} = \chi_m \end{aligned} \quad (2.283)$$

o lo que es equivalente

$$\begin{aligned} \zeta_{m+1} = \zeta_m + \bar{S} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_1)} \zeta_{m-k} \\ - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^m \omega_k^{(1-\gamma_2)} \zeta_{m-k} + \chi_m \end{aligned} \quad (2.284)$$

donde se ha definido \bar{S} como $\bar{S} = 4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) S$.

A continuación se probará que $|\zeta_m| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para todo m , o, lo que es equivalente, que $|\zeta_m| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ para todo m . Para empezar, se sabe que $U_j^{(0)}$ satisface la condición inicial por construcción, luego $E_j^{(0)} = 0$. Esto quiere decir que $\zeta_0 = 0$. Por lo tanto, de (2.284) se concluye que $\zeta_1 = \chi_0 = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ de modo que $|\zeta_1| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. Se

asume ahora que $|\zeta_k| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Entonces, se va a probar que $|\zeta_{m+1}| = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$. De (2.284) se tiene que

$$\begin{aligned} |\zeta_{m+1}| &\leq |\zeta_m| + \bar{S} |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=0}^m \left| \omega_k^{(1-\gamma_1)} \right| \\ &\quad - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} |\zeta_{\{m\}}| \sum_{k=0}^m \left| \omega_k^{(1-\gamma_2)} \right| + |\chi_m| \end{aligned} \quad (2.285)$$

donde $|\zeta_{\{m\}}|$ es el máximo valor de $|\zeta_k|$ para $k = 0, 1, \dots, m$. Teniendo en cuenta que se usa la aproximación BDF1, se sabe que los coeficientes satisfacen la siguiente relación (válida tanto para γ_1 como para γ_2)

$$(1 - z)^{1-\gamma} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma)}. \quad (2.286)$$

Si se hace $z = 1$ y se utiliza el hecho de que $\omega_0^{(1-\gamma)} = 1$ (tanto para γ_1 como para γ_2) es fácil demostrar que $\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma_1)} = -1$ y que $\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k^{(1-\gamma_2)} = -1$ o, equivalentemente, que $\sum_{k=1}^{\infty} |\omega_k^{(1-\gamma_1)}| = 1$ y $\sum_{k=1}^{\infty} |\omega_k^{(1-\gamma_2)}| = 1$, pues $\omega_k^{(1-\gamma_1)} < 0$ y $\omega_k^{(1-\gamma_2)} < 0$ para $k \geq 1$. De esta manera tanto $\sum_{k=0}^m |\omega_k^{(1-\gamma_1)}|$ como $\sum_{k=0}^m |\omega_k^{(1-\gamma_2)}|$ son cantidades acotadas (de hecho son menores que 2). Usando este resultado en (2.285) y teniendo en cuenta que $|\zeta_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$ y que $|\chi_k| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2)$, finalmente se llega a

$$|\zeta_{m+1}| \leq C(\Delta t + (\Delta x)^2). \quad (2.287)$$

De esta manera, se ha demostrado que la amplitud del modo difusivo tiende a cero cuando el tamaño del mallado espacio-temporal tiende a cero. Haciendo uso de la identidad de Parseval esto significa que la norma del error $\|E^{(k)}\|^2 \equiv \sum_j |E_j^{(k)}|^2 = \sum_q |\zeta_k^{(q)}|^2$ tiende a cero cuando Δt y Δx tienden a cero.

2.3.4. Análisis de la precisión. Ejemplo numérico

Seguidamente se va a realizar una evaluación de la dependencia del error numérico con el tamaño de la discretización cuando el algoritmo se aplica a la resolución del problema (2.257). Para ello se usa una versión simplificada del procedimiento empleado en las secciones anteriores e igual que la utilizada en la Sec. 2.1.1.5. Se va a empezar considerando que

$$error \equiv E = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] \quad (2.288)$$

lo que quiere decir que

$$E = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta x)^2. \quad (2.289)$$

En una primera fase, para un valor de γ dado, se fija el valor de Δt y para distintos valores $\Delta_i x$ se calculan los correspondientes errores E_i , esto es

$$E_i = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta_i x)^2 \quad (2.290)$$

$$E_j = C_1(\Delta t) + C_2(\Delta_j x)^2 \quad (2.291)$$

...

Resulta evidente que

$$|E_i - E_j| = C_2((\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2). \quad (2.292)$$

De esta manera, para una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i x$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con el cuadrado de Δx es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_2 .

Se han considerado cuatro casos distintos ($\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 0.5$), ($\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 1$), ($\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 0.5$), ($\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 1$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$. En los cuatro casos se consideran cinco valores distintos de Δx ($\Delta_1 x = \frac{1}{10}$, $\Delta_2 x = \frac{1}{12}$, $\Delta_3 x = \frac{1}{14}$, $\Delta_4 x = \frac{1}{16}$ y $\Delta_5 x = \frac{1}{18}$). En los dos casos para los que $\gamma_1 = 1$ se fija el valor $\Delta t = 10^{-4}$ para un tiempo final $t_n = 0.1$, mientras que en los dos casos para los que $\gamma_1 = 0.5$ se fija $\Delta t = 10^{-6}$ para un tiempo final $t_n = 10^{-3}$. Los resultados obtenidos se recogen en la Fig. 2.43 y confirman plenamente la hipótesis de que el error es $O[(\Delta x)^2]$.

A continuación, se fija el valor de Δx y para distintos valores $\Delta_i t$ se calculan los correspondientes errores, E_i

$$E_i = C_1(\Delta_i t) + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.293)$$

$$E_j = C_1(\Delta_j t) + C_2(\Delta x)^2 \quad (2.294)$$

...

Resulta evidente que

$$|E_i - E_j| = C_1(\Delta_i t - \Delta_j t) \quad (2.295)$$

De esta manera, a partir de una serie de valores E_i correspondientes a $\Delta_i t$ con $i = 1, 2, \dots$, es posible hacer el ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a

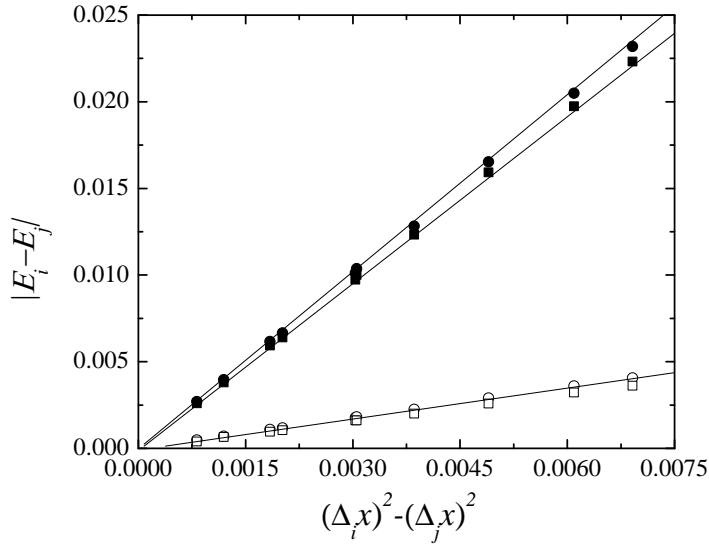


Figura 2.43: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $(\Delta_i x)^2 - (\Delta_j x)^2$ con $i < j$ (eje x) para distintos valores de γ_1 y γ_2 cuando se emplea el algoritmo (2.262) para resolver el problema (2.257) con $K = 1$. Los círculos rellenos corresponden al caso $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -7.129 \times 10^{-5} + 3.370x$. Los cuadrados rellenos corresponden al caso $\gamma_1 = 0.5$ y $\gamma_2 = 1$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -7.749 \times 10^{-5} + 3.247x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma_1 = 1$ y $\gamma_2 = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -1.138 \times 10^{-5} + 0.5909x$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma_1 = 1$ y $\gamma_2 = 1$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = -1.183 \times 10^{-5} + 0.5276x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_2 para cada pareja γ_1, γ_2 .

$\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ y, si la hipótesis de dependencia del error con Δt es correcta, el ajuste será prácticamente perfecto y la pendiente de la recta proporcionará el valor de C_1 .

Al igual que antes, se han considerado cuatro casos distintos ($\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 0.5$), ($\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 1$), ($\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 0.5$), ($\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 1$) y para cada uno de ellos se ha realizado un ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$. En los dos casos para los que $\gamma_1 = 0.5$ se fija el valor $\Delta x = \frac{1}{10}$ y se consideran cinco valores distintos para Δt ($\Delta_1 t = 10^{-5}$, $\Delta_2 t = 8 \times 10^{-6}$, $\Delta_3 t = 5 \times 10^{-6}$, $\Delta_4 t = 2 \times 10^{-6}$, $\Delta_5 t = 10^{-6}$) para un tiempo final $t_n = 10^{-3}$, mientras que en los dos casos para los que $\gamma_1 = 1$ se fija $\Delta x = \frac{1}{20}$ y se consideran los valores $\Delta_1 t = 10^{-3}$, $\Delta_2 t = 8 \times 10^{-4}$, $\Delta_3 t = \frac{2}{3} \times 10^{-3}$, $\Delta_4 t = 5 \times 10^{-4}$ y $\Delta_5 t = 4 \times 10^{-4}$ para un tiempo final

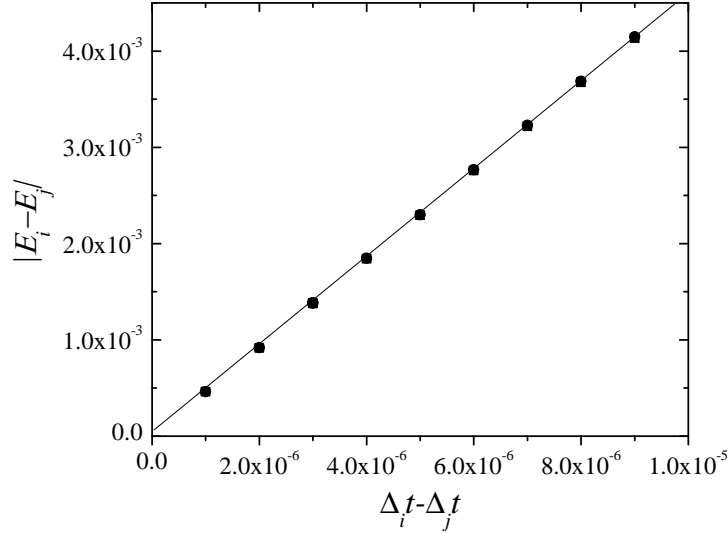


Figura 2.44: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta_i t - \Delta_j t$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma_1 = 0.5$ cuando se emplea el algoritmo (2.262) para resolver el problema (2.257) con $K = 1$. Los círculos rellenos corresponden al caso $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.453 \times 10^{-7} + 460.8x$. Los cuadrados rellenos corresponden al caso $\gamma_1 = 0.5$ y $\gamma_2 = 1$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.642 \times 10^{-7} + 459.4x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_1 para cada pareja γ_1, γ_2 .

$t_n = 0.1$. Los resultados obtenidos para los dos casos correspondientes a $\gamma_1 = 0.5$ se recogen en la Fig. 2.44. Los resultados obtenidos para los dos casos correspondientes a $\gamma_1 = 1$ se recogen en la Fig. 2.45. Ambas figuras muestran que el error es $O(\Delta t)$ en todos los casos ya que el ajuste de los puntos es magnífico.

Por lo tanto, el análisis numérico llevado a cabo confirma que el error numérico y el error de truncamiento son del mismo orden [véase la ecuación (2.268)], esto es

$$error = O(\Delta t) + O[(\Delta x)^2] . \quad (2.296)$$

Una vez que se ha definido y analizado el algoritmo numérico (2.262), se comprobará que, efectivamente, proporciona una buena aproximación de la solución exacta. En la Fig. 2.46 se puede ver el buen acuerdo entre las soluciones analíticas dadas por (2.258) en los puntos de abscisa $x = 0$ y $x = 0.5$, para $\gamma_1 = 1$ y $\gamma_2 = 1$ y $\gamma_2 = 1/2$ y en la Fig. 2.47 se puede ver el ajuste entre las soluciones analíticas dadas por (2.258) en los puntos de

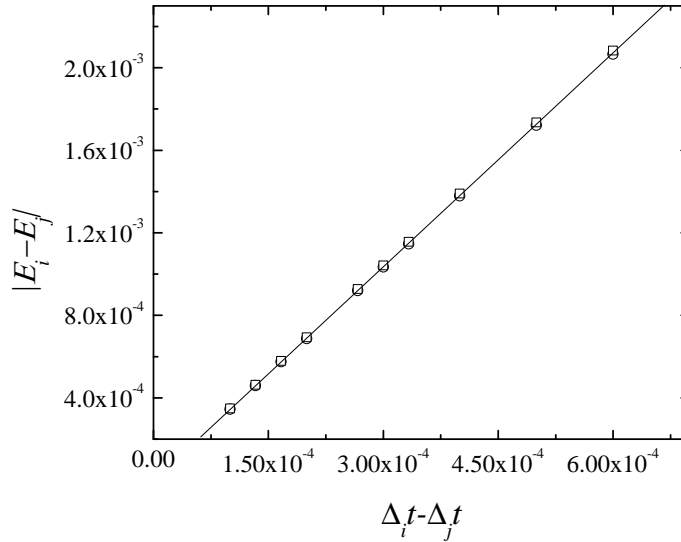


Figura 2.45: Ajuste lineal de $|E_i - E_j|$ con $i < j$ (eje y) frente a $\Delta t_i - \Delta t_j$ con $i < j$ (eje x) para el caso $\gamma_1 = 1$ cuando se emplea el algoritmo (2.262) para resolver el problema (2.257) con $K = 1$. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 4.069 \times 10^{-7} + 3.471x$. Los círculos corresponden al caso $\gamma_1 = 1$ y $\gamma_2 = 0.5$ siendo la ecuación de su recta de regresión $y = 3.984 \times 10^{-7} + 3.443x$. Los valores de las pendientes de las rectas de regresión proporcionan el valor de C_1 para cada pareja γ_1, γ_2 .

abscisa $x = 0$ y $x = 0.5$, para $\gamma_1 = 1/2$ y $\gamma_2 = 1$ y $\gamma_2 = 1/2$. En la Fig. 2.48 se han representado los errores en el punto de abscisa $x = 0$ para los casos estudiados en la Fig. 2.46 y la Fig. 2.47, mientras que en la Fig. 2.49 se hace lo propio para el punto de abscisa $x = 0.5$. Se define el error como el valor absoluto de la diferencia entre la solución numérica y la analítica, esto es, $|U_j^{(n)} - u(x_j, t_n)|$. Como se deduce de las figuras, el esquema numérico funciona bien y el error es aceptable, del orden de 10^{-2} veces más pequeño que el valor típico de la función. No obstante, se observa que los errores son mayores para tiempos pequeños y también para $x = 0$ frente a la posición $x = 0.5$. La condición inicial elegida (función delta de Dirac en el origen) y la aproximación numérica, un tanto burda, dada por la ecuación (2.259) están sin duda detrás de estos resultados.

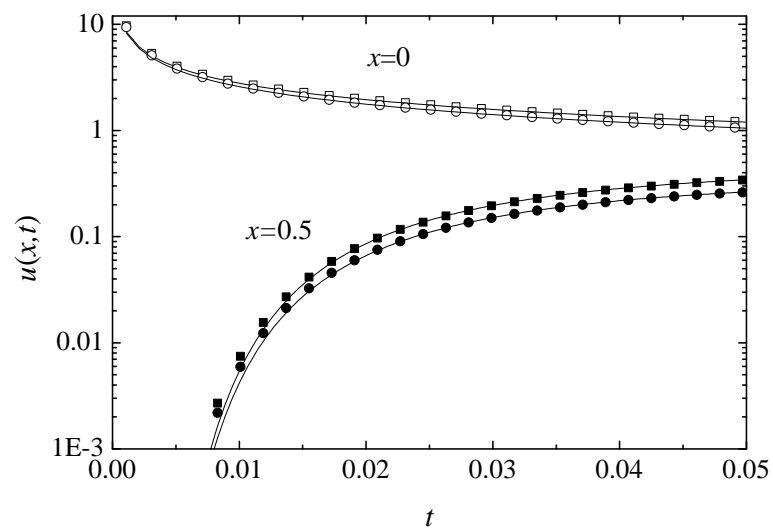


Figura 2.46: Soluciones para $u(x,t)$ en el punto medio, $x_0 = 0$, (símbolos huecos) y en $x = 0.5$ (símbolos rellenos) de la ecuación de cable fraccionaria para $\gamma_1 = 1$ y $\gamma_2 = 1$ (cuadrados) y $\gamma_2 = 1/2$ (círculos) con $\Delta x = 1/20$, $\Delta t = 10^{-4}$, $K = \mu = 1$ y $L = 5$. Las líneas continuas corresponden a la solución exacta proporcionada por (2.258)

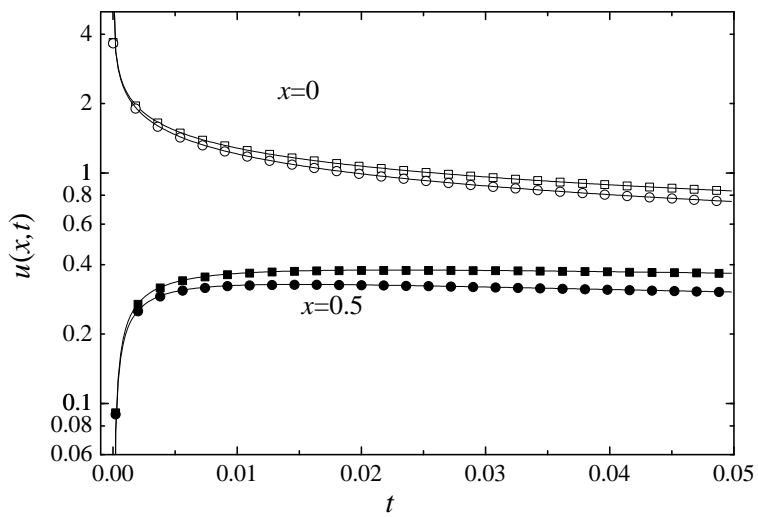


Figura 2.47: Soluciones para $u(x, t)$ en el punto medio, $x_0 = 0$, (símbolos huecos) y en $x = 0.5$ (símbolos rellenos) de la ecuación de cable fraccionaria para $\gamma_1 = 1/2$ y $\gamma_2 = 1$ (cuadrados) y $\gamma_2 = 1/2$ (círculos) con $\Delta x = 1/10$, $\Delta t = 10^{-5}$, $K = \mu = 1$ y $L = 5$. Las líneas continuas corresponden a la solución exacta proporcionada por (2.258)

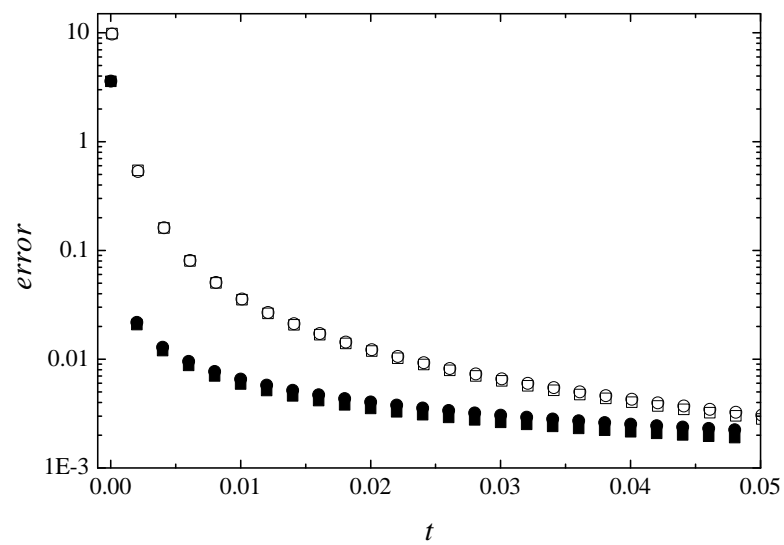


Figura 2.48: Errores en $x = 0$, $|U_0^{(m)} - u(x_0, t_m)|$, correspondientes a los casos de las Figs. 2.46 y 2.47 cuando se emplea el algoritmo explícito para resolver la ecuación de cable fraccionaria. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma_2 = 1$, y los círculos al caso $\gamma_2 = 1/2$. Los símbolos rellenos corresponden a $\gamma_1 = 1/2$ mientras que los símbolos huecos corresponden al caso $\gamma_1 = 1$.

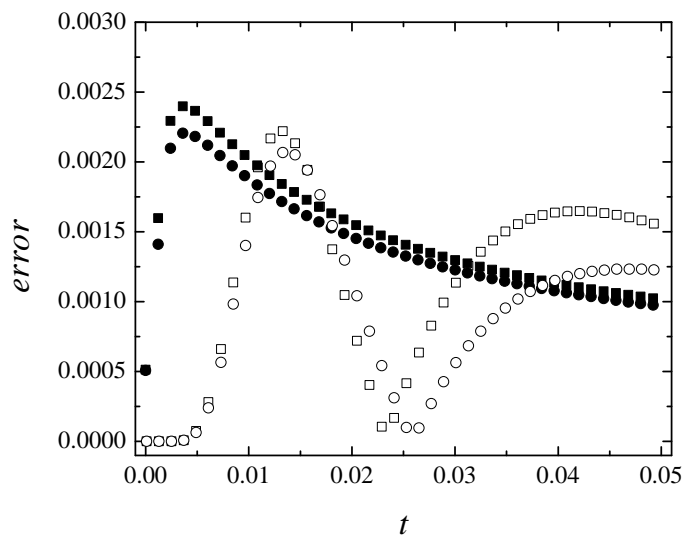


Figura 2.49: Errores en $x = 0.5$, $|U_j^{(m)} - u(x_j, t_m)|$, correspondientes a los casos de las Figs. 2.46 y 2.47 cuando se emplea el algoritmo explícito para resolver la ecuación de cable fraccionaria. Los cuadrados corresponden al caso $\gamma_2 = 1$, y los círculos al caso $\gamma_2 = 1/2$. Los símbolos rellenos corresponden a $\gamma_1 = 1/2$ mientras que los símbolos huecos corresponden al caso $\gamma_1 = 1$. Para $\gamma_1 = 1$ se tiene que $j = 10$ mientras que para $\gamma_1 = 1/2$ se tiene que $j = 5$.

Capítulo 3

Métodos Adaptativos

Como se ha podido comprobar en el capítulo 2, los métodos explícitos en diferencias finitas con discretizado uniforme que se han utilizado para resolver las EDP fraccionarias, presentan dos importantes limitaciones: se tornan inestables para ciertos valores de los parámetros que definen el retículo del discretizado y son poco eficientes desde el punto de vista computacional, es decir, los cálculos se demoran demasiado cuando se integra para tiempos mayores de unas pocas miles de veces el tamaño del paso temporal.

La primera limitación, correspondiente a la inestabilidad, se puede superar empleando métodos implícitos incondicionalmente estables, mientras que el empleo de métodos adaptativos permite solventar el problema de la ineficiencia computacional. En esencia, un método adaptativo trabaja con pasos temporales variables de modo que el tamaño del paso pueda adaptarse al comportamiento de la solución. Así, en aquellas regiones donde la solución varía muy rápidamente, una elección de pasos muy pequeños permitiría no pasar por alto estas variaciones, mientras que para aquellas regiones donde la solución varíe de forma suave, es factible emplear pasos temporales largos con la consiguiente mejora de la eficiencia computacional. La idea es poder ajustar el tamaño del espaciado temporal dinámicamente de tal forma que el error sea del orden de un determinado valor establecido a priori.

Merece la pena analizar con más detalle la mejora en la eficiencia computacional que supone el empleo de métodos adaptativos. Para las ecuaciones fraccionarias, el número de operaciones requeridas en el cálculo del valor de la solución numérica en el instante n -ésimo escala como n^2 . En comparación, el número de operaciones escala como n cuando se consideran EDP ordinarias. El escalamiento como n^2 es debido a la necesidad de emplear los valores de la solución numérica correspondientes a todos los instantes previos al n -ésimo para el que se quiere obtener la solución. Ello es una consecuencia directa del hecho de que las derivadas fraccionarias son operadores integro-diferenciales

de carácter no local. De este modo, los métodos numéricos aplicados a la resolución aproximada de ecuaciones fraccionarias resultan cada vez más lentos y, a la vez, utilizan cada vez más memoria, a medida que n crece. Para salvar esta dificultad se han explorado varias posibilidades. El procedimiento más obvio es incrementar la capacidad del método numérico de evaluar los operadores no locales para un tamaño de paso mayor sin que ello suponga una pérdida de precisión [10]. Otros intentos de solventar el problema están basados en el llamado “principio de memoria a corto plazo” [112], y, en esencia, o bien tratan de limitar el número de operaciones requeridas para cada paso, asumiendo que es posible desprestigiar la influencia de los valores de la solución para instantes previos lo bastante alejados del instante actual [113], o bien toman ventaja del modo en que decae el núcleo (kernel) de la derivada fraccionaria consiguiendo que el número de operaciones requerido escale como $n \ln n$ [114]. Todas estas aproximaciones son, en principio, compatibles con los algoritmos de pasos variables que se desarrollarán en el presente capítulo.

Los algoritmos numéricos estándar de paso fijo (como los métodos explícitos que se han desarrollado en el capítulo 1) aún presentan un inconveniente adicional que, a menudo, suele pasar inadvertido, y es el hecho de que la precisión de los resultados numéricos puede cambiar abruptamente (incluso en varios órdenes de magnitud) a lo largo del intervalo de integración. La razón para este comportamiento del error hay que buscarla en las características que presentan las soluciones de muchas ecuaciones difusivas fraccionarias. En muchos casos, estas soluciones pueden expresarse como una superposición de modos de Fourier generalizados que decaen como funciones de Mittag-Leffler. Como es bien sabido, el decaimiento de estas funciones es muy rápido para tiempos pequeños y muy lento para tiempos grandes. Dado que la solución completa hereda muchas veces este tipo de comportamiento, el empleo de un discretizado uniforme no es una buena opción a la hora de tratar sistemas caracterizados por esta diferencia de regímenes temporales.

En este capítulo se van a implementar tres métodos adaptativos para resolver la ecuación difusiva fraccionaria. Como paso previo al desarrollo de métodos adaptativos, es necesario disponer de un esquema de discretización con pasos variables sobre el que construir el método. Además, este esquema ha de ser estable para toda elección del tamaño de paso, lo que descarta el empleo de los algoritmos explícitos que se estudiaron en el capítulo 2. De esta manera, se empezará por desarrollar un algoritmo numérico de pasos variables para la resolución de la ecuación difusiva fraccionaria y se analizarán sus principales características. Este esquema de paso variable será la base sobre la que construir los algoritmos adaptativos.

El objeto principal de nuestro interés lo constituye el régimen subdifusivo ($0 < \gamma < 1$) ya que concentra la mayoría de las aplicaciones en el campo de

la Física Estadística. Por otra parte, la aplicación de métodos adaptativos a la resolución de ecuaciones difusivo-ondulatorias [120] proporciona unos resultados más modestos que los del caso subdifusivo, tanto en términos de estabilidad como en términos de precisión.

3.1. Métodos adaptativos para la ecuación subdifusiva fraccionaria

En este apartado se va a resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria unidimensional mediante distintos algoritmos numéricos adaptativos. En principio se va a desarrollar un algoritmo de paso variable para una ecuación subdifusiva en su forma más general, esto es, admitiendo la presencia de un término fuente. Se ha optado por plantear la ecuación subdifusiva fraccionaria unidimensional en términos de la derivada fraccionaria temporal de Caputo pues dicha derivada es más conveniente para desarrollar un esquema de paso variable. En cualquier caso, como ya se vio en la Sec. 2.1 la ecuación subdifusiva fraccionaria planteada en términos de la derivada de Caputo es equivalente a la ecuación planteada en términos de la derivada de Riemann-Liouville.

3.1.1. Algoritmo de paso variable para la ecuación subdifusiva fraccionaria

Los métodos en diferencias finitas han sido profusamente estudiados pero en la mayoría de los casos se considera que el tamaño de los pasos temporales siempre es constante. Sin embargo, en los últimos años se han desarrollado algunos trabajos para pasos temporales variables: Skovranek et al. [115], algunos artículos de Musthapa et al. [88, 116], Zhang et al. [123], Ikeda [117], Cuesta, Lubich y Palencia [118] y los trabajos de Yuste y Quintana [119, 120, 121]). El contenido de esta sección recoge en buena medida lo publicado en [119].

Como viene siendo habitual cuando se implementan métodos en diferencias finitas, comenzaremos por considerar un retículo o malla en la región espacio-temporal en la que se quiere obtener la estimación numérica $U_j^{(m)}$ de la solución exacta $u(x_j, t_m) = u_j^{(m)}$, siendo (x_j, t_m) las coordenadas del nodo (j, m) del retículo. Sea una ecuación subdifusiva fraccionaria generalizada del tipo

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + F(x, t), \quad \text{para } 0 < \gamma < 1 \quad (3.1)$$

que podemos escribir en forma simplificada como

$$\partial u = F \quad (3.2)$$

siendo F el término fuente y $\partial \equiv {}^C_0D_t^\gamma - K_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. La idea es reemplazar el operador continuo ∂ por un operador en diferencias δ y un error de truncamiento $R(x, t)$, esto es, $\partial u = \delta u + R$. Comenzaremos por discretizar la derivada de Caputo

$${}^C_0D_t^\gamma u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t d\tau \frac{1}{(t-\tau)^\gamma} \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial \tau}, \quad 0 < \gamma < 1. \quad (3.3)$$

mediante el método L1. Sabemos que

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{\substack{x=x_j \\ t=t_n}} = \frac{u(x_j, t_{n+1}) - u(x_j, t_n)}{t_{n+1} - t_n} + O(t_{n+1} - t_n) u''(x_j, t) \quad (3.4)$$

con $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ y donde $u''(x_j, t) = \frac{\partial^2 u(x_j, t)}{\partial t^2}$. De este modo, se tiene que

$$\begin{aligned} {}^C_0D_t^\gamma u(x, t) \Big|_{\substack{x=x_j \\ t=t_{n+1}}} &= \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^{t_{n+1}} d\tau \frac{1}{(t-\tau)^\gamma} \frac{\partial u(x_j, \tau)}{\partial \tau} \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau \frac{1}{(t-\tau)^\gamma} \frac{\partial u(x_j, \tau)}{\partial \tau} \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} \frac{u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)}{t_{m+1} - t_m} \\ &\quad + \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} u''(x_j, \tau) O(t_{m+1} - t_m). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Para abreviar llamamos

$$R_{t_{n+1}}(x_j) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} u''(x_j, \tau) O(t_{m+1} - t_m) \quad (3.6)$$

y por tanto, podemos escribir

$$\begin{aligned}
{}_0^C D_t^\gamma u(x, t) \Big|_{t=t_{n+1}}^{x=x_j} &= \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} \frac{u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)}{t_{m+1} - t_m} \\
+ R_{t_n}(x_j) &= \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^n \frac{u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)}{t_{m+1} - t_m} \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} \\
+ R_{t_n}(x_j) &= \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{m=0}^n \frac{u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)}{t_{m+1} - t_m} [(t_{n+1} - t_m)^{1-\gamma} \\
&\quad - (t_{n+1} - t_{m+1})^{1-\gamma}] + R_{t_n}(x_j). \tag{3.7}
\end{aligned}$$

Definiendo el símbolo

$$T_{0,1}^{(\gamma)} = (t_1 - t_0)^{-\gamma} \tag{3.8}$$

$$T_{m,n}^{(\gamma)} = \frac{(t_n - t_m)^{1-\gamma} - (t_n - t_{m+1})^{1-\gamma}}{t_{m+1} - t_m}, \quad m+1 \leq n \tag{3.9}$$

la ecuación (3.7), evaluada en t_n se puede reescribir de forma más compacta así:

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) \Big|_{t=t_n}^{x=x_j} = \delta_t^\gamma u(x, t) \Big|_{t=t_n}^{x=x_j} + R_{t_n}(x_j) \tag{3.10}$$

donde δ_t^γ se define de la siguiente manera

$$\delta_t^\gamma u(x, t) \Big|_{t=t_n}^{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{m=0}^{n-1} T_{m,n}^{(\gamma)} [u(x_j, t_{m+1}) - u(x_j, t_m)]. \tag{3.11}$$

El modo de obtener (3.7) hace evidente que si la función $u(x, t)$ fuera discontinua en los puntos del discretizado, $u(x_j, t_m^+) \neq u(x_j, t_m^-)$, la derivada de Caputo, ${}_0^C D_t^\gamma u(x, t)$, sería igual a

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) \Big|_{t=t_n}^{x=x_j} = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{m=0}^{n-1} T_{m,n}^{(\gamma)} [u(x_j, t_{m+1}^-) - u(x_j, t_m^+)] + R_{t_n}(x_j) \tag{3.12}$$

donde $u(x_j, t_m^+)$ y $u(x_j, t_m^-)$ representan la función u evaluada en la posición $x = x_j$ y en el instante $t = t_m$ por la derecha y por la izquierda respectivamente.

Una vez que se ha discretizado la derivada de Caputo mediante una generalización del procedimiento L1, se discretiza el operador Laplaciano $\partial^2/\partial x^2$ en la forma habitual, es decir

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_j}^{t=t_n} = \delta_x^2 u(x, t) \Big|_{x=x_j}^{t=t_n} + R_{x_j}(t_n) \tag{3.13}$$

donde se puede definir

$$\delta_x^2 u(x, t) \Big|_{\substack{x=x_j \\ t=t_n}} = \frac{u(x_{j+1}, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_{j-1}, t_n)}{(\Delta x)^2}. \quad (3.14)$$

Como es obvio, se asume que el tamaño de la malla espacial es constante, esto es, $x_{j+1} - x_j = \Delta x$.

Recapitulando, en el proceso de construcción de un algoritmo de paso variable para la ecuación subdifusiva fraccionaria generalizada se ha obtenido que

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = \delta_t^\gamma u(x, t) + R_t(x), \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) = \delta_x^2 u(x, t) + R_x(t), \quad (3.16)$$

y podemos reescribir la ecuación (3.1) en la forma

$$[\delta_t^\gamma - K_\gamma \delta_x^2] u(x, t) = F(x, t) + R(x, t) \quad (3.17)$$

donde $R(x, t) = K_\gamma R_x(t) - R_t(x)$. En este caso se puede definir el operador $\delta = \delta_t^\gamma - K_\gamma \delta_x^2$. Despreciando el error de truncamiento, se obtiene una ecuación en diferencias $\delta U = F$ cuya solución aporta la estimación en diferencias finitas de la solución exacta $u(x, t)$ en los puntos del retículo. Obviamente, para un operador dado, δ , uno puede considerar muy diferentes operadores en diferencias, δ , y, en consecuencia, muy diferentes métodos numéricos en diferencias finitas para resolver la ecuación $\delta u = F$.

Un aspecto fundamental a tener en cuenta es el orden de error de nuestro método en diferencias finitas. Como es obvio, $R_{x_j}(t_n) = O[(\Delta x)^2]$. En cuanto a $R_{t_n}(x_j)$ se tiene que

$$R_{t_n}(x_j) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \sum_{m=0}^{n-1} \int_{t_m}^{t_{m+1}} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} u''(x_j, \tau) O(t_{m+1} - t_m) \quad (3.18)$$

y en consecuencia

$$|R_{t_n}(x_j)| \leq \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \max_{0 \leq m \leq n-1} |O(t_{m+1} - t_m)| \int_0^{t_n} d\tau (t-\tau)^{-\gamma} \quad (3.19)$$

lo que conduce a que $R_{t_n}(x_j) \leq C \max_{0 \leq m \leq n-1} |R_m|$, siendo C una constante de orden $t_n^{1-\gamma}$, esto es,

$$R_{t_n}(x_j) \leq t_n^{1-\gamma} O \left[\max_{0 \leq m \leq n-1} (t_{m+1} - t_m) \right]. \quad (3.20)$$

Por todo ello, se determina la siguiente expresión para el error de truncamiento

$$R(x_j, t_n) = O[(\Delta x)^2] + t_n^{1-\gamma} O\left[\max_{0 \leq m \leq n-1} (t_{m+1} - t_m)\right]. \quad (3.21)$$

Como vemos, el error de truncamiento tiende a cero cuando el espaciado del retículo espacio-temporal tiende a cero. Esto significa que el método es *consistente* de acuerdo con [122]. Recientemente Zhang et al. [123] han establecido una cota del error $R_{t_n}(x_j)$ mejor que la dada en (3.20) que es la suma de un término de orden $(t_n - t_{n-1})^{2-\gamma}$ y otro de orden

$$\max_{0 \leq m \leq n-1} ((t_{m+1} - t_m))^2 \cdot (t_n - t_{n-1})^{-\gamma}. \quad (3.22)$$

Introduciendo en $\delta = \delta_t^\gamma - K\delta_x^2$ las expresiones para δ_t^γ y δ_x^2 dadas por (3.11) y (3.14), respectivamente, la ecuación en diferencias finitas que se ha de resolver, $\delta U = F$, se transforma en $\delta \tilde{U} = \tilde{F}$ al multiplicarla por $(t_n - t_{n-1})^\gamma$, esto es

$$\sum_{m=0}^{n-1} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}] - S_n [U_{j+1}^{(n)} - 2U_j^{(n)} + U_{j-1}^{(n)}] = \tilde{F}(x_j, t_n) \quad (3.23)$$

donde

$$S_n = \Gamma(2 - \gamma) K \frac{(t_n - t_{n-1})^\gamma}{(\Delta x)^2}, \quad (3.24)$$

$$\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} = (t_n - t_{n-1})^\gamma T_{m,n}^{(\gamma)}, \quad (3.25)$$

$$T_{0,1}^{(\gamma)} = (t_1 - t_0)^{-\gamma}, \quad (3.26)$$

$$T_{m,n}^{(\gamma)} = \frac{(t_n - t_m)^{1-\gamma} - (t_n - t_{m+1})^{1-\gamma}}{t_{m+1} - t_m}, \quad m \leq n-1, \quad (3.27)$$

$$\tilde{F}(x_j, t_n) = \Gamma(2 - \gamma) (t_n - t_{n-1})^\gamma F(x_j, t_n). \quad (3.28)$$

De ahora en adelante se usará la convención de que una tilde sobre un símbolo equivale al símbolo sin tilde multiplicado por $(t_n - t_{n-1})^\gamma$. Reordenando (3.23) y teniendo en cuenta que $\tilde{T}_{n-1,n}^{(\gamma)} = 1$ [véase (3.27)] se llega al esquema en diferencias finitas que se estaba buscando:

$$-S_n U_{j+1}^{(n)} + (1 + 2S_n) U_j^{(n)} - S_n U_{j-1}^{(n)} = \mathcal{M} U_j^{(n)} + \tilde{F}_j^{(n)} \quad (3.29)$$

siendo \mathcal{M} el operador en diferencias definido por

$$\mathcal{M} U_j^{(n)} \equiv U_j^{(n-1)} - \sum_{m=0}^{n-2} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}]. \quad (3.30)$$

Aquí y en lo que sigue se adoptará la convención de que un sumatorio es cero cuando el límite inferior es mayor que el límite superior.

La ecuación (3.29) puede escribirse en forma vectorial como

$$AU^{(n)} = \mathcal{M}U^{(n)} + \tilde{F}^{(n)}. \quad (3.31)$$

Comparando esta ecuación con $\tilde{\delta}U = \tilde{F}$ es inmediato deducir que

$$\tilde{\delta} = A - \mathcal{M}. \quad (3.32)$$

El presente método es implícito porque es preciso resolver el sistema tri-diagonal (3.29) para obtener la solución numérica $U^{(n)}$. Afortunadamente, el sistema puede ser eficientemente resuelto por medio del algoritmo de Thomas ya que A es una matriz de diagonal estrictamente dominante. Para el caso de pasos uniformes este método se reduce al considerado en [68].

El operador \mathcal{M} es un tipo de operador con memoria (que tiene su origen en la memoria, en el carácter no local, de la derivada fraccionaria) en el sentido de que su efecto sobre U en el instante t_n , $U^{(n)}$, depende de *todos* los valores previos $\{U^{(0)}, U^{(1)}, \dots, U^{(n-1)}\} \equiv U^{\{n-1\}}$. Cuando sea conveniente, se hará énfasis en este hecho escribiendo $\mathcal{M}U^{(n)}$ como $\mathcal{M}[U^{\{n-1\}}]$ ya que esta última forma tiene la virtud de poner de manifiesto que el valor de $\mathcal{M}U$ en el instante t_n se obtiene a partir de los valores de U en todos los instantes previos t_{n-1}, \dots, t_0 . Entonces, la solución de (3.31) puede escribirse en la forma

$$U^{(n)} = A^{-1}\mathcal{M}[U^{\{n-1\}}] + A^{-1}\tilde{F}^{(n)}. \quad (3.33)$$

Es interesante hacer notar que, si se discretiza la derivada de Caputo en el instante t_{n+1} y el Laplaciano en el instante t_n , obtenemos de forma automática un esquema en diferencias finitas *explícito*

$$\sum_{m=0}^n \tilde{T}_{m,n+1}^{(\gamma)} \left[U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)} \right] - S_n [U_{j+1}^{(n)} - 2U_j^{(n)} + U_{j-1}^{(n)}] = \tilde{F}_j^{(n)}. \quad (3.34)$$

No se va a estudiar este esquema explícito porque, como ya se ha comentado, resulta inestable si, para un conjunto dado de parámetros γ , Δx , y K_γ , los pasos temporales no son lo suficientemente pequeños. Verdaderamente, esto supone una limitación del método con pasos temporales variables. No obstante, examinar cómo la no uniformidad de los pasos temporales afecta a las regiones de estabilidad en el espacio de parámetros constituiría, desde una perspectiva teórica, un tópico muy interesante. Para el caso de pasos temporales uniformes, este método explícito se transforma en el esquema considerado en [74].

3.1.1.1. Análisis de Estabilidad y Convergencia

Para chequear si el esquema en diferencias finitas $\tilde{\partial}U = \tilde{F}$ dado por las ecuaciones (3.23) o (3.29) es estable, se debe estudiar cómo una solución perturbada \hat{U} evoluciona con respecto a la solución referencia U , o, en otras palabras, cómo (el tamaño de) la perturbación $e = \hat{U} - U$ evoluciona en el tiempo. Usualmente, la perturbación inicial $e^{(0)}$ es considerada como la diferencia entre la condición inicial exacta y la representación con precisión finita que proporciona el ordenador (error de redondeo). Dado que $\tilde{\delta}$ es un operador lineal, se deduce que la perturbación satisface $\tilde{\delta}e = 0$, esto es, la misma ecuación que U en (3.23), (3.29) o (3.31) cuando $F = 0$:

$$Ae^{(n)} = \mathcal{M}e^{(n)}. \quad (3.35)$$

En el estudio de la estabilidad del algoritmo en diferencias para la ecuación subdifusiva fraccionaria que se ha desarrollado, se va a emplear la técnica de tipo von Neumann-Fourier introducida para este tipo de esquemas en Refs. [66, 62], si bien se debe señalar que Zhang et al. han llevado a cabo en [123] una demostración alternativa de la estabilidad de este método.

Para empezar, se asume que $e_j^{(n)}$ viene descrita por una serie de Fourier discreta

$$e_j^{(n)} = \sum_q \xi_q^{(n)} e^{iqj\Delta x}, \quad (3.36)$$

donde la suma es sobre el número de ondas q soportado por el retículo, y a continuación se analiza la estabilidad de la solución completa a partir del análisis de la estabilidad de un q -modo de Fourier genérico, $\xi_q^{(n)} e^{iqj\Delta x}$. La idea que subyace a este procedimiento es que si un modo cualquiera es estable, entonces la solución completa $e_j^{(n)}$, escrita como una superposición de modos, es estable también.

Insertando la expresión para el modo genérico, $\xi_q^{(n)} e^{iqj\Delta x}$, en (3.35) y usando las definiciones de A y $\mathcal{M}U$ [véase (3.30)] se tiene

$$(1 + \hat{S}_n)\xi_q^{(n)} = \sum_{m=0}^{n-1} \left(\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} - \tilde{T}_{m-1,n}^{(\gamma)} \right) \xi_q^{(m)} \quad (3.37)$$

donde

$$\hat{S}_n = 4 \sin^2 \left(\frac{q\Delta x}{2} \right) S_n. \quad (3.38)$$

Se ha tenido en cuenta que $\tilde{T}_{n-1,n}^{(\gamma)} = 1$ y se ha definido $\tilde{T}_{-1,n}^{(\gamma)} \equiv 0$.

En este punto, se hace uso de un procedimiento similar al seguido por Murio en Ref. [124]. Sin embargo, debe señalarse que nuestra demostración es más general (y difícil) ya que no se asume, como se hace en Ref. [124], que (en general) la cantidad compleja $\xi_q^{(n)}$ es real y positiva.

Comenzamos por probar que

$$T_{m,n}^{(\gamma)} > T_{m-1,n}^{(\gamma)} \quad (3.39)$$

De la definición de $T_{m,n}^{(\gamma)}$ y haciendo el cambio de variable $z_m = t_n - t_m$, se puede ver que

$$T_{m,n}^{(\gamma)} = \frac{z_m^{1-\gamma} - z_{m+1}^{1-\gamma}}{z_m - z_{m+1}} \quad (3.40)$$

Definamos la función $f(z) = z^{1-\gamma}$. Probar (3.39) equivale a probar que

$$\frac{f(z_{m+1}) - f(z_m)}{z_{m+1} - z_m} < \frac{f(z_m) - f(z_{m-1})}{z_m - z_{m-1}} \quad (3.41)$$

lo cual es cierto para cualquier función monótona creciente $f(z)$ con derivada $f'(z)$ monótona decreciente, como es el caso de $f(z) = z^{1-\gamma}$.

A partir de (3.37) y teniendo en cuenta que, como se acaba de probar, $\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} - \tilde{T}_{m-1,n}^{(\gamma)} > 0$ para cualquier discretizado temporal, se tiene que

$$(1 + \hat{S}_n) |\xi_q^{(n)}| \leq \sum_{m=0}^{n-1} \left(\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} - \tilde{T}_{m-1,n}^{(\gamma)} \right) |\xi_q^{(m)}| \leq |\xi_q^{\{n-1\}}|_{\max} \sum_{m=0}^{n-1} \left(\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} - \tilde{T}_{m-1,n}^{(\gamma)} \right) \quad (3.42)$$

donde se ha definido

$$|\xi_q^{\{n-1\}}|_{\max} \equiv \max \{ |\xi_q^{(0)}|, |\xi_q^{(1)}|, \dots, |\xi_q^{(n-1)}| \}. \quad (3.43)$$

Pero $\sum_{m=0}^{n-1} \left(\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} - \tilde{T}_{m-1,n}^{(\gamma)} \right) = 1$ [recuérdese que $\tilde{T}_{n-1,n}^{(\gamma)} = 1$ y $\tilde{T}_{-1,n}^{(\gamma)} \equiv 0$] de modo que

$$|\xi_q^{(n)}| \leq |\xi_q^{\{n-1\}}|_{\max} \quad (3.44)$$

porque $(1 + \hat{S}_n) > 1$. Obviamente, (3.44) implica, a fortiori, que

$$|\xi_q^{(n)}| \leq |\xi_q^{(0)}| \quad (3.45)$$

para todo n . Por consiguiente, la perturbación del modo genérico se mantiene menor o igual que la perturbación inicial $|\xi_q^{(n)}| \leq |\xi_q^{(0)}|$. Esto significa que el presente método en diferencias finitas es incondicionalmente estable.

La condición de estabilidad también puede expresarse en términos de la norma 2 (o norma euclídea) de la perturbación: $\|e^{(n)}\|_2^2 \equiv \Delta x \sum_j |e_j^{(n)}|^2$. La ecuación de estabilidad (3.45) puede pasarse a esta forma mediante la relación de Parseval, $\|e^{(n)}\|_2^2 = \sum_q |\xi_q^{(n)}|^2$ [111]. Usando esta relación, la expresión (3.45) se convierte en

$$\|e^{(n)}\|_2 \leq \|e^{(0)}\|_2, \quad (3.46)$$

la cual implica que la norma de la perturbación permanece acotada por la norma de la perturbación inicial: $\|e^{(n)}\|_2 \leq \|e^{(0)}\|_2$.

La solución de (3.35) puede escribirse como

$$e^{(n)} = A^{-1} \mathcal{M} [e^{\{n-1\}}] \quad (3.47)$$

de manera que la condición de estabilidad dada por (3.46) implica que el operador $A^{-1} \mathcal{M}$ tiene la propiedad clave

$$\|A^{-1} \mathcal{M} [e^{\{n-1\}}]\|_2 \leq \|e^{(0)}\|_2. \quad (3.48)$$

La cualidad básica que un esquema en diferencias $\delta U = F$ debería exhibir es que sus soluciones aproximadas converjan a la solución exacta de la ecuación diferencial $\partial U = F$ cuando el tamaño de la discretización espacio-temporal tienda a cero. En tal caso se dice que el método es convergente [122, 111]. Se va a mostrar que para toda una clase de algoritmos en diferencias para ecuaciones fraccionarias, al igual que ocurre en el caso de los algoritmos en diferencias para ecuaciones diferenciales ordinarias, la consistencia y la estabilidad del esquema en diferencias implica su convergencia. Este resultado puede verse como una extensión de la condición suficiente del teorema de equivalencia de Lax al caso de ecuaciones fraccionarias de la forma $\partial u = F$, o como la contraparte fraccionaria del que a menudo es denominado teorema fundamental de los métodos en diferencias finitas [122].

Se define $E_j^{(k)}$ como la diferencia entre la solución numérica y la exacta en el punto (x_j, t_m) : $E_j^{(k)} = U_j^{(k)} - u_j^{(k)}$. Por definición $\partial u = \delta u + R$, $\delta U = 0$ y $\partial u = 0$, de modo que, debido a que estos operadores son *lineales*, se tiene que $\tilde{\delta} E = \tilde{R}$. Pero $\tilde{\delta} = A - \mathcal{M}$ [véase (3.31)], y entonces

$$AE^{(n)} = \mathcal{M} [E^{\{n-1\}}] + \tilde{R}^{(n)} \Leftrightarrow E^{(n)} = A^{-1} \mathcal{M} [E^{\{n-1\}}] + A^{-1} \tilde{R}^{(n)}. \quad (3.49)$$

Por lo tanto

$$\|E^{(n)}\|_2 \leq \|A^{-1} \mathcal{M} [E^{\{n-1\}}]\|_2 + \|A^{-1}\|_2 \|\tilde{R}^{(n)}\|_2 \quad (3.50)$$

y, puesto que el método es *estable*, se cumple (3.48) y entonces (3.50) se transforma en

$$\|E^{(n)}\|_2 \leq \|E^{(0)}\|_2 + \|A^{-1}\|_2 \|\tilde{R}^{(n)}\|_2. \quad (3.51)$$

Si, cuando el tamaño del discretizado tiende a cero, (i) $\|\bar{R}^{(n)}\|_2$ tiende a cero (esto es, si el método es *consistente*) y (ii) $\|A^{-1}\|_2$ está acotada, entonces (3.51) implica que el error $\|E^{(n)}\|_2$ tiende a cero. Es decir, el método es convergente. En particular, el método en diferencias finitas que nos ocupa es convergente ya que, (i) el método es consistente [véase (3.21)] y (ii) $\|A^{-1}\|_2$ está siempre acotada puesto que A es una matriz Toeplitz real simétrica tri-diagonal con todos sus autovalores mayores que 1 [122]. Se debe hacer notar que la presente demostración es bastante general puesto que sólo se requieren propiedades genéricas (linealidad, acotación, estabilidad) de los operadores \mathcal{M} y A presentes en la ecuación en diferencias finitas. De hecho esta demostración es, por así decir, *paralela* al procedimiento estándar empleado para probar este resultado en el caso de problemas difusivos no fraccionarios [125]. De esta manera, cabe darse cuenta de que algunos aspectos de los métodos en diferencias finitas para el caso fraccionario pueden ser incluidos en el ámbito de la teoría estándar de los métodos en diferencias finitas para el caso no fraccionario. Es más, los métodos en diferencias para el caso fraccionario pueden ser vistos como casos particulares de esquemas con múltiples niveles en los que el número de niveles *crece* con el tiempo.

3.1.2. Un primer ejemplo de método adaptativo: dispersión de un flujo de partículas subdifusivas

Se va a realizar un primer test del esquema en diferencias finitas (3.23) resolviendo un problema que describe la dispersión de un flujo constante de partículas subdifusivas anómalas que aparecen en un punto dado. En particular, en este problema el flujo va a ser unitario pues cada partícula es liberada en cada unidad de tiempo en los instantes $t = 0, 1, 2, \dots$ desde una fuente de partículas situada en $x = 0$ en el seno de un medio infinito unidimensional. Se asumirá que la densidad de probabilidad $u(x, t)$ de encontrar una partícula en la posición x en el instante t sigue la ecuación subdifusiva fraccionaria $\partial u = 0$. La liberación de una partícula en el instante n -ésimo es descrita por medio de la introducción de la función delta de Dirac, $\delta(x)$, en ese instante [véase la ecuación (3.3)]. La distribución de probabilidad asociada a cada partícula es justamente el propagador (o función de Green), $G(x, t - k)$, del problema, esto es, la solución de $\partial u = 0$ en el espacio no acotado cuando hay una única función delta de Dirac que aparece en $t = k$. Este propagador puede escribirse explícitamente en términos de la función H de Fox [véase la

Sec. 3 del capítulo 1]

$$G(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi K_\gamma t^\gamma}} H_{11}^{10} \left[\frac{|x|}{\sqrt{K t^\gamma}} \middle| \begin{array}{l} (1 - \gamma/2, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{array} \right]. \quad (3.52)$$

Finalmente, dada la naturaleza lineal del problema, la solución exacta vendrá dada por la superposición de funciones de Green

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\lfloor t \rfloor} G(x, t - k) \quad (3.53)$$

donde $\lfloor t \rfloor$ es la función “suelo” definida como $\lfloor t \rfloor = \max \{k \in \mathbb{Z} \mid k \leq t\}$. La evolución de $u(x, t)$ viene dada por la ecuación (3.2), $\partial u = F$, donde F es

$$F(x, t) = \delta(x) \sum_{k=0}^{\lfloor t \rfloor} \delta^{(\gamma)}(t - k) \quad (3.54)$$

con

$$\delta^{(\gamma)}(t - k) \equiv \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \Theta(t - k), \quad (3.55)$$

siendo Θ la función escalón de Heaviside.

El problema que se acaba de plantear, con el añadido de que las partículas pueden reaccionar y desaparecer, se ha empleado como un modelo del desarrollo de los gradientes de morfógenos (un concepto clave en la biología del desarrollo) cuando la difusión anómala de los morfógenos se describe mediante un modelo de camino aleatorio en el tiempo CTRW [94]. Dado que el conocimiento de la distribución para tiempos grandes de morfógenos en el medio reviste especial importancia, los métodos numéricos que pueden usar pasos de tiempo grandes (que permitan avanzar rápido) y pasos de tiempo pequeños (que permitan tener en cuenta aquellas regiones de gran variabilidad cuando las partículas son liberadas) son extremadamente convenientes.

En lo que respecta a las condiciones de contorno, aunque, como es obvio, no es posible emplear condiciones de contorno en el infinito cuando se utiliza una aproximación numérica, se puede resolver el problema mediante unas condiciones de contorno adecuadas, es decir condiciones de contorno absorbentes $u(x = -L/2, t) = u(x = L/2, t) = 0$, tan lejos de la fuente situada en $x = 0$ que, para un tiempo t finito, su impacto sobre la solución sea despreciable en la región de interés que está, por construcción, bastante alejada de los extremos. En nuestros cálculos, donde se ha elegido $K = 1$ y $\gamma = 1/2$ y el máximo valor del tiempo es $t = 2$, se ha considerado $L = 20$. Para esta elección de los parámetros, el valor exacto de la solución en los

límites es $u(\pm 10, 2) \simeq 5 \times 10^{-5}$, que puede ser aproximado a 0 dado que, como se verá a continuación, los errores están bastante por encima de 10^{-4} . Los nodos del retículo espacial que se ha usado están situados en $x_j = j \Delta x$ con $j = -N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2$, $N = 100$, y $\Delta x = 0.2$. Finalmente, cada función delta de Dirac, $\delta(x)$, se aproxima por su versión discretizada

$$\delta(x) \simeq \begin{cases} 1/\Delta x, & j = 0, \\ 0, & j \neq 0. \end{cases} \quad (3.56)$$

Nótese que la discontinuidad de la solución debida a la aparición periódica de las funciones delta de Dirac en los instantes $t = k$ (con k entero) requiere de un tratamiento específico. Aunque en el desarrollo previo de nuestro algoritmo de pasos variables sólo se ha considerado el caso en el que la solución es continua, las discontinuidades pueden ser fácilmente abordadas con el algoritmo que se ha desarrollado teniendo en cuenta (3.12), la cual es válida incluso para funciones discontinuas en los tiempos de discretización t_m . De esta manera, manteniendo el símbolo $U_j^{(m)}$ para la estimación de $u(x_j, t_m^-)$ y denotando por $V_j^{(m)}$ la estimación de $u(x_j, t_m^+)$, la ecuación (3.23) queda como sigue

$$\sum_{m=0}^{n-1} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - V_j^{(m)}] - S_n [U_{j+1}^{(n)} - 2U_j^{(n)} + U_{j-1}^{(n)}] = \tilde{F}(x_j, t_n). \quad (3.57)$$

El algoritmo en este caso puede escribirse como en (3.31) pero ahora quedaría

$$\mathcal{M}U_j^{(n)} \equiv V_j^{(n-1)} - \sum_{m=0}^{n-2} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - V_j^{(m)}]. \quad (3.58)$$

En particular, la función delta de Dirac en $x = 0$ en el instante $t = k$ puede aproximarse por $V_0^{(n)} = 1/\Delta x + U_0^{(n)}$ siempre que $t_n = k$.

En las Figs. 3.1 y 3.2 se comparan las soluciones exactas y las soluciones numéricas obtenidas a partir del método implícito desarrollado cuando la discretización no uniforme viene dada por el siguiente paso temporal adaptativo

$$t_{m+1} - t_m = \min \{10^{-4} \coth [|g(t_m)|/1000], 0.02\}. \quad (3.59)$$

Aquí $g(t_m) = (U_{-1}^{(m)} - 2U_0^{(m)} + U_1^{(m)})/(\Delta x)^2$ es la estimación central de tres puntos de la derivada espacial segunda en $x = 0$ y en el instante t_m : $g(t_m) \simeq \partial^2 u(x, t_m)/\partial x^2|_{x=0}$, esto es, una estimación de la curvatura de la solución en el lugar donde cambia más abruptamente. El acuerdo es excelente. De hecho, incluso en $x = 0$, el punto en el que la solución numérica es peor, los resultados son bastante buenos (véase la Fig. 3.3). El error relativamente

grande para tiempos pequeños posteriores a la aparición de la función delta de Dirac es debido a que se emplea una aproximación un tanto burda para esta función [véase la ecuación (3.56)].

Aunque la fórmula (3.59) para el espaciado temporal $t_{m+1} - t_m$ es en realidad arbitraria, presenta características muy convenientes: tiene valores mínimo y máximo prefijados (0.0001 y 0.02, respectivamente) y $t_{m+1} - t_m$ crece (decrece) cuando la curvatura para $x = 0$, $\partial^2 u(x, t_m) / \partial x^2|_{x=0}$, decrece (crece). Esto garantiza una descripción más cuidadosa de la solución allí donde sea necesario, es decir, en aquellas regiones donde la solución cambia más rápidamente. Por ejemplo, cuando se utiliza (3.59), se utilizan 5 pasos temporales en el minúsculo intervalo temporal entre $t = 0$ y $t = 0.01$ (una región en la que la solución cambia abruptamente; véase la Fig. 3.3); sin embargo, sólo se precisan 59 pasos temporales adicionales para cubrir el intervalo comparativamente mucho mayor que va desde $t = 0.01$ hasta $t = 1$. Es interesante hacer notar que este hecho hace que el procedimiento con pasos temporales variables sea al menos tan preciso como el método con pasos temporales fijos $t_{m+1} - t_m = 0.001$ en la región de mayor dificultad próxima a $t = 0$ (véase la Fig. 3.4). Sin embargo, este elevado nivel de precisión no se alcanza a expensas de un mayor coste en términos computacionales: basta comparar los 64 pasos [17 pasos] requeridos en el caso del método de pasos temporales variables para llegar a $t = 1$ [$t = 0.1$] con los 1000 pasos [100 pasos] requeridos cuando $t_{m+1} - t_m = 0.001$. Esta diferencia está lejos de ser menor porque, para el esquema (3.23), el tiempo necesario para calcular la solución después de n pasos crece aproximadamente como n^2 , como ya se ha comentado al principio de este capítulo. De hecho, en los cálculos reales se ha determinado que el tiempo de CPU invertido en evaluar la solución en $t = 1$ con $t_{m+1} - t_m = 0.001$ fue más de 100 veces superior al requerido cuando se utiliza (3.59).

Finalmente, se debe hacer notar que para una ecuación de difusión estándar (no fraccionaria) una discretización temporal basada en la aproximación $g(t)$ de $\partial^2 u / \partial x^2$ (que es el procedimiento que se ha empleado) equivale a una discretización temporal basada en la estimación de la derivada local $\partial u / \partial t$. Ello es debido al hecho de que ambas cantidades están relacionadas por la ecuación de difusión, de modo que estimar $\partial^2 u / \partial x^2$ es lo mismo que estimar $\partial u / \partial t$. Análogamente, para la ecuación difusiva fraccionaria que se viene representando de forma simplificada como $\partial u = F$, una discretización temporal basada en la estimación de $g(t)$ para $\partial^2 u / \partial x^2$ (Laplaciano) equivale a una discretización basada en la estimación de la derivada temporal fraccionaria ${}_0^C D_t^\gamma$. Sin embargo, debido a que el Laplaciano es un operador local (mientras que las derivadas fraccionarias son operadores no locales) la forma más fácil de estimar el tamaño de ${}_0^C D_t^\gamma$ en cada paso temporal es calculando $g(t)$. Para

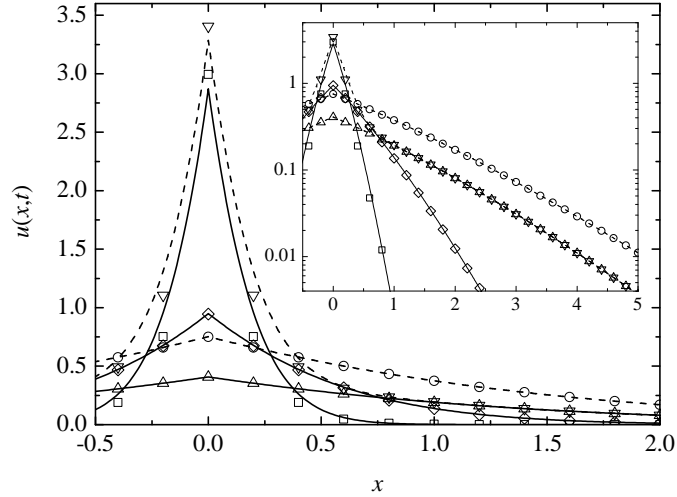


Figura 3.1: Solución exacta $u(x, t)$ (líneas) y soluciones numéricas $U_j^{(n)}$ con pasos temporales variables dados por (3.59) (símbolos) para el problema descrito en la Sec. 3.1.2 con (de arriba a abajo para $x = 0$) $t = 1.0004$ (66 pasos temporales, triángulos hacia abajo), $t = 4.08 \times 10^{-4}$ (un paso temporal, cuadrados), $t = 0.034$ (10 pasos temporales, diamantes), $t = 2.0$ (141 pasos temporales, círculos), y $t = 1$ (65 pasos temporales, triángulos hacia arriba). Las líneas para $t > 1$ son discontinuas. Gráfica pequeña interior: colas de las soluciones a escala logarítmica.

concluir, se debe hacer notar que para esta clase de problema fraccionario la derivada temporal local no es el instrumento más apropiado a la hora de predecir el comportamiento de la solución (y, en consecuencia, el tamaño de los pasos temporales) pues el comportamiento de la solución depende de sus valores presentes y *pasados* debido a la naturaleza no local de la derivada temporal fraccionaria. En resumen, la razón que está detrás de nuestra particular elección para $g(t)$ como el parámetro que permite calibrar el tamaño de los pasos temporales es la consideración de que los cambios experimentados por la solución dependen del tamaño de la derivada temporal fraccionaria, la cual puede estimarse a partir del valor del Laplaciano por medio de la ecuación difusiva fraccionaria, $\partial u = F$.

En las secciones siguientes se van a explorar otros criterios o fórmulas para elegir el tamaño de los pasos temporales generando métodos adaptativos.

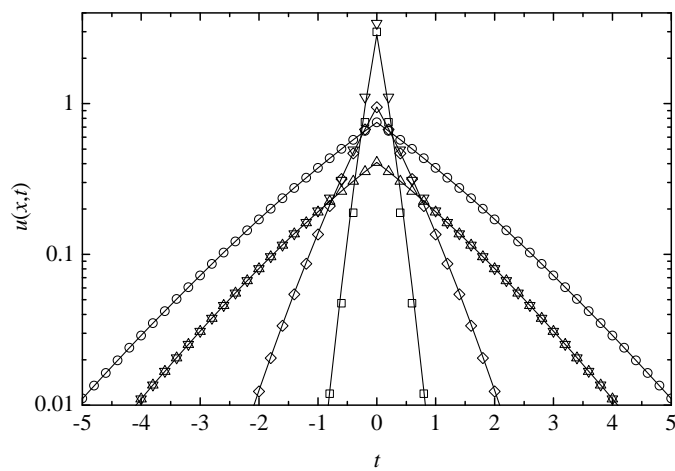


Figura 3.2: Representación simétrica de las soluciones exactas $u(x, t)$ (líneas) y soluciones numéricas $U_j^{(n)}$, en escala logarítmica con pasos temporales variables dados por (3.59) (símbolos) para el problema descrito en la Sec. 3.1.2 con (de arriba a abajo para $x = 0$) $t = 1.0004$ (66 pasos temporales, triángulos hacia abajo), $t = 4.08 \times 10^{-4}$ (un paso temporal, cuadrados), $t = 0.034$ (10 pasos temporales, diamantes), $t = 2.0$ (141 pasos temporales, círculos), y $t = 1$ (65 pasos temporales, triángulos hacia arriba).

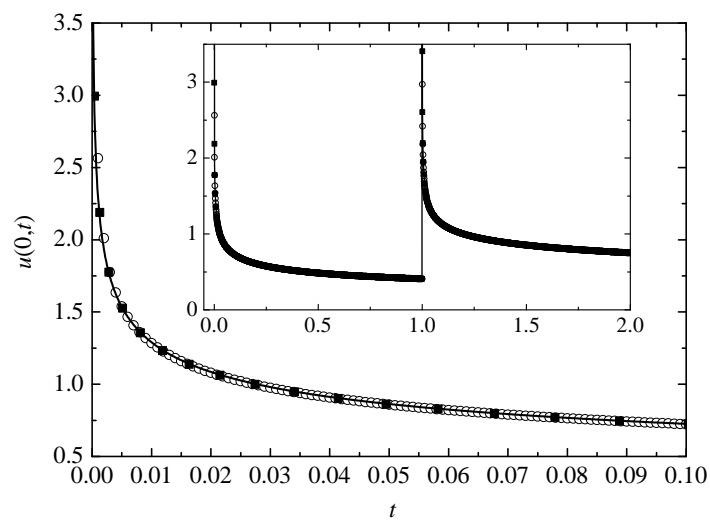


Figura 3.3: Solución exacta $u(0, t)$ (línea) y solución numérica $U_0^{(n)}$ (símbolos) en el origen $x = 0$ para el problema descrito en la Sec. 3.1.2 para pasos temporales fijos $t_{m+1} - t_m = 0.001$ (círculos) y pasos temporales variables dados por (3.59) (cuadrados rellenos) en el intervalo temporal $0 \leq t \leq 0.1$. Gráfica pequeña interior: soluciones en el intervalo temporal completo. En esta gráfica pequeña sólo se representa 1 de cada 20 puntos para el caso con pasos temporales fijos.

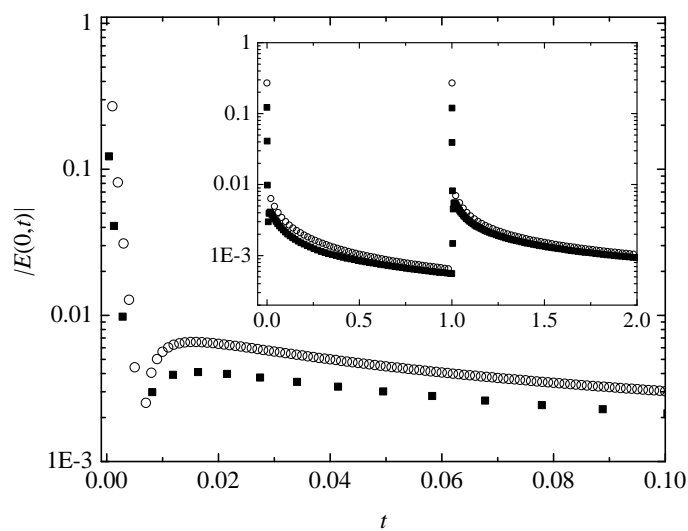


Figura 3.4: Valor absoluto de la diferencia entre la solución exacta y la solución numérica (error) en $x = 0$, $|E(0, t)|$, para el problema descrito en la Sec. 3.1.2 para pasos temporales fijos $t_{m+1} - t_m = 0.001$ (círculos) y pasos temporales variables dados por (3.59) (cuadrados) en el intervalo temporal $0 \leq t \leq 0.1$. Gráfica pequeña interior: error en el intervalo temporal completo. En esta gráfica pequeña sólo se representa 1 de cada 20 puntos para el caso con pasos temporales fijos.

3.1.3. Método adaptativo Ensayo y Error (EE)

El algoritmo de pasos variables sobre el que se va a construir el método es el desarrollado en la sección anterior

$$\sum_{m=0}^{n-1} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}] - S_n [U_{j+1}^{(n)} - 2U_j^{(n)} + U_{j-1}^{(n)}] = \tilde{F}(x_j, t_n) \quad (3.60)$$

donde

$$S_n = \Gamma(2 - \gamma) K \frac{(t_n - t_{n-1})^\gamma}{(\Delta x)^2}, \quad (3.61)$$

$$\tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} = (t_n - t_{n-1})^\gamma T_{m,n}^{(\gamma)}, \quad (3.62)$$

$$T_{0,1}^{(\gamma)} = (t_1 - t_0)^{-\gamma}, \quad (3.63)$$

$$T_{m,n}^{(\gamma)} = \frac{(t_n - t_m)^{1-\gamma} - (t_n - t_{m+1})^{1-\gamma}}{t_{m+1} - t_m}, \quad m \leq n-1, \quad (3.64)$$

$$\tilde{F}(x_j, t_n) = \Gamma(2 - \gamma) (t_n - t_{n-1})^\gamma F(x_j, t_n). \quad (3.65)$$

Como ya se ha comentado con anterioridad, se usará la convención de que una tilde sobre un símbolo equivale al símbolo sin tilde multiplicado por $(t_n - t_{n-1})^\gamma$. Reordenando (3.60) y teniendo en cuenta que $\tilde{T}_{n-1,n}^{(\gamma)} = 1$ [véase (3.64)] se llega al esquema en diferencias finitas con el que se va a trabajar

$$-S_n U_{j+1}^{(n)} + (1 + 2S_n) U_j^{(n)} - S_n U_{j-1}^{(n)} = U_j^{(n-1)} - \sum_{m=0}^{n-2} \tilde{T}_{m,n}^{(\gamma)} [U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}] + \tilde{F}_j^{(n)}. \quad (3.66)$$

Para resolver este esquema, se ha desarrollado un método adaptativo que se ha bautizado como Ensayo y Error (EE) y que se basa en la técnica de los dos pasos con duplicación (two step-doubling technique) [126]. El método funciona de la siguiente manera:

Si consideramos la solución $U_j^{(n-1)}$ en el instante t_{n-1} , podemos calcular la solución para el instante t_n , $U_j^{(n)}$, mediante el empleo de dos procedimientos diferentes. En el primero de ellos, asumimos que sólo hay un único paso temporal, $\Delta_n = t_n - t_{n-1}$, entre t_{n-1} y t_n y calculamos $U_j^{(n)}$ en base a esta suposición. En el segundo procedimiento, consideramos que hay dos pasos temporales de longitud $\Delta_n/2$ entre t_{n-1} y t_n y, en consecuencia, debemos iterar dos veces para obtener el valor de $U_j^{(n)}$. Sea $\hat{U}_j^{(n)}$ el valor de $U_j^{(n)}$ obtenido mediante el primer procedimiento descrito, y sea $\bar{U}_j^{(n)}$ el valor de $U_j^{(n)}$ proporcionado por el segundo procedimiento. La diferencia, $\mathcal{E}^{(n)}$ entre

las dos estimaciones numéricas de la solución, $\hat{U}_j^{(n)}$ y $\bar{U}_j^{(n)}$, (véase la Fig. 3.5) permitirá calibrar el error de truncamiento. El algoritmo de control, mediante el ajuste del tamaño de los pasos temporales, mantiene esta diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ cercana a un valor prefijado τ , que denominamos *tolerancia*. Se va a definir la diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ como

$$\mathcal{E}^{(n)} = \max_{\forall k} \left| \hat{U}_k^{(n)} - \bar{U}_k^{(n)} \right|. \quad (3.67)$$

De modo similar, se definirá el error numérico en el tiempo t_n como

$$error(t_n) \equiv E_n = \max_{\forall x_j} \left| u(x_j, t_n) - U_k^{(n)} \right|. \quad (3.68)$$

El algoritmo de elección del tamaño de paso EE es el siguiente:

1. Se toma inicialmente $\Delta_n = \Delta_{n-1}$.
2. Si, inicialmente, $\mathcal{E}^{(n)}$ es mayor que la tolerancia τ , entonces se divide por dos el paso temporal Δ_n y se chequea si la nueva diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ correspondiente al nuevo paso temporal (esto es, al paso temporal $\Delta_n/2$) continúa siendo mayor que la tolerancia. Se repite este procedimiento hasta que la diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ sea menor que τ . En este caso, se toma el último paso temporal obtenido como el valor apropiado.
3. Pero si, inicialmente, la diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ es menor que la tolerancia τ , se dobla el tamaño del paso temporal. Se repetirá este procedimiento hasta que $\mathcal{E}^{(n)}$ sea mayor que la tolerancia. Cuando esto ocurra, se considera como el valor apropiado del paso temporal aquel que es *previo* al último.

Si se considera $t_0 = 0$ como el instante inicial, la sucesiva repetición de este proceso va a permitir calcular $U_j^{(n)}$ para cualquier n . Para calcular Δ_n se toma como punto de partida el paso temporal previo Δ_{n-1} . Nótese que el valor de Δ_n para $n = 1$, exige conocer el valor de Δ_0 para poder arrancar el método. Este valor se escoge de forma arbitraria. En nuestros cálculos siempre se considera $\Delta_0 = 0.01$ ya que el valor de este paso temporal *semilla* es bastante irrelevante por cuanto el algoritmo EE encuentra rápidamente un paso temporal Δ_1 que conduce a un valor apropiado de $\mathcal{E}^{(1)}$. La tolerancia τ es un parámetro libre que se escoge de acuerdo con la precisión numérica que se desee.

Como ya se señaló al inicio de la sección, se empezará aplicando el método adaptativo EE al mismo problema tipo que estudiamos en el capítulo 1 dedicado a métodos explícitos, esto es

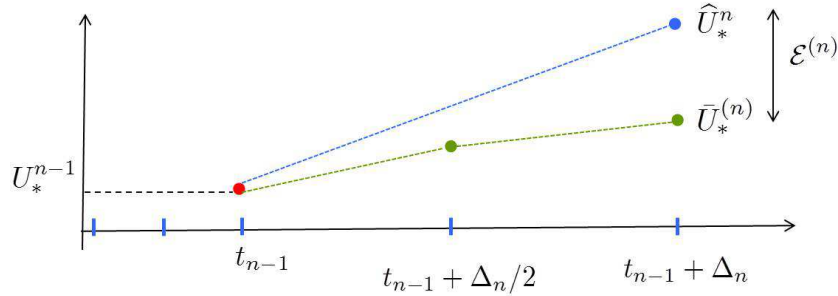


Figura 3.5: Esquema de la técnica de los dos pasos con duplicación. La solución en el instante t_n se obtiene por medio de (i) un único paso temporal de tamaño $t_n - t_{n-1}$ y (ii) por medio de dos pasos de tamaño $(t_n - t_{n-1})/2$. La diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ entre ambas soluciones es un indicador del error numérico.

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad \text{para } 0 < \gamma < 1 \quad (3.69a)$$

$$CC : \begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(\pi, t) = 0 \end{cases} \quad (3.69b)$$

$$CI : u(x, 0) = \text{sen } x \quad (3.69c)$$

donde ${}_0^C D_t^\gamma u(x, t)$ es la derivada de Caputo de orden γ de $u(x, t)$. En la Sec. 6.1 del Apéndice se proporcionan los parámetros para resolver este problema.

Como ya se ha señalado en el capítulo 2, la solución analítica para este problema cuando $K_\gamma = 1$ es

$$u(x, t) = E_\gamma(-t^\gamma) \cdot \text{sen } x. \quad (3.70)$$

Se debe hacer notar una vez más que, si se discretiza la derivada de Caputo en t_{n+1} y el Laplaciano en t_n , se obtiene de forma automática un esquema en diferencias finitas que será *explícito*. Como ya se ha comentado con anterioridad, la resolución de este esquema no es de nuestro interés por cuanto sería inestable si, para un conjunto dado de parámetros γ , Δx , y K , los pasos temporales no son lo suficientemente pequeños. Este hecho supone una seria limitación de cualquier otra ventaja que pueda aportar un método adaptativo.

3.1.3.1. Estudio numérico

Se ha desarrollado mucho trabajo computacional para estudiar el algoritmo adaptativo EE. Los resultados que se muestran en primer término han sido obtenidos para $\gamma = 0.5$, pues se trata de un valor muy representativo del

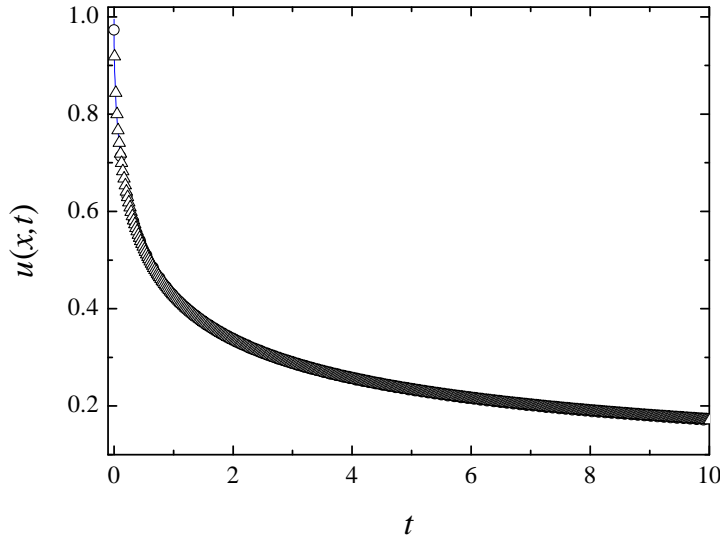


Figura 3.6: Soluciones en el punto medio $x = \pi/2$ para el problema (3.69) cuando $\gamma = 1/2$. Línea continua: solución exacta $E_{0.5}(-t^{0.5})$; círculos: solución numérica correspondiente a $\Delta t = 0.001$, $numpasos = 10000$; triángulos: solución numérica correspondiente a $\Delta t = 0.01$, $numpasos = 1000$. En todos los casos, $\Delta x = \pi/40$

caso subdifusivo. La consideración de otros valores de γ conduce a resultados muy similares. En lo que sigue, se define el parámetro $numpasos$ como el número de iteraciones que se han ejecutado.

Para empezar, se ha calculado la solución numérica del esquema (3.66) considerando pasos temporales uniformes. En la Fig. 3.6 se pueden ver las soluciones numéricas en $x = \pi/2$, cuando se emplean $\Delta t = 0.001$ y $\Delta t = 0.01$, junto con la solución exacta obtenida a partir de la función de Mittag-Leffler, $u(\pi/2, t) = E_{0.5}(-t^{0.5})$. Como se puede comprobar a simple vista, el acuerdo entre la solución analítica y las soluciones numéricas para $\Delta t = 0.001$ y $\Delta t = 0.01$ es muy bueno.

A continuación, se ha calculado la solución numérica por medio del método adaptativo EE. En la Fig. 3.7 los valores exactos de $u(\pi/2, t)$ se comparan con sus correspondientes estimaciones numéricas. Se ha usado $\Delta_0 = 0.01$ y dos valores distintos de tolerancia, $\tau = 5 \times 10^{-4}$ y $\tau = 10^{-4}$ con $\mathcal{E}^{(n)} = \left| \hat{U}_k^{(n)} - \bar{U}_k^{(n)} \right|$ evaluada en el punto medio, es decir, para $x_k = \pi/2$.

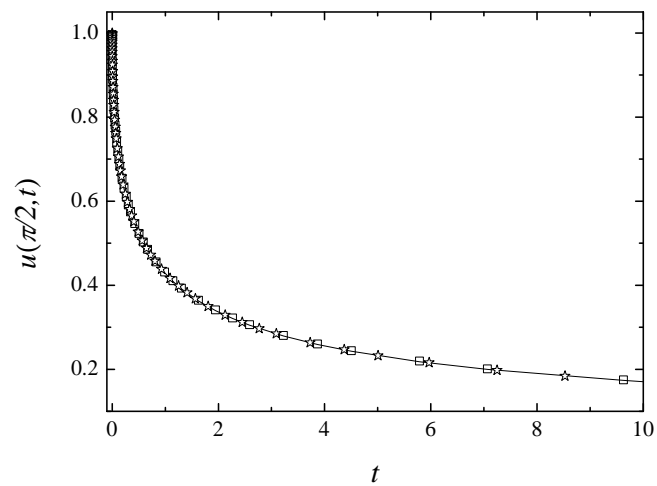


Figura 3.7: Soluciones en el punto medio $x = \pi/2$ para el problema (3.69) cuando $\gamma = 1/2$. Línea continua: solución exacta $E_{0.5}(-t^{0.5})$; cuadrados: solución adaptativa EE correspondiente a $\Delta_0 = 0.01$, $numpasos = 45$, ($t_{45} = 9.6268$), $\tau = 5 \times 10^{-4}$; estrellas: solución adaptativa EE correspondiente a $\Delta_0 = 0.01$, $numpasos = 112$, ($t_{112} = 9.1690$), $\tau = 10^{-4}$. En todos los casos, $\Delta x = \pi/40$

Las diferencias entre la solución exacta y sus estimaciones numéricas se muestran en la Fig. 3.8. Se observa que los resultados proporcionados por el método adaptativo son bastante buenos, mejorando a medida que la tolerancia disminuye. Se debe resaltar el hecho de que la integración numérica es capaz de abarcar un largo intervalo de tiempo con un número relativamente pequeño de pasos a la par que mantiene la precisión del método en el entorno de 10^{-3} (o incluso menor, cuando empleamos $\tau = 10^{-4}$). En la gráfica también se muestra el error del algoritmo cuando el tamaño de los pasos temporales es fijo. En este caso, los errores de la integración numérica para tiempos cortos son más grandes que los que se encuentran cuando se aplica el procedimiento adaptativo, si bien estos errores decrecen rápido y relativamente pronto llegan a ser más pequeños que los correspondientes al método adaptativo. Esto es, el algoritmo con pasos temporales fijos conduce a errores bastante dispares: si se quiere mantener los errores razonablemente pequeños para ciertos valores de tiempo, hay que asumir una precisión excesiva (y en algunos casos, irrelevante) para otros rangos temporales. Además, cabe destacar que el número de pasos requeridos por el método con paso uniforme es mucho mayor que el número de pasos requerido por el método adaptativo. Esto implica el uso de unas cantidades de memoria del ordenador y unos tiempos de computación mucho mayores. Por ejemplo, el tiempo de CPU necesario para obtener los resultados numéricos que se muestran para $\Delta t = 10^{-3}$ en la Fig. 3.8 está muy por encima de 10^4 segundos, frente a los 48.75 segundos requeridos para obtener la solución mediante el método adaptativo con $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$. Para realizar los cálculos numéricos se ha utilizado un ordenador modelo Compaq 610 con sistema operativo Windows XP Professional (5.1, Build 2600), procesador Intel Core2 Duo T5870 @ 2 GHz y 3064 MB de memoria RAM. Todos los tiempos de CPU que aparecen en esta memoria se refieren a los tiempos de CPU empleados por este ordenador. Los algoritmos se han codificado en *Mathematica*, versión 9 (véase el apéndice A).

En la Fig. 3.9 hemos representado la solución $u(x, t)$ frente a x para diferentes valores de t . Las soluciones numéricas correspondientes al método adaptativo para $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$ se representan mediante símbolos discretos, mientras que la solución teórica se representa con líneas continuas. Es obvio que ambas soluciones presentan un acuerdo excelente para los distintos valores de tiempo que se han considerado.

A la hora de analizar la bondad del método EE desarrollado, tan importante es el estudio del tamaño de los errores que el método proporciona como el chequeo de su velocidad (esto es, su capacidad de integrar la ecuación

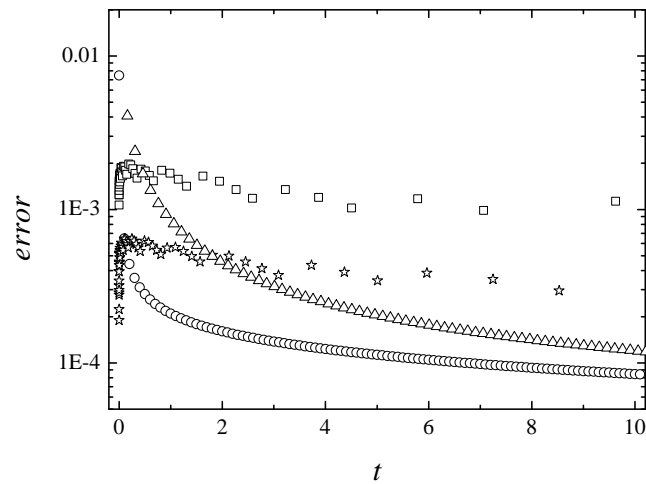


Figura 3.8: Representación logarítmica de los errores numéricos en el punto medio del problema (3.69), $|u(\pi/2, t_n) - U_k^{(n)}|$, para: (i) el método adaptativo con $\tau = 5 \times 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$, (cuadrados, $numpasos = 45$, tiempo de CPU $\approx 8.9s$); (ii) el método adaptativo con $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$, (estrellas, $numpasos = 112$, tiempo de CPU $\approx 48.75s$); (iii) el método de pasos temporales e iguales a $\Delta t = 0.01$, (triángulos, $numpasos = 1010$, tiempo de CPU $\approx 440s$); y (iv) el método de pasos temporales constantes e iguales a $\Delta t = 0.001$, (círculos, $numpasos = 10100$, tiempo de CPU $\approx 43800s$). Se ha usado $\Delta x = \pi/40$ y $\gamma = 1/2$ en todos los casos.

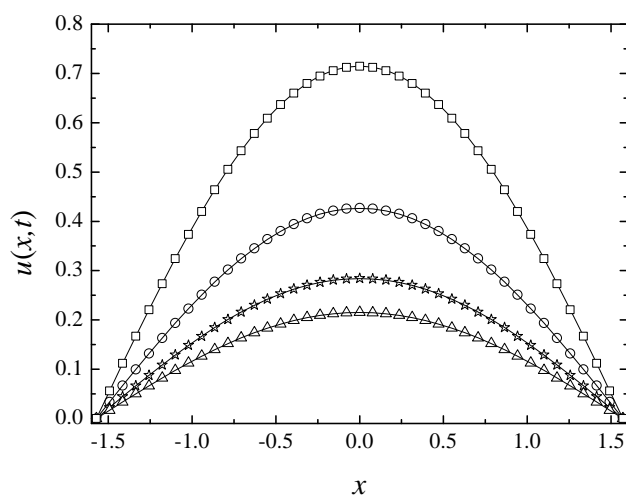


Figura 3.9: Solución $u(x, t)$ para el problema (3.69) con $\gamma = 1/2$. Cuadrados: solución adaptativa EE para $numpasos = 27$ que corresponde a $t_{27} = 0.109$; círculos: solución adaptativa EE para $numpasos = 82$ que corresponde a $t_{82} = 1.009$; estrellas: solución adaptativa EE para $numpasos = 99$ que corresponde a $t_{99} = 3.089$; triángulos: solución adaptativa EE para $numpasos = 107$ que corresponde a $t_{107} = 5.969$. Las líneas continuas corresponden a las soluciones teóricas en los tiempos dados. Hemos utilizado $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$ para la solución adaptativa. En todos los casos $\Delta x = \pi/40$.

t	0.12	1.29	2.58	3.22	8.34	502.4
T_{CPU} (FT)	0.2	8	33	49	346	$\gtrsim 2$ semanas
T_{CPU} (E&E)	17	26	29	29	32	43

Cuadro 3.1: Tiempos de CPU (en *segundos*) para varios t que son empleados a la hora de obtener la solución al problema (3.69) con $\gamma = 1/4$ para: (i) el método de pasos temporales fijos (FT) con $\Delta t = 0.01$, y (ii) el método EE con tolerancia $\tau = 10^{-4}$. En ambos métodos tomamos $\Delta x = \pi/40$. El tiempo de CPU requerido para la solución mediante el método de pasos temporales fijos en el caso de $t = 502.4$ es una estimación obtenida por extrapolación (véase la Fig. 3.10).

sobre un largo intervalo de tiempo empleando pequeños tiempos de CPU) cuando aplicamos el método al problema (3.69). A menos que se indique explícitamente lo contrario, los tiempos de CPU que aparecen en las gráficas no vienen dados en segundos sino en unidades de \mathcal{T}_{50} , que es el tiempo de CPU empleado por el método de paso temporal fijo para obtener la solución del problema cuando consideramos un tiempo igual a 50 pasos temporales (en nuestro ordenador $\mathcal{T}_{50} \approx 1.4$ segundos). De esta manera, es de esperar que los valores para los tiempos de CPU (así normalizados) que se recogen en esta memoria sean básicamente independientes del sistema operativo y del tipo de ordenador utilizados. El tiempo de CPU normalizado que se necesita para evaluar la solución numérica de un problema dado en un tiempo t viene denotado en el texto como $T_{\text{CPU}}(t)$ y en las gráficas como *Tiempo de CPU*.

En la Fig. 3.10, se comparan $T_{\text{CPU}}(t)$ para $\gamma = 1/4$ correspondientes al método EE con tolerancia $\tau = 10^{-4}$ con los valores de $T_{\text{CPU}}(t)$ para el método estándar (no adaptativo) de pasos temporales fijos con tamaño $\Delta t = 0.01$. En primer lugar se observa que, como cabía esperar, el tiempo de CPU requerido por el método estándar crece cuadráticamente: $T_{\text{CPU}} \propto t^2$. Sin embargo, para el método EE se encuentra que $T_{\text{CPU}} \propto t^\beta$ con $\beta \approx 0.2$. Es decir, el crecimiento del tiempo de computación con el tiempo de integración del problema no es cuadrático, ni tan siquiera lineal, sino ¡sublineal!, de hecho el crecimiento se hace más lento para tiempos grandes ($\beta \approx 0.1$). Esto significa que, excepto para tiempos pequeños, el método adaptativo es inmensamente más rápido que el método estándar con pasos temporales fijos. En la tabla 3.1 ofrecemos algunos valores específicos de $T_{\text{CPU}}(t)$ expresados en segundos. Es evidente que el método estándar no resulta operativo para tiempos t por encima de unas pocas decenas cuando $\Delta t = 0.01$ o, equivalentemente, cuando el número de pasos temporales sube de unos pocos miles.

Los tiempos de CPU para el método EE dados en la Fig. 3.10 y en la tabla

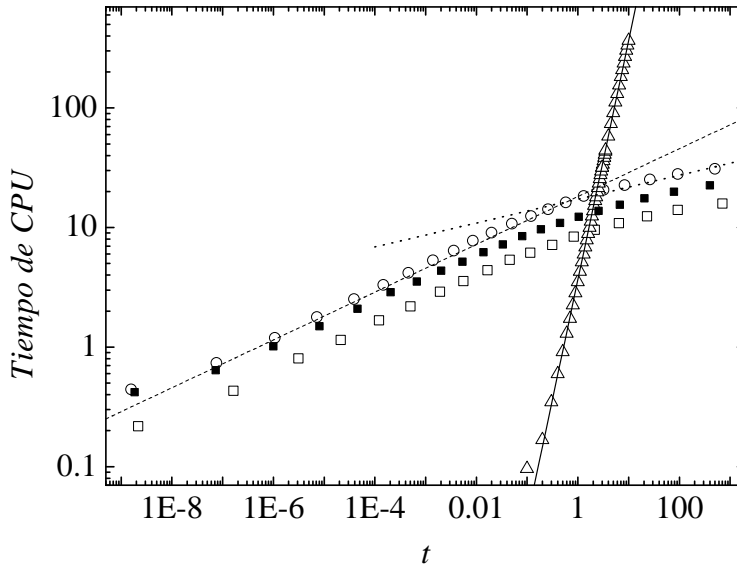


Figura 3.10: Tiempos de CPU normalizados, $T_{CPU}(t)$, en función de t requeridos por el método de paso fijo $\Delta t = 0.01$ (triángulos), por el método EE (círculos), y por el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1$ (cuadrados blancos) y $\omega = 1/2$ (cuadrados negros), para resolver el problema (3.69) cuando $\gamma = 1/4$. Para todos los casos $\Delta x = \pi/40$, $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$. Las líneas sirven para guiar al ojo; sus pendientes (0.2 para la línea discontinua rayada, 0.1 para la línea discontinua punteada, 2 para la línea continua) proporcionan estimaciones del valor del exponente β en $T_{CPU}(t) \sim t^\beta$.

3.1 corresponden a una tolerancia $\tau = 10^{-4}$. En la Fig. 3.11, se muestran los tiempos de CPU, $T_{CPU}(t)$, para varios valores de τ . Como era de esperar, la velocidad del método crece cuando la tolerancia disminuye (desde luego, el precio a pagar es que el método resulta menos preciso como se verá más adelante). Es interesante hacer notar que en la Fig. 3.11 se muestra que el tiempo de CPU es, de hecho, aproximadamente proporcional a $\tau^{-\eta}$ con η en el entorno de 1. Por ejemplo, cuando τ pasa de $\tau = 10^{-3}$ a $\tau = 10^{-4}$, se puede ver que el tiempo de CPU se incrementa en un factor 10. Un comportamiento muy parecido se observa para otros valores de γ . Esto puede explicarse mediante el siguiente argumento sencillo. Por construcción, $\tau \approx \mathcal{E}^{(n)}$, pero, como se verá cuando se analice el método predictivo, $\mathcal{E}^{(n)} \sim \Delta_n^\theta$ donde $\theta \approx 3/2$. Por lo tanto, $\Delta_n \sim \tau^{1/\theta}$. Para un valor de tiempo dado, t , $T_{CPU}(t) \sim n^2 \sim (t/\Delta t)^2$ donde Δt representa el valor promedio de los pasos temporales habidos hasta el tiempo t . Pero si el tamaño de los pasos temporales escala aproximadamente como $\tau^{1/\theta}$, entonces cabe esperar que su promedio debería escalar de forma similar, esto es, $\Delta t \sim \tau^{1/\theta}$. De esta manera $T_{CPU}(t) \sim \tau^{-\eta}$

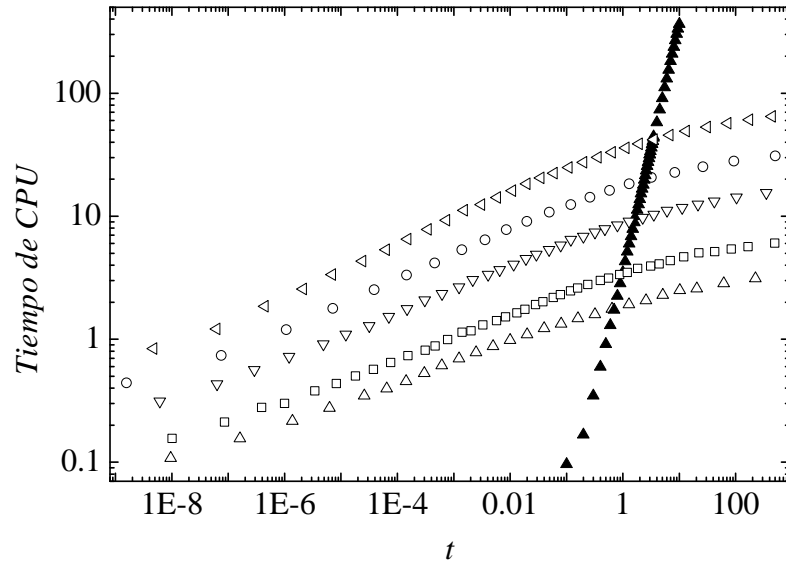


Figura 3.11: Tiempos de CPU normalizados, T_{CPU} , frente a t para el método con pasos temporales fijos para $\Delta t = 0.01$ (triángulos negros) y para el método EE con tolerancias 10^{-5} (triángulos hacia la izquierda), 5×10^{-5} (círculos), 10^{-4} (triángulos hacia abajo), 2×10^{-4} (cuadrados), 10^{-3} (triángulos hacia arriba). En todos los casos $\gamma = 1/4$, $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

con $\eta = 2/\theta$. Para $\theta \approx 3/2$ se tiene que $\eta \approx 1.3$, que es un valor cercano a 1.

La Fig. 3.12 muestra como el tiempo de CPU, $T_{\text{CPU}}(t)$, depende del parámetro fraccionario γ . Se observa que, aproximadamente, $T_{\text{CPU}}(t) \sim t^\beta$ y que β crece cuando γ crece ($\beta \rightarrow 2$ cuando $\gamma \rightarrow 1^-$). Sin embargo, el valor $\gamma = 1$ es singular: hay un cambio drástico en los tiempos de CPU entre $\gamma \rightarrow 1^-$ y $\gamma = 1$. La razón de este hecho es clara: para $\gamma = 1$ el operador fraccionario ${}_0^C D_t^\gamma$ de la ecuación subdifusiva fraccionaria se transforma en un mero operador diferencial (esto es, un operador local, no ya un operador integro-diferencial), y de esta manera ya no es necesario calcular la suma del miembro izquierdo de la ecuación (3.23), que es lo que hace que los métodos en diferencias finitas sean tan (crecientemente) lentos para el caso fraccionario. Por esta razón, los tiempos de CPU requeridos para el problema de difusión normal ($\gamma = 1$) son mucho menores que los tiempos necesarios para resolver los problemas con subdifusión ($\gamma < 1$). Se debe hacer notar que para $\gamma < 1$, sin importar lo cercano que esté γ a la unidad, es preciso gastar mucho tiempo de computación en evaluar esta suma aun cuando se sepa que cuanto más cerca de la unidad esté γ más se acerca a cero el valor de la suma.

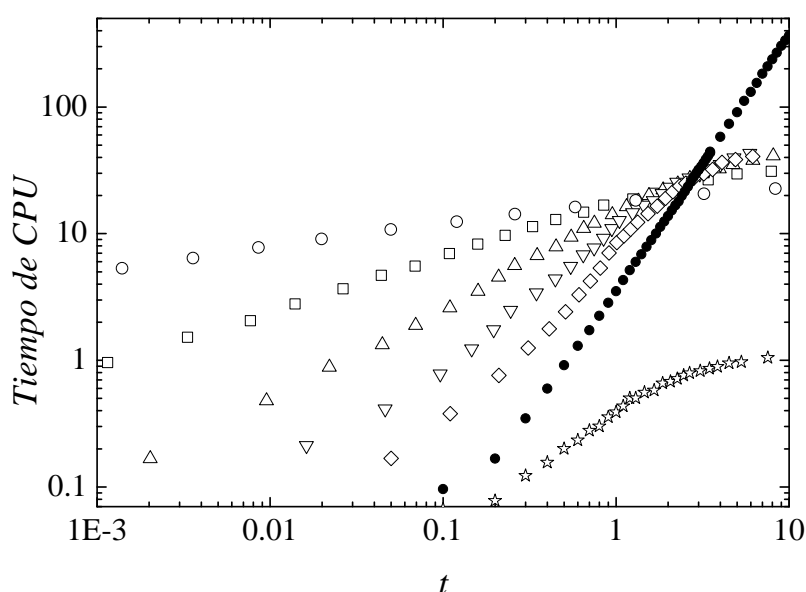


Figura 3.12: Tiempo de CPU normalizado, T_{CPU} , frente a t cuando el problema (3.69) se resuelve mediante el método EE con $\tau = 10^{-4}$ para $\gamma = 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.99, 1$ (círculos blancos, cuadrados, triángulos hacia arriba, triángulos hacia abajo, diamantes, estrellas, respectivamente) y para el método con pasos temporales fijos con $\Delta t = 0.01$ (círculos negros). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

En relación con el error, en la Fig. 3.13 se observa que el algoritmo adaptativo EE proporciona errores bastante homogéneos, es decir, que esta técnica tiene la muy conveniente propiedad de mantener los errores dentro de un grado de precisión deseable, ni demasiado grande ni demasiado pequeño. Esto evidencia el contraste con los errores bastante poco homogéneos que proporciona el método estándar con pasos temporales fijos. De una manera un tanto esquemática, se puede decir que pasos temporales no uniformes conducen a errores uniformes mientras que pasos temporales uniformes conducen a errores no uniformes. Finalmente, en la Fig. 3.13 se puede observar que los errores están próximos al valor de la tolerancia, en particular, que son del mismo orden de magnitud (aproximadamente tres veces la tolerancia en este caso). Este ejemplo ilustra el hecho de que el algoritmo adaptativo EE tiene la interesante propiedad de que la tolerancia, una cantidad que uno puede fijar a voluntad, resulta ser un *indicador* conveniente de la precisión del método.

Merece la pena explorar este asunto desde una perspectiva teórica. El procedimiento seguido es, de alguna manera, paralelo al utilizado para ecuaciones diferenciales ordinarias [126, 127] aunque más complicado. Zhang et

al. [123] han demostrado que el error numérico en el punto (x_j, t_n) , $E_j^{(n)} = |u(x_j, t_n) - U_j^{(n)}|$, está acotado por la suma de un término proveniente de la discretización temporal de la derivada fraccionaria, $E_{t,j}^{(n)}$, y un término proveniente de la discretización espacial del Laplaciano, $E_{x,j}^{(n)}$, es decir:

$$E_j^{(n)} \leq E_{t,j}^{(n)} + E_{x,j}^{(n)}. \quad (3.71)$$

En nuestro caso, el Laplaciano se ha discretizado por medio de la fórmula en diferencias central con tres puntos de modo que $E_{x,j}^{(n)} = C_{x,j}^{(n)} \Delta_x^2$, donde $C_{x,j}^{(n)}$ es un coeficiente que depende de la solución $u(x, t)$ en (x_j, t_n) . La obtención de la cota temporal es menos simple [123]

$$E_{t,j}^{(n)} = C_j^{(n)} \max_{1 \leq k \leq n} r^{(k)} = O \left(\max_{1 \leq k \leq n} r^{(k)} \right) \quad (3.72)$$

donde

$$r^{(k)} = \left(\frac{\Delta_k^2}{2(1-\gamma)} + \frac{\Delta_{\text{máx},k}^2}{8} \right) \Delta_k^{-\gamma} \quad (3.73)$$

$$\Delta_{\text{máx},k} = \max_{1 \leq m \leq k} \Delta_m, \quad (3.74)$$

y $C_j^{(n)}$ es un coeficiente proporcional a $t_n^{\gamma/2}$ que depende de γ y del máximo valor de $|\partial^2 u / \partial t^2|$ en x_j considerado el intervalo temporal $[t_0, t_n]$. De aquí en adelante, se asume que $E_{t,j}^{(n)} + E_{x,j}^{(n)}$ proporciona una estimación del error, esto es, $E_j^{(n)} \approx E_{t,j}^{(n)} + E_{x,j}^{(n)}$. También se asume que $E_{x,j}^{(n)}$ es menor que la tolerancia τ (pues de otro modo el método adaptativo no podría funcionar puesto que ninguna malla temporal puede hacer que el error sea menor que τ). Seguidamente, se define $\hat{E}_{t,j}^{(n)}$ como el error numérico cuando la solución en t_n se computa a partir de la solución en el instante t_{n-1} mediante el empleo de dos pasos temporales de tamaño $\Delta_n/2$, es decir, $E_{t,j}^{(n)}$ es el error cuando la discretización temporal es $\{t_0, t_1, \dots, t_{n-1}, t_n\}$, mientras que $\hat{E}_{t,j}^{(n)}$, es el error, $\hat{E}_{t,j}^{(n)} = |u(x_j, t_n) - \hat{U}_j^{(n)}|$, cuando la discretización temporal es $\{t_0, t_1, \dots, t_{n-1}, t_{n-1/2}, t_n\}$ con $t_{n-1/2} = (t_{n-1} + t_n)/2$. A partir de las ecuaciones (3.72)-(3.74), es fácil ver que

$$E_{t,j}^{(1)} = O \left(\frac{\Delta_1^{2-\gamma}}{2(1-\gamma)} \right) \quad (3.75)$$

mientras que

$$\hat{E}_{t,j}^{(1)} = O \left(\frac{(\Delta_1/2)^{2-\gamma}}{2(1-\gamma)} + \frac{(\Delta_1/2)^{2-\gamma}}{8} \right). \quad (3.76)$$

La diferencia entre estas dos cantidades, $\hat{E}_{t,j}^{(1)} - E_{t,j}^{(1)}$, es del mismo orden que $E_{t,j}^{(1)}$, lo cual quiere decir que $E_{t,j}^{(1)}$ y $\mathcal{E}_j^{(1)} = |\hat{U}_j^{(1)} - U_j^{(1)}|$ son también del mismo orden.

En los métodos adaptativos que se desarrollan en la presente tesis el tamaño del paso temporal Δ_1 se elige de manera que $\mathcal{E}^{(1)} = \max_{\forall j} \mathcal{E}_j^{(1)} = \mathcal{E}_{j^*}^{(1)}$ sea del orden de la tolerancia, $\mathcal{E}^{(1)} \approx \tau$, donde j^* denota el índice (posición) para la cual $\mathcal{E}_j^{(n)}$ es máximo. Llegados a este punto se procede mediante inducción. Para ello se asume que se han evaluado las soluciones numéricas hasta el instante t_{n-1} de manera tal que $\mathcal{E}^{(m)} \approx \tau$ para $m = 1, \dots, n-1$, siendo j^* el índice para el cual $\mathcal{E}_{j^*}^{(n-1)} \approx \tau$. En este caso, de la ecuación (3.72) se deduce que

$$E_{t,j^*}^{(n)} = C_{j^*}^{(n)} \max\{E_{t,j^*}^{(n-1)}/C_{j^*}^{(n-1)}, r^{(n)}\} \quad (3.77)$$

o, equivalentemente,

$$E_{t,j^*}^{(n)} = \max\{\tau, C_{j^*}^{(n)} \left(\frac{\Delta_n^2}{2(1-\gamma)} + \frac{\Delta_{\max,n}^2}{8} \right) \Delta_n^{-\gamma}\} \quad (3.78)$$

si se asume que $C_{j^*}^{(n)}/C_{j^*}^{(n-1)} \approx 1$. De modo similar,

$$\hat{E}_{t,j^*}^{(n)} = \max\{\tau, C_{j^*}^{(n)} \left(\frac{\Delta_n^2}{2(1-\gamma)} + \frac{\Delta_{\max,n}^2}{8} \right) (\Delta_n/2)^{-\gamma}\}. \quad (3.79)$$

La diferencia entre estas dos cantidades, $\hat{E}_{t,j^*}^{(n)} - E_{t,j^*}^{(n)}$, es del mismo orden que $E_{t,j^*}^{(n)}$, lo cual quiere decir que $E_{t,j^*}^{(n)}$ y $\mathcal{E}_{j^*}^{(n)} = |\hat{U}_{j^*}^{(n)} - U_{j^*}^{(n)}|$ son también del mismo orden. Entonces se elige Δ_n de modo que $\mathcal{E}_{j^*}^{(n)}$ sea del orden de la tolerancia. Debe señalarse que en el razonamiento previo se ha asumido implícitamente que j^* para el paso temporal $n-1$, j_{n-1}^* , es el mismo que para el paso temporal n , j_n^* . Desde luego, aunque el valor de j^* puede cambiar (típicamente $j_n^* = j_{n-1}^*$ y a veces $j_n^* = j_{n-1}^* \pm 1$) cabe esperar que $\mathcal{E}_{j_{n-1}^*}^{(n)} \approx \mathcal{E}_{j_n^*}^{(n)} \approx \tau$ siempre y cuando $u(x_{j_{n-1}^*}, t_n)$ sea similar a $u(x_{j_n^*}, t_n)$.

En la siguiente sección se va a presentar otro método de tipo adaptativo, que se ha denominado método predictivo, tan preciso como el EE pero un poco más rápido. En la Sec. 6 del Apéndice se proporciona el código *Mathematica* para ambos algoritmos adaptativos (EE y Predictivo).

3.1.4. Método Predictivo

El método adaptativo predictivo está basado en la técnica de los dos pasos con duplicación. El punto de partida es la suposición de que la diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$

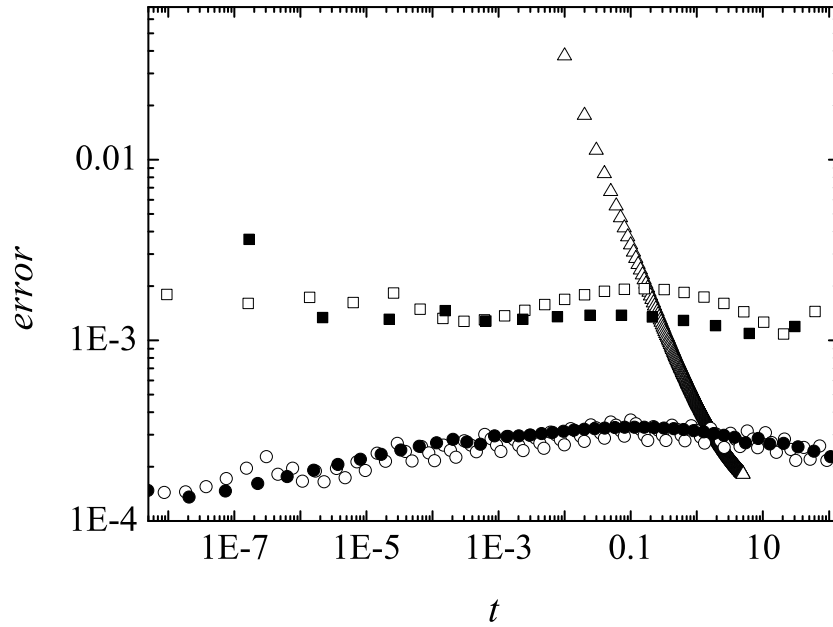


Figura 3.13: Máximo error numérico absoluto frente al tiempo cuando el problema (3.69) para $\gamma = 1/4$ se resuelve por medio del método de pasos temporales fijos con $\Delta t = 0.01$ (triángulos), el método EE con tolerancias $\tau = 10^{-4}$ (círculos blancos) y $\tau = 10^{-3}$ (cuadrados blancos), y el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$, y tolerancias $\tau = 10^{-4}$ (círculos negros) y $\tau = 10^{-3}$ (cuadrados negros). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

escala como una potencia del tamaño de los pasos temporales

$$\mathcal{E}^{(n)} \sim \Delta_n^\theta. \quad (3.80)$$

A partir de esta relación, y considerando un valor de la diferencia $\mathcal{E}_{\text{previo}}^{(n)}$ para un paso temporal dado Δ_n^{previo} , es fácil predecir el tamaño del paso temporal Δ_n^{pred} que lleve a un error igual a la tolerancia, $\mathcal{E}_{\text{pred}}^{(n)} = \tau$, es decir,

$$\Delta_n^{\text{pred}} = \Delta_n^{\text{previo}} \left[\frac{\tau}{\mathcal{E}_{\text{previo}}^{(n)}} \right]^{1/\theta}. \quad (3.81)$$

Lo que cabe esperar es que la utilización directa de este paso temporal suponga la liberación de gastar tiempo de cómputo intentando encontrar el paso correcto (el que conduce a una diferencia $\mathcal{E}^{(n)}$ del orden de la tolerancia) mediante una sucesión ciega de ensayos y errores para el tamaño del paso, como hace el método que se ha denominado EE. Esto conduce a proponer

el siguiente algoritmo predictivo basado en la técnica de los dos pasos con duplicación

1. Si, para el valor inicial de Δ_n , la diferencia satisface

$$\tau/2 \leq \mathcal{E}_n \leq 2\tau, \quad (3.82)$$

entonces aceptamos este paso temporal.

2. En caso contrario, utilizamos un nuevo paso temporal dado por la fórmula

$$\Delta_n^{\text{nuevo}} = \omega \Delta_n^{\text{previo}} \left[\frac{\tau}{\mathcal{E}_{\text{previo}}^{(n)}} \right]^{1/\theta} + (1 - \omega) \Delta_n^{\text{previo}} \quad (3.83)$$

hasta que la correspondiente diferencia $\mathcal{E}_{\text{nuevo}}^{(n)}$ satisfaga la condición (3.82).

El valor del que se parte para obtener Δ_n es justo Δ_{n-1} , y se toma $\Delta_0 = 0.01$ en todos los casos. Como ya se ha comentado en la sección anterior dedicada al método EE, el valor inicial concreto elegido para Δ_0 carece de relevancia ya que el algoritmo predictivo arriba indicado, al igual que hace el algoritmo EE, encuentra muy rápido el valor correcto para Δ_0 . El parámetro $0 < \omega \leq 1$ es un parámetro de relajación [122, 126] que afecta a la velocidad y robustez del algoritmo. Se ha hallado que el parámetro $\omega = 1$ (meramente predictivo) normalmente conduce al algoritmo adaptativo más rápido (véase la Fig. 3.10). Sin embargo, en ciertos casos, el método puramente predictivo ($\omega = 1$) falla porque la elección de pasos temporales entra en un bucle infinito $\Delta_n^a \rightarrow \Delta_n^b \rightarrow \Delta_n^a \dots$ debido al hecho de que sus correspondientes diferencias $\mathcal{E}^{(n)}$ nunca cumplen la condición (de salida) (3.82). En aquellos casos en los que esto ocurre, hemos constatado que el uso de un valor de relajación ($0 < \omega < 1$) resuelve el problema. En particular, hemos encontrado que para el valor $\omega = 1/2$ nunca se da este problema, razón por la que elegimos este valor de ω para elaborar las figuras, como es el caso de la Fig. 3.10 y las Figs. 3.16- 3.20.

El método predictivo se fundamenta en la ecuación (3.80) de modo que es pertinente chequear la validez de esta ley de escalamiento de tipo potencial. En la Fig. 3.14 se muestran los valores de θ obtenidos al ajustar $\mathcal{E}^{(n)}$ a la ley prescrita por la ecuación (3.80) para varios valores de γ , número de pasos temporales n , y valores de Δ_n . De manera específica, se ha estudiado como escala $\mathcal{E}^{(n)}$ con el tamaño del último paso Δ_n , utilizando para Δ_n los valores $m \cdot \Delta_{n-1}$ y también $m \cdot \Delta_{n-1}/3$ con $m = 1, 2, \dots, 10$, siendo Δ_{n-1} el

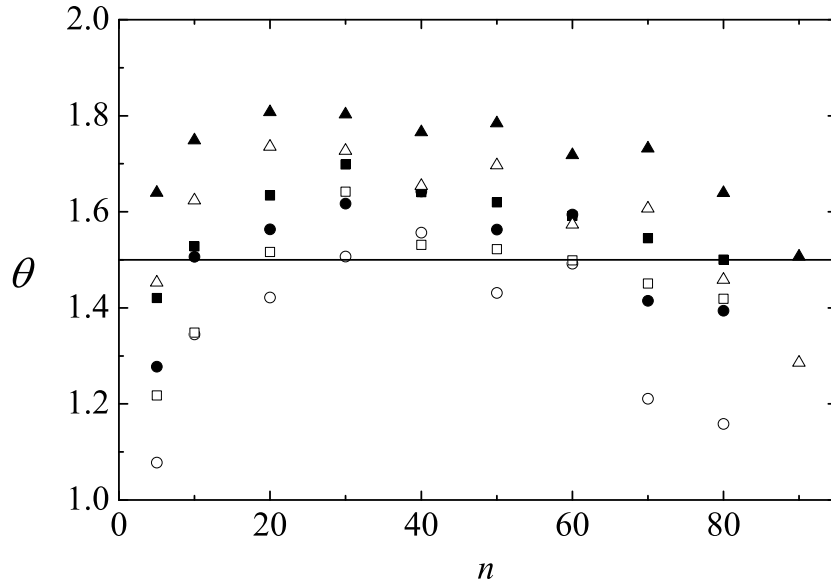


Figura 3.14: Exponente de escalamiento θ del método predictivo vs. el número de pasos temporales cuando el problema (3.69) se resuelve para varios valores de γ (círculos: $\gamma = 0.25$, cuadrados: $\gamma = 0.5$, triángulos: $\gamma = 0.75$) y $\Delta_n = m \cdot \Delta_{n-1}$ (símbolos blancos) y $\Delta_n = m \cdot \Delta_{n-1}/3$ (símbolos negros) con $m = 1, 2, \dots, 10$. La línea marca el valor $\theta = 3/2$. En todos los casos $\Delta x = \pi/80$, $\omega = 1$ y $\Delta_0 = 0.01$.

tamaño del paso temporal previo. Lo que ha llevado a la elección de estas razones, $\Delta_n/\Delta_{n-1} = m, m/3$, es que son del orden de los valores típicos que se encuentran en los experimentos numéricos (de hecho, estos valores son usualmente $1/2$, 1 o 2). El exponente θ está siempre entre uno y dos, lo cual es digno de ser destacado teniendo en cuenta que el tamaño de Δ_n abarca varios órdenes de magnitud, desde el entorno de 10^{-8} hasta 10^2 . Como un valor simple y efectivo en todos los casos, se opta por usar $\theta = 3/2$ en los cálculos. Desde luego, esta elección sería cuestionable si el método fuera muy sensible al valor específico de θ , pero este no es el caso. En relación al tiempo de computación, en la Fig. 3.15 se puede ver que el valor específico de θ es poco relevante. No obstante, en este ejemplo se halla que el método predictivo es más rápido (aproximadamente tres veces más rápido) que el método EE. En cuanto a la naturaleza de los errores, en la Fig. 3.13 se puede ver que su comportamiento es bastante similar al que muestran los errores del método EE. Para ambos métodos los errores están convenientemente próximos al valor de la tolerancia prefijado.

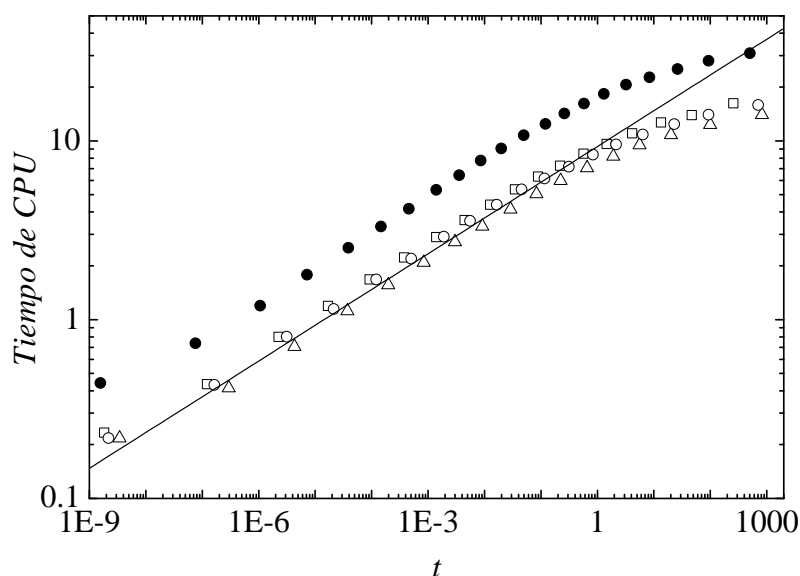


Figura 3.15: Tiempo de computación normalizado, T_{CPU} , frente a t para el problema (3.69) con $\gamma = 1/4$ cuando se resuelve por medio del método EE (círculos negros) y por medio del método predictivo $\theta = 3/2$ (cuadrados), $\theta = 5/4$ (triángulos hacia arriba), y $\theta = 5/3$ (círculos). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$, $\omega = 1$, $\Delta_0 = 0.01$ y $\tau = 10^{-4}$. La línea, de pendiente 0.2, se ha trazado como ayuda visual.

3.1.4.1. Estudio numérico

Siguiendo el mismo procedimiento que se emplea en el caso del método adaptativo EE, se presentan una serie de resultados para el caso $\gamma = 1/2$. Se comienza por calcular la solución numérica empleando el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$. En la Fig. 3.16 los valores exactos de $u(\pi/2, t)$ se comparan con sus correspondientes estimaciones numéricas. Se ha usado $\Delta_0 = 0.01$ y dos valores distintos de tolerancia, $\tau = 5 \times 10^{-4}$ y $\tau = 10^{-4}$ con $\mathcal{E}^{(n)} = \left| \hat{U}_k^{(n)} - \bar{U}_k^{(n)} \right|$ evaluada en el punto medio, es decir, para $x_k = \pi/2$.

Las diferencias entre la solución exacta y sus estimaciones numéricas se muestran en la Fig. 3.17. Se observa que los resultados proporcionados por el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ son bastante buenos, mejorando a medida que la tolerancia disminuye, igual que ocurría en el caso del método EE. Se debe hacer notar que la integración numérica es capaz de abarcar un largo intervalo de tiempo con un número relativamente pequeño de pasos a la par que mantiene la precisión del método en el entorno de 10^{-3} (o incluso menor, cuando empleamos $\tau = 10^{-4}$). En la gráfica también se muestra el

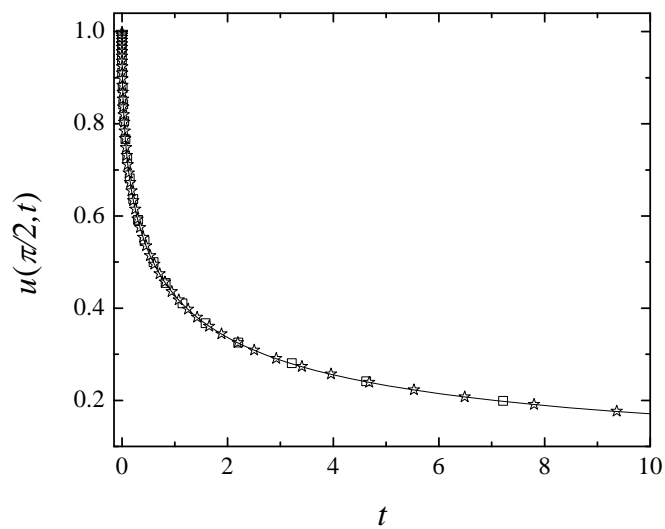


Figura 3.16: Soluciones en el punto medio $x = \pi/2$ del problema (3.69) cuando $\gamma = 1/2$. Línea continua: solución exacta $E_{0.5}(-t^{0.5})$; cuadrados: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ correspondiente a $\Delta_0 = 0.01$, $numpasos = 44$, ($t_{44} = 9.2054$), $\tau = 5 \times 10^{-4}$; estrellas: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ correspondiente a $\Delta_0 = 0.01$, $numpasos = 105$, ($t_{105} = 9.3658$), $\tau = 10^{-4}$. En todos los casos $\Delta x = \pi/40$

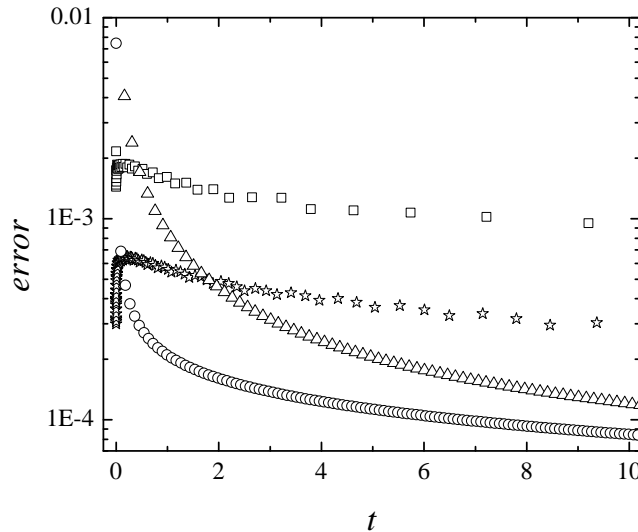


Figura 3.17: Representación logarítmica de los errores numéricos del problema (3.69) en el punto medio, $|u(\pi/2, t_n) - U_k^{(n)}|$, para: (i) el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ con $\tau = 5 \times 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$, (cuadrados, $numpasos = 44$, tiempo de CPU $\approx 6s$); (ii) el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ con $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$, (estrellas, $numpasos = 105$, tiempo de CPU $\approx 30s$); (iii) el método de pasos temporales e iguales a $\Delta t = 0.01$, (triángulos, $numpasos = 1010$, tiempo de CPU $\approx 440s$); y (iv) el método de pasos temporales constantes e iguales a $\Delta t = 0.001$, (círculos, $numpasos = 10100$, tiempo de CPU $\approx 43800s$). Se ha usado $\Delta x = \pi/40$ y $\gamma = 1/2$ en todos los casos.

error del algoritmo cuando el tamaño de los pasos temporales es fijo. En este caso, los errores de la integración numérica para tiempos cortos son más grandes que los que se encuentran cuando se aplica el procedimiento predictivo, si bien estos errores decrecen rápido y relativamente pronto llegan a ser más pequeños que los correspondientes al método predictivo. Dicho de otra manera, el algoritmo con pasos temporales fijos conduce a errores bastante dispares (como ya se ha comentado en la Sec. 3.1.3.1). También se ha encontrado que el método predictivo con $\omega = 1/2$ es más veloz que el método adaptativo EE.

En la Fig. 3.18 se ha representado la solución $u(x, t)$ del problema (3.69) para diferentes valores de t . Las soluciones numéricas correspondientes al método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ para $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$ se representan con símbolos discretos, mientras que la solución teórica se representa

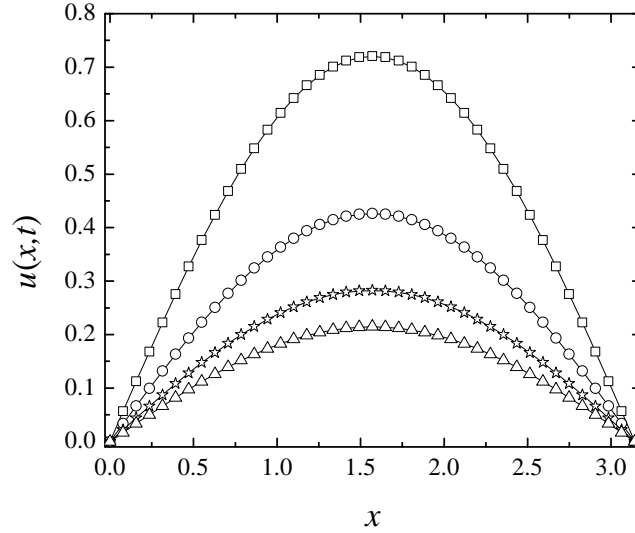


Figura 3.18: Solución $u(x, t)$ para el problema (3.69) con $\gamma = 1/2$. Cuadrados: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ para $numpasos = 46$ que corresponde a $t_{46} = 0.1032$; círculos: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ para $numpasos = 76$ que corresponde a $t_{76} = 1.0119$; estrellas: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ para $numpasos = 92$ que corresponde a $t_{92} = 3.1344$; triángulos: solución adaptativa predictiva $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ para $numpasos = 100$ que corresponde a $t_{100} = 6.0098$. Las líneas continuas corresponden a las soluciones teóricas, $E_{0.5}(-t^{0.5})$. Se ha utilizado $\tau = 10^{-4}$ y $\Delta_0 = 0.01$ para la solución adaptativa. En todos los casos $\Delta x = \pi/40$.

con líneas continuas. Es evidente que ambas soluciones presentan un acuerdo excelente para los distintos valores de tiempo final, t , que se han considerado, en línea con lo ya visto en el caso del método adaptativo EE.

Al igual que ya se vio en el caso del método adaptativo EE, para analizar la bondad del método predictivo desarrollado, tan importante es el estudio del tamaño de los errores que el método proporciona como el chequeo de su velocidad (esto es, su capacidad de integrar la ecuación sobre un largo intervalo de tiempo empleando pequeños tiempos de CPU) cuando se aplica el método a la resolución del problema (3.69). Las Figs. 3.19 y 3.20 dan cuenta de los resultados de ese estudio de la velocidad de integración. Como ya indicamos para el algoritmo EE, los tiempos de CPU que aparecen en las gráficas 3.19 y 3.20 no vienen dados en segundos sino en unidades de \mathcal{T}_{50} ,

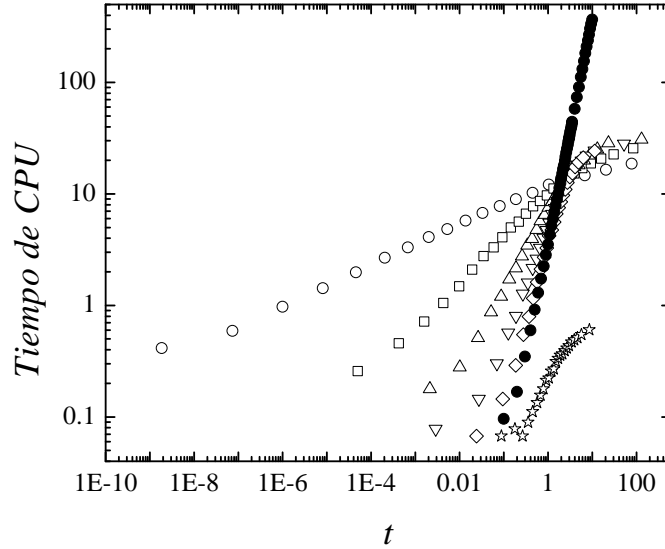


Figura 3.19: Tiempo de CPU normalizado, T_{CPU} , frente a t cuando el problema (3.69) se resuelve mediante el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ con $\tau = 10^{-4}$ para $\gamma = 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.99, 1$ (círculos blancos, cuadrados, triángulos hacia arriba, triángulos hacia abajo, diamantes, estrellas, respectivamente) y para el método con pasos temporales fijos con $\Delta t = 0.01$ (círculos negros). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

que es el tiempo de CPU empleado por el método de paso temporal fijo para obtener la solución del problema cuando se considera un tiempo igual a 50 pasos temporales (en nuestro ordenador $\mathcal{T}_{50} \approx 1.4$ segundos).

La Fig. 3.19 muestra como el tiempo de CPU, $T_{\text{CPU}}(t)$, depende del parámetro fraccionario γ de un modo muy similar a como lo hacía en el caso del algoritmo adaptativo EE, observándose que el algoritmo se vuelve más lento a medida que crece el valor de γ , esto es, $T_{\text{CPU}}(t) \sim t^\beta$ donde β crece cuando γ crece ($\beta \rightarrow 2$ cuando $\gamma \rightarrow 1^-$). Como ya se comentó en el apartado 3.1.3.1 el caso de $\gamma = 1$ es singular.

En la Fig. 3.20, se muestran los tiempos de CPU, $T_{\text{CPU}}(t)$, para varios valores de τ . Como en el caso del método EE, la velocidad crece cuando la tolerancia disminuye (desde luego, el precio a pagar es que el método resulta menos preciso). Es conveniente recordar que, como ya se vio en el caso del algoritmo EE, en la Fig. 3.20 se muestra que el tiempo de CPU es, aproximadamente proporcional a $\tau^{-\eta}$ con η en el entorno de 1. La justificación

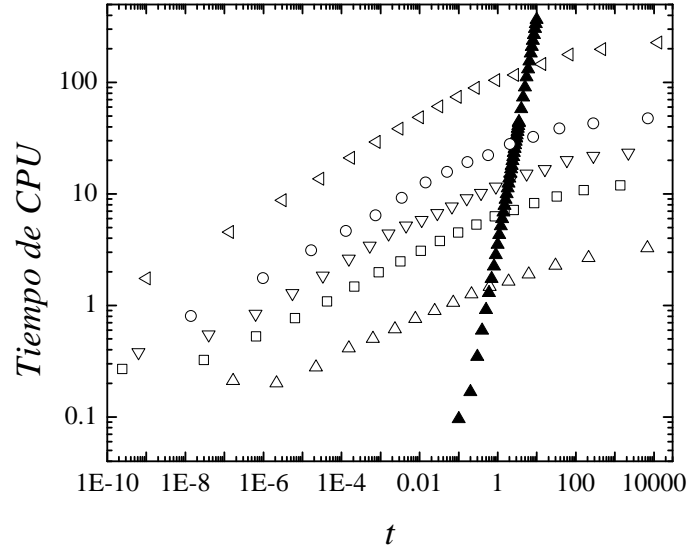


Figura 3.20: Tiempos de CPU normalizados, T_{CPU} , frente a t para el método con pasos temporales fijos con $\Delta t = 0.01$ (triángulos negros) y para el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ con tolerancias 10^{-5} (triángulos hacia la izquierda), 5×10^{-5} (círculos), 10^{-4} (triángulos hacia abajo), 2×10^{-4} (cuadrados), 10^{-3} (triángulos hacia arriba). En todos los casos $\gamma = 1/4$, $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

de este hecho fue desarrollada en la sección anterior dedicada al caso EE. Se puede apreciar que en el método predictivo $\theta = 3/2$ y $\omega = 1/2$ los tiempos de CPU son algo mayores que los correspondientes al algoritmo puramente predictivo $\omega = 1$ ($\theta = 3/2$), pero inferiores a los tiempos de CPU del método EE.

3.1.5. Aplicación de los métodos adaptativos a otros problemas subdifusivos

En esta sección se va a estudiar cómo responden los métodos adaptativos cuando se aplican a otro tipo de problemas subdifusivos distintos del dado en (3.69). El objetivo es ver cómo influyen sobre la precisión y la velocidad de los métodos EE y predictivo la presencia de un término fuente o de unas condiciones iniciales o de contorno distintas a la hora de resolver la ecuación subdifusiva fraccionaria. En la Sec. 3.1.5.1 se estudiará el problema (3.69) con una condición inicial menos simple obteniendo unos resultados similares

a los obtenidos para el problema (3.69). En la Sec. 3.1.5.2 se estudia el problema (3.69) con un término fuente de pendiente abrupta de modo que la solución presenta tres regiones bien diferenciadas: para tiempos pequeños y para tiempos del orden de la unidad, la solución varía muy rápido mientras que para tiempos intermedios la solución cambia muy lentamente. Los métodos adaptativos demuestran ser muy eficaces a la hora de resolver el problema empleando pasos pequeños en la zonas en las que la solución varía con rapidez y avanzando con pasos más largos en la zona en la que la función varía lentamente. En la Sec. 3.1.5.3 la consideración de un término fuente periódico en el problema (3.69) da lugar a una solución cuasi-periódica. En estas condiciones se observa que el tamaño de los pasos de los métodos adaptativos es casi constante, de modo que para este tipo de problemas el empleo de los métodos EE o predictivo no supone ninguna mejora respecto al método de paso temporal fijo. Finalmente, en la Sec. 3.1.5.4 se estudia el problema (3.69) con condiciones de contorno no homogéneas y condición inicial nula, obteniéndose una solución que decae rápidamente con el tiempo. En este caso los métodos adaptativos se revelan como indispensables para hacer un seguimiento completo de la solución desde la condición inicial hasta el estado estacionario, pues ello supone utilizar tiempos que abarcan doce órdenes de magnitud, algo que ningún ordenador trabajando con métodos en diferencias finitas de pasos temporales fijos puede resolver en un tiempo razonable.

3.1.5.1. Problema (3.69) con una condición inicial menos simple

El problema considerado es similar al problema tipo con el que hemos venido trabajando, esto es, ecuación subdifusiva fraccionaria sin término fuente definida en $[0, \pi]$ y con condiciones de contorno absorbentes pero con una condición inicial distinta, es decir

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.84a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \quad (3.84b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = \frac{4x}{\pi} \left(1 - \frac{x}{\pi}\right) \quad (3.84c)$$

donde se tomará $K_\gamma = 1$. En la Sec. 6.2 del Apéndice se proporcionan los parámetros para resolver este problema. La solución analítica es ahora

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{32}{\pi^3(2n+1)^3} E_\gamma [-(2n+1)^2 t^\gamma] \sin [(2n+1)x]. \quad (3.85)$$

En las Figs. 3.21 y 3.22 se compara la solución analítica con las soluciones numéricas proporcionadas por los métodos EE y predictivo para $\gamma = 1/4$.

En la Fig. 3.21 se muestra la solución completa $u(x, t)$ (cuando x varía en $[0, \pi]$) para distintos valores de tiempo y en la Fig. 3.22 se muestra la solución justo en el punto medio, $u(\pi/2, t)$, así como los errores correspondientes a los dos métodos numéricos. El acuerdo es excelente. Dado que la solución de este problema cambia muy rápidamente para tiempos pequeños y muy lentamente para tiempos grandes, en la Fig. 3.22 se ha utilizado una escala logarítmica, tanto en el eje de ordenadas como en el eje de abscisas, a fin de poder ver claramente cómo evoluciona la solución para todos los valores de tiempo (grandes y pequeños). Los errores que se muestran en la gráfica pequeña interior en la Fig. 3.22 son muy similares a aquellos obtenidos en el caso del problema tipo recogidos en la Fig. 3.13. De hecho, las Figs. 3.10-3.15, 3.19 y 3.20 hubieran cambiado muy poco si, en lugar de $u(x, 0) = \sin x$, se hubiera utilizado la condición inicial dada por (3.84c).

En las Figs. 3.21 y 3.22 no se representa ningún resultado obtenido por medio del método de pasos temporales fijos porque, para obtener este tipo de soluciones para tiempos grandes (es decir, para tiempos del orden de 10^3) empleando un tiempo de CPU razonable, sería necesario usar pasos temporales muy grandes (esto es, $\Delta_n \simeq 0.1$); en caso contrario, el número de pasos temporales requerido sería muy elevado y, por tanto, impracticable (véase Tabla 3.1). Pero si se usan pasos de este tamaño, se pierde la evolución de la solución para un rango significativo; por ejemplo, el uso de un paso temporal $\Delta_n = 0.1$ impide mostrar cómo evoluciona el máximo de la solución $u(x, t)$ sobre casi la mitad de su rango, esto es, desde $u(\pi/2, 0) = 1$ hasta $u(\pi/2, 0.1) \approx 0.624$ (véase la Fig. 3.22).

3.1.5.2. Problema (3.69) con un término fuente de pendiente abrupta

Una característica muy relevante de los dos métodos adaptativos que se han desarrollado es que permiten adaptar dinámicamente el tamaño de los pasos temporales de acuerdo con el comportamiento de la solución. Por ejemplo, si en un instante dado se introduce una perturbación dentro del sistema, cabe esperar que el método adaptativo sea capaz de tener en cuenta este hecho mediante la construcción de una malla temporal adaptada al comportamiento de la perturbación. En este apartado se va a ver un claro ejemplo en el que esto ocurre (ya se anticipó algo al respecto en la Sec. 3.1.2 pero sin la aplicación de los métodos EE y predictivo). El problema que se considera,

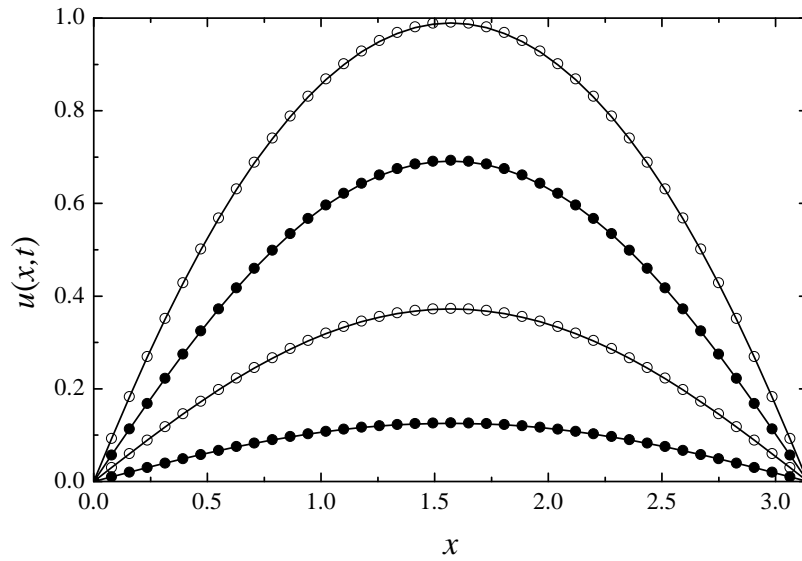


Figura 3.21: Solución $u(x, t)$ frente a x para el problema (3.84) con $\gamma = 1/4$ y, de arriba a abajo, $t = 1.91 \times 10^{-8}$, $t = 3.19 \times 10^{-2}$, $t = 5.12$, y $t = 1.26 \times 10^3$. Los símbolos corresponden a las soluciones numéricas para el método EE (símbolos blancos) y para el método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$ (símbolos negros). En todos los casos $\tau = 10^{-3}$, $\Delta x = \pi/40$, $\Delta_0 = 0.01$. Las líneas representan las soluciones analíticas dadas por (3.85).

definido para $x \in [0, \pi]$, es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + F(x, t) \quad (3.86a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \quad (3.86b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = \text{sen } x \quad (3.86c)$$

donde $K_\gamma = 1$ y el término fuente, $F(x, t)$ viene dado por

$$F(x, t) = \left[1 + \frac{\Gamma(1+p)t^{-\gamma}}{\Gamma(1+p-\gamma)} \right] at^p \text{sen } x. \quad (3.87)$$

En la Sec. 6.3 del Apéndice se proporcionan los parámetros para resolver este problema cuya solución analítica es

$$u(x, t) = [E_\gamma(-t^\gamma) + at^p] \text{sen } x. \quad (3.88)$$

Se toma $a = p = 20$ porque estos valores conducen a una solución que presenta tres regímenes temporales claramente distintos: el régimen de tiem-

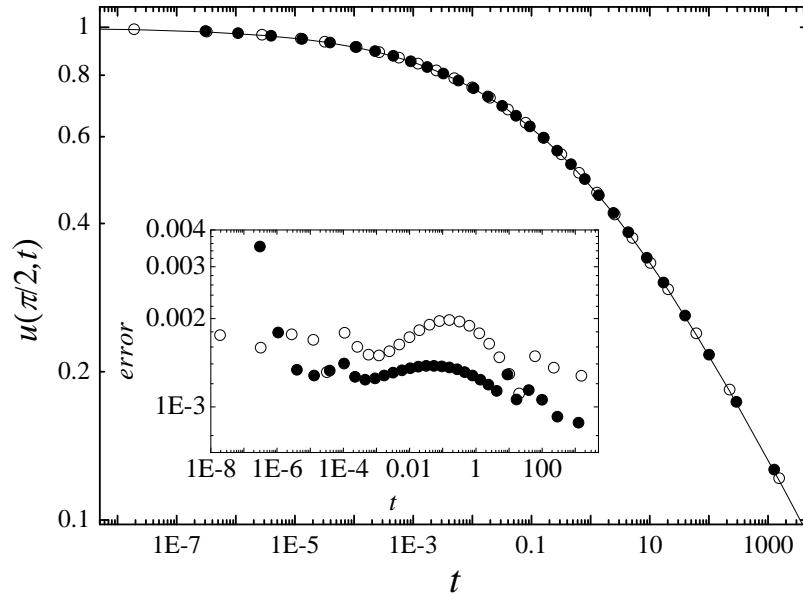


Figura 3.22: Solución y errores numéricos (gráfica pequeña interior) en el punto medio $u(\pi/2, t)$ frente a t para el problema (3.84) con $\gamma = 1/4$. Los símbolos corresponden a la solución numérica para el método EE (símbolos blancos) y para el método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$ (símbolos negros). En todos los casos $\tau = 10^{-3}$, $\Delta x = \pi/40$, $\Delta_0 = 0.01$. La línea continua representa la solución analítica (3.85).

pos pequeños en el que la solución varía muy rápido, el régimen de tiempos intermedios (aproximadamente hasta tiempos un poco por debajo de $t = 1$) en el que la solución varía muy lentamente, y un régimen final para tiempos más grandes donde, de nuevo, la solución varía muy rápido. De esta manera, este caso constituye un buen ejemplo con el que evaluar los métodos adaptativos que se han desarrollado. Los resultados proporcionados por el método EE, el método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$ y el método con pasos temporales fijos, se muestran en la Fig. 3.23. Se debe señalar el hecho de que, en algunos casos, se ha encontrado que el método puramente predictivo ($\omega = 1$) no funciona para este problema particular, conforme a lo que ya se ha descrito en la Sec. 3.1.4. Por ejemplo, para $\Delta_0 = 0.01$, $\gamma = 1/4$, $a = p = 20$ y $\tau = 10^{-3}$, se encuentra que la condición de salida $\tau/2 < \mathcal{E}^{(n)} < \tau$ para el método predictivo $\omega = 1$ nunca se cumple para el paso correspondiente a $n = 18$ porque el algoritmo entra en un bucle $\{\Delta_n^a, \mathcal{E}_a^{(n)}\} \rightarrow \{\Delta_n^b, \mathcal{E}_b^{(n)}\} \rightarrow \{\Delta_n^a, \mathcal{E}_a^{(n)}\} \rightarrow \dots$ donde

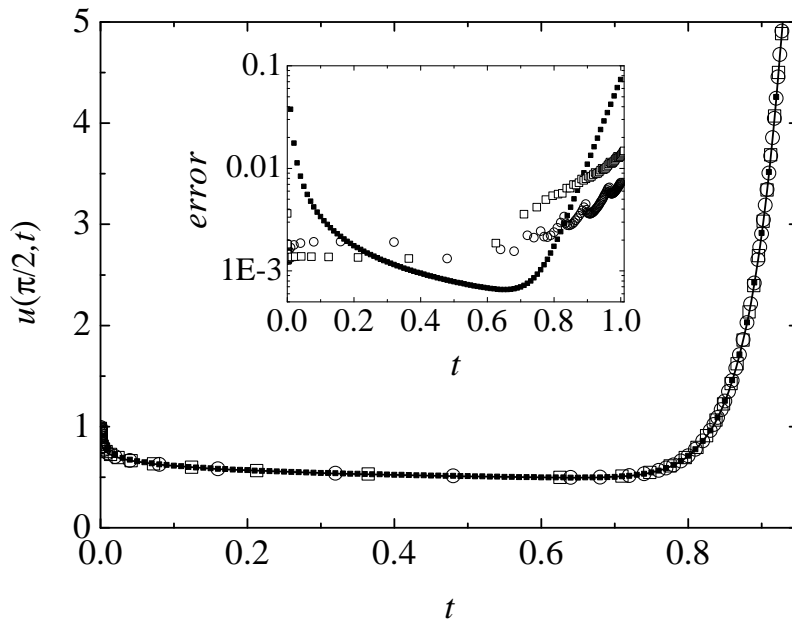


Figura 3.23: Solución y errores numéricos (pequeña gráfica interior) en el punto medio $u(\pi/2, t)$ para el problema (3.86) con $\gamma = 1/4$ y término fuente (3.87) donde $a = p = 20$. Cuadrados negros: método numérico de paso fijo con $\Delta_n = 0.01$; círculos: método EE con tolerancia $\tau = 10^{-3}$; cuadrados blancos: método predictivo $\theta = 3/2$ con $\tau = 10^{-3}$ y $\omega = 1/2$; línea: solución analítica dada por (3.88). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$.

$\{\Delta_n^a, \mathcal{E}_a^{(n)}\} \simeq \{0.3458, 2.723 \times 10^{-3}\}$ y $\{\Delta_n^b, \mathcal{E}_b^{(n)}\} \simeq \{0.1773, 3.672 \times 10^{-4}\}$. Finalmente, se debe hacer una referencia al modo en el cual varía el tamaño de los pasos temporales en los métodos adaptativos de acuerdo con el comportamiento de la solución: en la Fig. 3.23 se puede ver que para tiempos pequeños y para tiempos en el entorno de $t = 1$ la solución cambia muy rápido y, en consecuencia, los métodos adaptativos avanzan lentamente en estas regiones manteniendo los errores numéricos pequeños; sin embargo, para tiempos intermedios la solución cambia muy lentamente, y los métodos adaptativos reaccionan avanzando con pasos largos aumentando así la velocidad de cálculo, aunque no a expensas de un incremento de los errores numéricos.

3.1.5.3. Problema (3.69) con un término fuente cuasi-periódico

Los métodos adaptativos resultan especialmente ventajosos para problemas con soluciones que tienen escalas temporales marcadamente distintas.

En caso contrario, aparte del hecho de que permiten prefijar (aproximadamente) su precisión, los métodos adaptativos no son mucho más rápidos que los algoritmos de paso temporal uniforme. De hecho, podrían llegar a ser incluso más lentos como consecuencia de la constante sobrecarga computacional provocada por la continua búsqueda de un tamaño óptimo de paso temporal que, o bien no existe, o tan sólo supone una mejora marginal respecto al que proporcionaría el método de paso uniforme. A continuación se va a considerar un ejemplo de esto. El problema que se estudiará, definido para $x \in [0, \pi]$, es

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + F(x, t) \quad (3.89a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \quad (3.89b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = \sin x \quad (3.89c)$$

donde $K_\gamma = 1$ y el término fuente, $F(x, t)$, viene dado por

$$f(x, t) = a [\sin(\nu t) + \nu^\gamma \sin(\nu t + \gamma\pi/2)] \sin x. \quad (3.90)$$

En la Sec. 6.4 del Apéndice se proporcionan los parámetros para resolver este problema cuya solución analítica es

$$u(x, t) = [E_\gamma(-t^\gamma) + a \sin(\nu t)] \sin x. \quad (3.91)$$

La parte temporal es la suma de $E_\gamma(-t^\gamma)$, una función que, para valores pequeños de γ , varía rápidamente para tiempos pequeños y se mantiene casi constante para tiempos grandes, y $a \sin \nu t$, una función periódica. Esto implica que, excepto para valores de tiempo muy pequeños, no cabe esperar que los métodos adaptativos sean mejores que el algoritmo de pasos temporales fijos. En la Fig. 3.24 se muestra la solución proporcionada por el método EE, el método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$, y el método con pasos temporales fijos $\Delta_n = 0.1$ para el caso en el que $\nu = 2\pi$ y $a = 1/10$. Se observa que el tamaño de los pasos temporales empleados por los métodos adaptativos es casi constante (alrededor de 0.1) cuando la solución es cuasi-periódica. En otras palabras, la mejor opción en este caso es usar un paso temporal fijo. En realidad, esto es lo que hacen los métodos adaptativos, pero sólo después de tratar de encontrar un tamaño de paso temporal mejor en cada nueva iteración y descubrir que el tamaño adecuado del paso apenas experimenta variación. Por otra parte, la pequeña gráfica interior en la Fig. 3.24 muestra que los dos métodos adaptativos (EE y predictivo) proporcionan un resultado muy bueno incluso cuando la solución varía rápidamente.

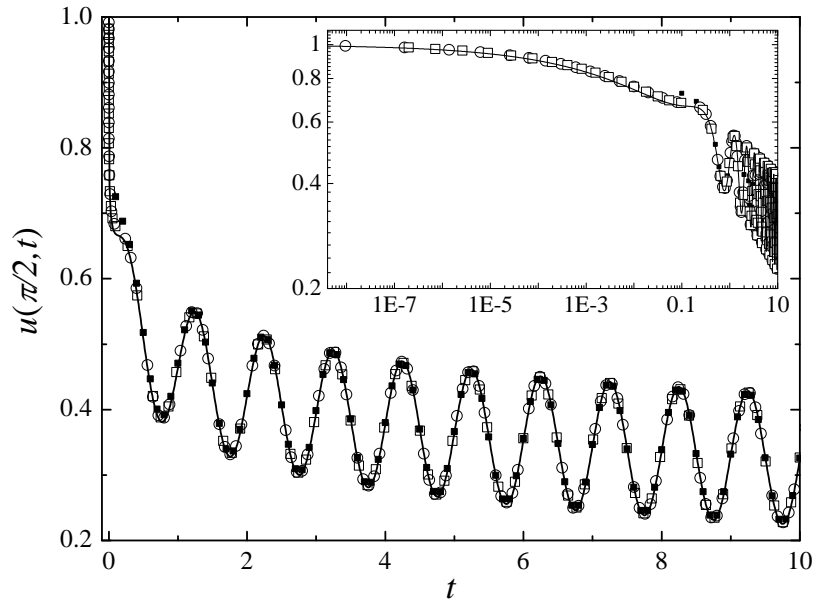


Figura 3.24: Solución en el punto medio, $u(\pi/2, t)$, frente al tiempo para el problema (3.89) con $\gamma = 1/4$ y término fuente (3.90), siendo $\nu = 2\pi$ y $a = 1/10$. Cuadrados negros: método numérico con $\Delta_n = 0.1$; círculos: método EE con tolerancia $\tau = 10^{-3}$; cuadrados blancos: método predictivo $\theta = 3/2$ con $\tau = 10^{-3}$ y $\omega = 1/2$; línea continua: solución analítica dada por (3.91). En todos los casos $\Delta x = \pi/40$ y $\Delta_0 = 0.01$. Pequeña gráfica interior: detalle de la solución $u(\pi/2, t)$ para tiempos pequeños.

3.1.5.4. Problema con condiciones de contorno no homogéneas

Imagínese que se desea determinar el perfil de densidad en función del tiempo de un conjunto de partículas subdifusivas descritas mediante el modelo CTRW de cola larga que se difunden aleatoriamente en un medio finito unidimensional, inicialmente vacío de partículas, cuando hay un reservorio de partículas en un extremo del medio (de modo que su concentración permanece constante en ese punto) y un sumidero en el extremo opuesto de modo que las partículas que se introducen por un extremo son eliminadas del sistema por el extremo opuesto. En términos matemáticos, el problema que se tiene que resolver, definido para $0 \leq x \leq L$, viene dado por

$${}_0^C D_t^\gamma u(x, t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.92a)$$

$$CC : \quad u(0, t) = u_0; \quad u(L, t) = 0 \quad (3.92b)$$

$$CI : \quad u(x, 0) = 0. \quad (3.92c)$$

En la Sec. 6.5 del Apéndice se proporcionan los parámetros para resolver este problema. La solución analítica puede obtenerse resolviendo el problema en el espacio de Laplace, o directamente mediante el método de las imágenes como puede verse en [8]:

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = & u_0 \sum_{m=0}^M H_{10}^{11} \left[mz_c + z \left| \begin{array}{l} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{array} \right. \right] \\
 & - u_0 \sum_{m=1}^M H_{10}^{11} \left[mz_c - z \left| \begin{array}{l} (1, \gamma/2) \\ (0, 1) \end{array} \right. \right] \quad (3.93)
 \end{aligned}$$

donde $M \rightarrow \infty$, $z = x/(Kt^\gamma)^{1/2}$, $z_c = 2L/(Kt^\gamma)^{1/2}$, y H_{10}^{11} es la función H de Fox [8, 7, 128]. Cuando $\gamma = 1$, la función de Fox se transforma en la función error $H_{10}^{11} \left[z \left| \begin{array}{l} 1, 1/2 \\ 0, 1 \end{array} \right. \right] = \operatorname{erfc}(z/2)$, y entonces se recupera la solución clásica [129, Eq. (6), p. 310].

En la Fig. 3.25, se compara la solución analítica con la solución numérica obtenida mediante los algoritmos EE y predictivo para $\gamma = 1/4$, $K = 1$, $L = 4$. Este problema deja clara la inmensa ventaja de los métodos adaptativos sobre los métodos con pasos temporales fijos. Para encontrar la solución próxima al estado estacionario es preciso llegar a tiempos del orden de 10^4 . Por lo tanto, si se quiere obtener esta solución por medio de un número razonable de pasos temporales de tamaño constante, se tienen que utilizar pasos bastantes largos, por ejemplo, 10^4 pasos de tamaño $\Delta_n = 1$, lo cual quiere decir que se pasarían por alto todos los cambios habidos en el sistema desde $t = 0$ hasta $t = \Delta_n = 1$. En nuestro caso, véase la Fig. 3.25, esto significaría dejar de considerar un intervalo de tiempo en el cual la solución experimenta cambios sustanciales y relevantes. En otras palabras, en la Fig. 3.25 se evidencia que, para hacer un seguimiento completo de la solución desde la condición inicial hasta el estado estacionario, se tienen que utilizar tiempos que abarcan doce órdenes de magnitud (desde $t \sim 10^{-8}$ hasta $t \sim 10^4$). Ningún ordenador empleando métodos en diferencias finitas con pasos temporales fijos puede resolver este problema en un tiempo razonable.

3.1.5.5. Comparación alternativa de la velocidad de los métodos EE y predictivo

Una forma diferente de chequear la eficiencia de los métodos adaptativos consiste en contar el número de veces M que el sistema (3.29) tiene que ser generado y resuelto para obtener la solución $u(x, t)$ en el tiempo t . La evaluación y solución del sistema (3.29) para valores de tiempo crecientes t_n es lo que hace que estos métodos en diferencias finitas sean crecientemente

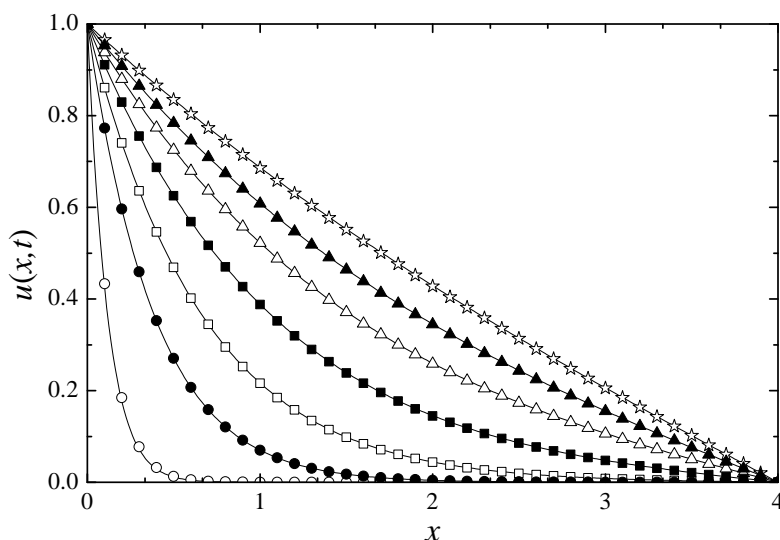


Figura 3.25: Solución $u(x, t)$ frente a x para el problema con condiciones de contorno no homogéneas (3.92) con $\gamma = 1/4$, $K = 1$, $L = 4$, y distintos valores de t . Las líneas corresponden a la solución analítica dada por (3.93) con $M = 8$, los símbolos blancos corresponden a las soluciones numéricas obtenidas por medio del método EE, y los símbolos negros corresponden a las soluciones numéricas para el método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$. Para ambos métodos $\tau = 10^{-3}$. Los tiempos que corresponden a cada solución son (de izquierda a derecha) $t = 1.91 \times 10^{-8}$, 2.67×10^{-4} , 2.00×10^{-2} , 8.93×10^{-1} , 2.05×10^1 , 2.68×10^2 , 1.14×10^4 . En todos los casos, $\Delta x = 0.1$, $\tau = 10^{-3}$ y $\Delta_0 = 0.01$.

lentos. Por lo tanto, cuanto más pequeño sea el valor de M requerido para obtener la solución correspondiente a un tiempo dado, más rápido será el método. Se debe hacer notar que cada vez que el método adaptativo prueba un nuevo paso temporal, este número M se incrementa en una unidad.

En la Fig. 3.26 se muestra el tiempo t alcanzado en la integración numérica frente al número M de evaluaciones requeridas cuando se emplean los dos métodos adaptativos para resolver los cuatro ejemplos considerados en la presente sección. Para comparar, se incluyen también los valores de $M = t/\Delta t$ para pasos temporales fijos de tamaño $\Delta t = 0.1$ y $\Delta t = 0.01$. Una vez más, se puede comprobar que los métodos adaptativos son mucho mejores que el método de paso fijo para los ejemplos considerados en los apartados 3.1.5.1 y 3.1.5.4, es decir, los casos correspondientes a condición inicial de tipo parabólico y a condiciones de contorno no homogéneas, respectivamente. Estos son los casos en los que la solución varía muy lentamente para tiempos

grandes. Para el caso con término fuente periódico, apartado 3.1.5.3, en el que la solución es cuasi-periódica, la eficiencia de los dos métodos adaptativos es similar a la eficiencia del método con pasos fijos. Este resultado no es para nada sorprendente, pues, como ya se ha mostrado durante el estudio de este problema, los métodos adaptativos acaban eligiendo pasos temporales casi constantes para el régimen temporal en el que la solución es cuasi-periódica. Finalmente, para el caso con un término fuente de pendiente muy pronunciada, apartado 3.1.5.2, los métodos adaptativos se atascan para tiempos en el entorno de 1 buscando mantener la precisión de la solución (véase la Fig. 3.23). Se observa que la conveniencia de usar métodos adaptativos depende del problema que sea preciso resolver. Atendiendo a la velocidad del método, los algoritmos adaptativos no son recomendables cuando la tasa de variación de la solución no cambia mucho a lo largo del intervalo de integración porque, en tal caso, no hay necesidad de adaptar el tamaño de los pasos temporales. Finalmente, en la Fig. 3.26 se muestra que el método predictivo es siempre más rápido que el método EE para los cuatro casos considerados en la presente sección.

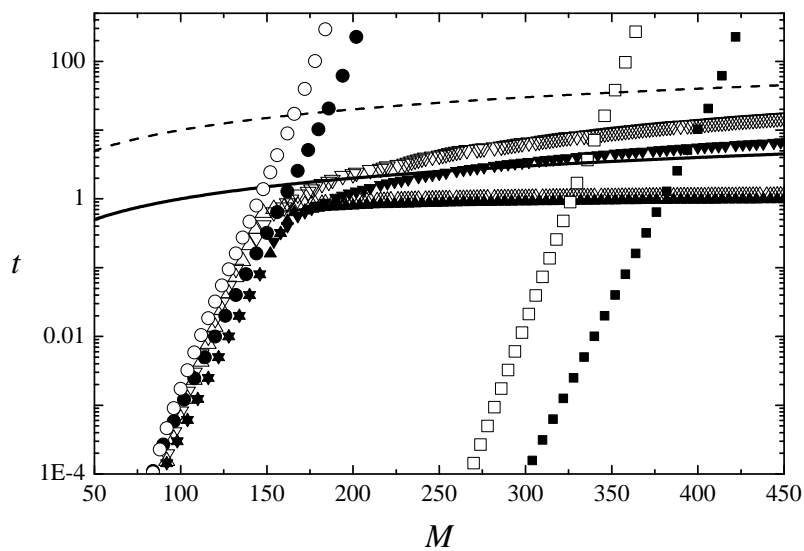


Figura 3.26: Número de veces M que el sistema (3.29) tiene que ser resuelto para obtener $u(x, t)$ para un tiempo t cuando consideramos los problemas (i) CI parabólica (círculos), (ii) término fuente de pendiente abrupta (triángulos hacia abajo), (iii) término fuente periódico (triángulos hacia arriba) y (iv) CC no homogéneas (cuadros). Símbolos blancos: método EE; símbolos negros: método predictivo $\theta = 3/2$ con $\omega = 1/2$. En todos los casos $\tau = 10^{-3}$ y $\gamma = 1/4$. Las líneas representan M para pasos temporales fijos, $M = t/\Delta t$, con $\Delta t = 0.01$ (línea continua) y $\Delta t = 0.1$ (línea discontinua).

Capítulo 4

Conclusiones

El objetivo de este trabajo ha sido el desarrollo y ulterior análisis de algoritmos numéricos que permitan resolver cierta clase de ecuaciones en derivadas parciales fraccionarias. A tal fin, se han desarrollado dos tipos de algoritmos: explícitos e implícitos, estos últimos con la cualidad de ser adaptativos. Los métodos explícitos son fáciles de implementar y de resolver y no son exigentes desde el punto de vista computacional, pero su estabilidad obliga en ocasiones a usar pasos temporales relativamente pequeños lo que comporta la necesidad de realizar un número elevado de iteraciones para alcanzar el tiempo deseado. Asimismo, para ciertos valores de los parámetros que caracterizan el retículo espacio-temporal, los algoritmos explícitos se vuelven inestables y, en consecuencia, insolubles. Por contra, los métodos implícitos adaptativos son mucho más veloces y mantienen el error dentro de unos límites predeterminados por el factor que hemos denominado *tolerancia*, pero su carácter implícito hace más complejo su tratamiento computacional siendo necesaria la resolución de un sistema tridiagonal en cada paso.

En el capítulo 2, se han estudiado diferentes algoritmos basados en distintas discretizaciones de la derivada temporal fraccionaria formulada tanto en términos de la definición de Caputo como en términos de la de Riemann-Liouville, prestando especial atención al análisis comparado de la estabilidad y la precisión. Se han desarrollado seis algoritmos distintos para resolver tanto la ecuación subdifusiva fraccionaria como la ecuación difusivo-ondulatoria fraccionaria. Para el caso subdifusivo se han analizado los algoritmos GMCP y L1 a partir de la definición de Caputo de la derivada fraccionaria y el método de Yuste-Acedo a partir de la definición de Riemann-Liouville. Para el caso difusivo-ondulatorio se han propuesto y analizado los métodos GMCP y L2 cuando se emplea la derivada de Caputo y el método de Yuste-Acedo para la derivada de Riemann-Liouville. Para la implementación de los algoritmos de GMCP y de Yuste-Acedo se ha empleado la discretización BDF1,

mientras que en la construcción de los métodos L1 y L2 se han utilizado las discretizaciones homónimas. Un primer resultado importante de nuestro análisis comparado es la demostración de la equivalencia entre el método de GMCP y el de Yuste-Acedo para el caso subdifusivo si se emplea la discretización BDF1, así como la demostración de la no equivalencia de dichos métodos en el caso difusivo-ondulatorio (si bien son equivalentes cuando se utiliza la discretización BDF1 y una condición inicial que imponga que la derivada parcial primera en el tiempo sea nula).

El análisis de estabilidad de los algoritmos estudiados se ha basado principalmente en un procedimiento de tipo Von Neumann-Fourier. El límite de estabilidad obtenido para los métodos de GMCP y de Yuste-Acedo, resulta ser el mismo tanto para el caso subdifusivo como para el difusivo-ondulatorio y presenta una expresión formal muy sencilla. El análisis en términos de Von Neumann-Fourier de los métodos L1 y L2 conduce a unas expresiones distintas para sus respectivos límites de estabilidad, aunque igualmente sencillas. Tanto en el caso del algoritmo L1 como en el caso del algoritmo L2, el límite de estabilidad obtenido está por encima del límite de estabilidad de los métodos GMCP y de Yuste-Acedo para cada valor de γ considerado. Todos estos límites se han comprobado numéricamente. Asimismo, siguiendo el modelo de Liu et al. [68], se ha realizado un análisis teórico de la convergencia de los distintos algoritmos implementados así como un estudio de su precisión.

El estudio de la ecuación fraccionaria de cable ha permitido evaluar la capacidad del procedimiento desarrollado para el análisis de estabilidad así como comprobar la eficacia de los algoritmos numéricos a la hora de resolver ecuaciones difusivas fraccionarias más complejas que involucran varias derivadas fraccionarias. Las derivadas que aparecen en la ecuación son de Riemann-Liouville, por lo que se ha usado el método de Yuste-Acedo para su resolución. El criterio obtenido para el límite de estabilidad es más complejo que los correspondientes a los casos anteriores, y depende de los dos coeficientes subdifusivos, γ_1 y γ_2 , presentes en la ecuación de cable. Se ha demostrado también la convergencia del algoritmo numérico implementado.

En el capítulo 3 se ha desarrollado un esquema implícito de paso temporal variable a través de una generalización del algoritmo L1. Este esquema es empleado por los algoritmos adaptativos y tiene la muy conveniente propiedad de ser incondicionalmente estable. Para el caso subdifusivo se ha presentado un primer algoritmo adaptativo en el que la función que nos da el tamaño del paso temporal depende de una estimación de la curvatura de la solución en la región donde varía más abruptamente. Este método funciona bien pero es primitivo en comparación con los dos algoritmos adicionales basados en la técnica de los dos pasos con duplicación: el método EE y el método predictivo. En esta técnica, conocido el valor de la solución hasta un instante dado se

calcula la solución en el instante siguiente por dos vías distintas: considerando que media un único paso temporal y considerando que median dos pasos temporales de tamaño mitad, respectivamente. La clave del procedimiento está en elegir el máximo tamaño de paso que permite que la diferencia entre la solución calculada mediante un sólo paso y la calculada mediante dos pasos mitad sea inferior a una cierta cantidad que se ha denominado *tolerancia*. En el método EE la elección del tamaño de paso es a ciegas. Si se parte de un tamaño de paso para el que la diferencia entre soluciones es mayor que la tolerancia, en cada iteración el paso se divide por dos mientras la diferencia sea mayor que la tolerancia hasta que dicha diferencia resulta ser menor que ese valor, en cuyo caso se elige el tamaño de paso correspondiente a esa situación. Por contra, si inicialmente la diferencia es menor que la tolerancia, se va duplicando el tamaño de paso hasta que se obtiene una diferencia que supera a la tolerancia, y, en tales condiciones, el tamaño de paso elegido es el de la penúltima iteración. En el método predictivo, en lugar de duplicar o demediar el tamaño del paso en cada iteración, se asume que éste responde a cierta forma funcional del cociente entre la tolerancia y la diferencia. Por lo demás, se sigue el mismo procedimiento hasta obtener el tamaño de paso óptimo. Los resultados son excelentes. Ambos métodos pueden llegar a ser varios órdenes de magnitud más veloces que el método con paso temporal fijo, siendo el algoritmo predictivo más veloz que el EE. Como cabía esperar, los métodos adaptativos son más precisos cuanto menor es la tolerancia pero ello viene acompañado de un incremento de los tiempos de computación. Cuando la solución del problema oscila rápidamente, los métodos adaptativos se tornan lentos, empleando pasos temporales prácticamente constantes, y, en consecuencia, no ofrecen ninguna ventaja sobre los de paso fijo. Por contra, cuando las soluciones varían de forma suave, los métodos adaptativos funcionan muy bien, permitiendo grandes incrementos de la velocidad de computación. Este tipo de algoritmos rinde sus mejores resultados en problemas donde se alternan regiones de abrupta variación, y que pueden ser recorridas cuidadosamente mediante el uso de pasos muy pequeños, con amplias zonas en las que el cambio es suave y donde es posible avanzar con rapidez mediante el empleo de pasos más largos.

Este trabajo deja la puerta abierta a varias líneas ulteriores de investigación, tanto en lo relativo al desarrollo de nuevos métodos adaptativos distintos del algoritmo EE y del predictivo, como en lo relativo al estudio de ecuaciones difusivas fraccionarias de mayor complejidad, como puede ser el caso de las ecuaciones de reacción-subdifusión de varias especies que reaccionan entre sí. Otras posibles líneas de investigación son la obtención y empleo de algoritmos de paso variable de precisión mayor que el L1 y la extensión al caso difusivo-ondulatorio de los métodos adaptativos.

Apéndice A

Códigos *Mathematica*

En este apéndice se incluyen los códigos *Mathematica* utilizados para implementar los distintos algoritmos numéricos que aparecen en la tesis. Así, en la Sec. 1 se proporciona el código para el algoritmo L1 dado por la ecuación (2.118) cuando se aplica a la resolución del problema (2.12). En la Sec. 2 se da el código para el algoritmo de Yuste-Acedo (equivalente al de GMCP) dado por la ecuación (2.18) cuando se emplea para resolver el problema (2.13). En la Sec. 3 se proporciona el código para el algoritmo L2 dado por la ecuación (2.223) cuando se aplica a la resolución del problema (2.164). En la Sec. 4 se da el código para el algoritmo de Yuste-Acedo (equivalente al de GMCP para las condiciones iniciales consideradas) dado por la ecuación (2.170) cuando se emplea para resolver el problema (2.165). En la Sec. 5 se proporciona el código para el algoritmo dado por la ecuación (2.262) utilizado para resolver el problema (2.257). En la Sec. 6 se proporciona el código para implementar los métodos EE y Predictivo a partir del algoritmo de paso variable dado por la ecuación (3.23). En la Sec. 6.1 se proporcionan los parámetros para el problema (3.69). En la Sec. 6.2 se proporcionan los parámetros para el problema (3.84). En la Sec. 6.3 se dan los parámetros para el problema (3.86). En la Sec. 6.4 se proporcionan los parámetros para el problema (3.89). Finalmente, en la Sec. 6.5 se proporcionan los parámetros para resolver el problema (3.92).

Los códigos vienen comentados en inglés puesto que se pretende hacerlos públicos y ponerlos a disposición de cualquier investigador interesado, si bien se debe señalar que versiones menos elaboradas de algunos de estos códigos ya han sido publicadas con anterioridad.

I. Mathematica code for the LI explicit method for solving the problem

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = K_{\gamma} D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC: \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI: u(x,0) = \sin x.$$

The resulting difference scheme stands as follows,

$$U_j^{(m)} = U_j^{(m-1)} - \sum_{k=1}^{m-1} b_k (U_j^{(m-k)} - U_j^{(m-1-k)}) + \bar{S}_{\gamma} (U_{j-1}^{(m-1)} - 2U_j^{(m-1)} + U_{j+1}^{(m-1)})$$

$$\text{being} \quad \bar{S}_{\gamma} = K_{\gamma} \Gamma(2-\gamma) (\Delta t)^{\gamma} / (\Delta x)^2$$

If we define

$$b_k = b[k, \text{gamma}]$$

$$K_{\gamma} = K_g$$

$$\Delta x = \text{deltax}$$

$$\Delta t = \text{ht}$$

$$\bar{S}_{\gamma} = \text{sfrac}$$

$$U_j^{(m)} = \text{uME}[j, m, \text{gamma}]$$

An example of parameters declaration may be

```
Nx = 10;
{gamma = 5/10, deltax = Pi / (2. * Nx), Kg = 1.;
 ht = 10^-7, sfrac = Kg * Gamma[2 - gamma] * (ht)^(gamma) / (deltax)^2}
```

Coefficientes b_k are defined in the form

```
b[k_, gamma_] := b[k, gamma] = (k + 1)^(1 - gamma) - k^(1 - gamma)
```

The LI algorithm stands as follows

```
uME[j_, m_, gamma_] := uME[j, m, gamma] = Module[{kk},
  kk = Sum[
    b[k, gamma] * (uME[j, m - k, gamma] - uME[j, m - k - 1, gamma]), {k, 1, m - 1};
  sfrac * (uME[j - 1, m - 1, gamma] - 2 uME[j, m - 1, gamma] +
    uME[j + 1, m - 1, gamma])
  + uME[j, m - 1, gamma] - kk]
```

being the boundary conditions

```
uL[t_] = 0.;
uR[t_] = 0;
uME[-Nx, m_, gamma_] := uL[m * ht];
uME[Nx, m_, gamma_] := uR[m * ht];
```


2 | Codes.v8.nb

And finally, the following instruction allows us to include the initial condition

```
uME[nx_, 0, gamma_] := Sin[(nx + Nx) * deltax];  
Table[{nx, uME[nx, 0, 1]}, {nx, -Nx, Nx}] // N
```

2. Mathematica code for the Yuste-Acedo explicit method for solving the problem

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = K_{\gamma} D_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC: \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI: u(x,0) = \sin x.$$

The resulting difference scheme stands as follows,

$$U_j^{(m)} = U_j^{(m-1)} + S_{\gamma} \sum_{k=0}^{m-1} \omega_k^{(1-\gamma)} (U_{j-1}^{(m-1-k)} - 2U_j^{(m-1-k)} + U_{j+1}^{(m-1-k)})$$

$$\text{being} \quad S_{\gamma} = K_{\gamma} (\Delta t)^{\gamma} / (\Delta x)^2$$

If we define

$$\omega_k^{(1-\gamma)} = w[k, 1 - \text{gamma}]$$

$$K_{\gamma} = K_g$$

$$\Delta x = \text{deltax}$$

$$\Delta t = \text{ht}$$

$$S_{\gamma} = \text{sfrac}$$

$$U_j^{(m)} = \text{uME}[j, m, \text{gamma}]$$

An example of parameters declaration may be

```
Nx = 10;
{gamma = 5/10, deltax = Pi / (2. * Nx), Kg = 1.;
 ht = 10^-7, sfrac = Kg * (ht) ^ (gamma) / (deltax) ^ 2}
```

Coefficients $\omega_k^{(\alpha)}$ are defined in the form

```
w[0, alfa_] := 1;
w[k_, alfa_] := w[k, alfa] = (1 - (alfa + 1) / k) * w[k - 1, alfa]
```

The Yuste-Acedo algorithm stands as follows

```
uME[j_, m_, gamma_] := uME[j, m, gamma] = Module[{kk},
  kk = Sum[w[k, 1 - gamma] * sfrac * (uME[j - 1, m - 1 - k, gamma] -
    2 * uME[j, m - 1 - k, gamma] + uME[j + 1, m - 1 - k, gamma]), {k, 0, m - 1}];
  + uME[j, m - 1, gamma] +
  kk]
```

being the boundary conditions

4 | Codes.v8.nb

```
uL[t_] = 0.;  
uR[t_] = 0;  
uME[-Nx, m_, gamma_] := uL[m * ht];  
uME[Nx, m_, gamma_] := uR[m * ht];
```

And finally, the following instruction allows us to include the initial condition

```
uME[nx_, 0, gamma_] := Sin[(nx + Nx) * deltax];  
Table[{nx, uME[nx, 0, 1]}, {nx, -Nx, Nx}] // N
```

3. Mathematica code for the L2 explicit method for solving the problem

$${}^c D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 1 < \gamma < 2$$

$$CC: \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI: \begin{cases} u(x,0) = \sin x \\ \left. \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \end{cases}$$

The resulting difference scheme stands as follows,

$$U_j^{(m)} = 2 U_j^{(m-1)} - U_j^{(m-2)} - \sum_{k=1}^{m-1} b_k (U_j^{(m-k)} - 2 U_j^{(m-1-k)} + U_j^{(m-2-k)}) + \bar{S}_\gamma (U_{j-1}^{(m-1)} - 2 U_j^{(m-1)} + U_{j+1}^{(m-1)})$$

being $\bar{S}_\gamma = K_\gamma \Gamma(3 - \gamma) (\Delta t)^\gamma / (\Delta x)^2$

If we define

$$b_k = b[k, \text{gamma}]$$

$$K_\gamma = K_g$$

$$\Delta x = \text{deltax}$$

$$\Delta t = \text{ht}$$

$$\bar{S}_\gamma = \text{sfrac}$$

$$U_j^{(m)} = \text{uME}[j, m, \text{gamma}]$$

An example of parameters declaration may be

```
Nx = 10;
{gamma = 15/10, deltax = Pi / (2. * Nx), Kg = 1.;
 ht = 10^-3, sfrac = (Kg * Gamma[3 - gamma]) * (ht) ^ (gamma) / (deltax) ^ 2}
```

Coefficients b_k are defined in the form

```
b[k_, gamma_] := b[k, gamma] = (k + 1) ^ (2 - gamma) - k ^ (2 - gamma)
```

The L2 algorithm stands as follows

```
uME[j_, m_, gamma_] := uME[j, m, gamma] = Module[{kk},
  kk = Sum[b[k, gamma] * (uME[j, m - k, gamma] -
    2 uME[j, m - k - 1, gamma] + uME[j, m - k - 2, gamma]), {k, 1, m - 1}];
  sfrac * (uME[j - 1, m - 1, gamma] - 2 uME[j, m - 1, gamma] +
    uME[j + 1, m - 1, gamma])
  + 2 uME[j, m - 1, gamma] - uME[j, m - 2, gamma] - kk]
```

being the boundary conditions

```
uL[t_] = 0.;
uR[t_] = 0;
uME[-Nx, m_, gamma_] := uL[m * ht];
uME[Nx, m_, gamma_] := uR[m * ht];
```

6 | *Codes.v8.nb*

And finally, the following instructions allow us to include the initial conditions

```
uME[nx_, 0, gamma_] := Sin[(nx + Nx) * deltax];  
Table[{nx, uME[nx, 0, 1]}, {nx, -Nx, Nx}] // N
```

```
DerivadaPrimerauME[nx_, 0, gamma_] := DerivadaPrimerauME[nx, 0, gamma] = 0;
```

```
uME[nx_, -1, gamma_] := uME[nx, 0, gamma] - ht * DerivadaPrimerauME[nx, 0, gamma]
```

4. Mathematica code for the Yuste-Acedo explicit method for solving the problem

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = K_{\gamma} D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 1 < \gamma < 2$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : \begin{cases} u(x,0) = \sin x \\ \left. \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \end{cases}$$

The resulting difference scheme stands as follows,

$$U_j^{(m)} = 2 U_j^{(m-1)} - U_j^{(m-2)} + S_{\gamma} \sum_{k=0}^{m-1} \omega_k^{(2-\gamma)} (U_{j-1}^{(m-1-k)} - 2 U_j^{(m-1-k)} + U_{j+1}^{(m-1-k)})$$

$$\text{being} \quad S_{\gamma} = K_{\gamma} (\Delta t)^{\gamma} / (\Delta x)^2$$

If we define

$$\omega_k^{(2-\gamma)} = w[k, 2 - \text{gamma}]$$

$$K_{\gamma} = K_g$$

$$\Delta x = \text{deltax}$$

$$\Delta t = \text{ht}$$

$$S_{\gamma} = \text{sfrac}$$

$$U_j^{(m)} = \text{uME}[j, m, \text{gamma}]$$

An example of parameters declaration may be

```
Nx = 10;
{gamma = 15/10, deltax = Pi / (2. * Nx), Kg = 1.;
 ht = 10^-3, sfrac = Kg * (ht)^(gamma) / (deltax)^2}
```

Coefficients $\omega_k^{(\alpha)}$ are defined in the form

```
w[0, alfa_] := 1;
w[k_, alfa_] := w[k, alfa] = (1 - (alfa + 1) / k) * w[k - 1, alfa]
```

The Yuste-Acedo algorithm stands as follows

```
uME[j_, m_, gamma_] := uME[j, m, gamma] = Module[{kk},
  kk = Sum[w[k, 2 - gamma] * sfrac * (uME[j - 1, m - 1 - k, gamma] -
    2 * uME[j, m - 1 - k, gamma] + uME[j + 1, m - 1 - k, gamma]), {k, 0, m - 1}];
  + 2 uME[j, m - 1, gamma] - uME[j, m - 2, gamma] + kk]
```

being the boundary conditions

8 | Codes.v8.nb

```
uL[t_] = 0.;
uR[t_] = 0;
uME[-Nx, m_, gamma_] := uL[m * ht];
uME[Nx, m_, gamma_] := uR[m * ht];
```

And finally, the following instructions allow us to include the initial conditions

```
uME[nx_, 0, gamma_] := Sin[(nx + Nx) * deltax];
Table[{nx, uME[nx, 0, 1]}, {nx, -Nx, Nx}] // N
```

```
DerivadaPrimerauME[nx_, 0, gamma_] := DerivadaPrimerauME[nx, 0, gamma] = 0;
```

```
uME[nx_, -1, gamma_] := uME[nx, 0, gamma] - ht * DerivadaPrimerauME[nx, 0, gamma]
```

5. Mathematica code for the explicit method for solving the problem

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\gamma_1} \left(K \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \right) - \mu^2 {}_0D_t^{1-\gamma_2} u(x,t), \quad 0 < \gamma_1 < 1, \quad 0 < \gamma_2 < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(-L/2, t) = 0 \\ u(L/2, t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x, 0) = \delta(x).$$

The resulting difference scheme stands as follows

$$U_j^{(m)} = U_j^{(m-1)} + S_{\gamma_1} \sum_{k=0}^{m-1} \omega_k^{(1-\gamma_1)} (U_{j-1}^{(m-1-k)} - 2U_j^{(m-1-k)} + U_{j+1}^{(m-1-k)}) - \mu^2 (\Delta t)^{\gamma_2} \sum_{k=0}^{m-1} \omega_k^{(1-\gamma_2)} U_j^{(m-1-k)}$$

$$\text{being } S_{\gamma_1} = K (\Delta t)^{\gamma_1} / (\Delta x)^2$$

If we define

$$\omega_k^{(1-\gamma_1)} = w[k, 1 - \text{gammauno}]$$

$$\omega_k^{(1-\gamma_2)} = w[k, 1 - \text{gammados}]$$

$$\Delta x = \text{deltax}$$

$$\Delta t = \text{ht}$$

$$S_{\gamma_1} = \text{sfrac}$$

$$U_j^{(m)} = \text{uME}[j, m, \text{gammauno}, \text{gammados}]$$

An example of parameters declaration may be

```
Nx = 25;
{gammauno = 0.5, deltax = 1. / 10, mu = 1., gammados = 0.5, K = 1.;
 ht = 1.3 * 10^-5, sfrac = K * (ht) ^ gammauno / deltax ^ 2}
```

Coefficients $\omega_k^{(\alpha)}$ are defined in the form

```
w[0, alfa_] := 1;
w[k_, alfa_] := w[k, alfa] = (1 - (alfa + 1) / k) * w[k - 1, alfa]
```

The Cable difference scheme stands as follows

```
uME[j_, m_, gammauno_, gammados_] :=
  uME[j, m, gammauno, gammados] = Module[{kk},
    kk = Sum[sfrac * w[k, 1 - gammauno] * (uME[j - 1, m - 1 - k, gammauno, gammados] -
      2 uME[j, m - 1 - k, gammauno, gammados] +
      uME[j + 1, m - 1 - k, gammauno, gammados]), {k, 0, m - 1}];
    uME[j, m - 1, gammauno, gammados] + kk - mu^2 * (ht) ^ gammados * Sum[
      w[k, 1 - gammados] * uME[j, m - 1 - k, gammauno, gammados], {k, 0, m - 1}];
```

being the boundary conditions:

10 | Codes.v8.nb

```
uL[t_] = 0.;  
uR[t_] = 0;  
uME[-Nx, m_, gammauno_, gammados_] := uL[m * ht];  
uME[Nx, m_, gammauno_, gammados_] := uR[m * ht];
```

And finally, the following instruction allows us to include the initial condition

```
uME[nx_, 0, gammauno_, gammados_] := 0 /; -25 ≤ nx < 0;  
uME[nx_, 0, gammauno_, gammados_] := 10 /; 0 ≤ nx ≤ 0;  
uME[nx_, 0, gammauno_, gammados_] := 0 /; 0 < nx ≤ 25;  
Table[{nx, uME[nx, 0, 1, 1]}, {nx, -Nx, Nx}] // N
```

6. *Mathematica* codes for the T&E and the Predictive methods when we apply them to solve the implicit LI scheme with variable timesteps for the FPD equation

$${}_0^C D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad 0 < \gamma < 1$$

The finite difference scheme is given by

$$-S_n U_{j+1}^{(n)} + (1 + 2S_n) U_j^{(n)} - S_n U_{j-1}^{(n)} = G_j^{(n)}$$

where

$$G_j^{(n)} \equiv U_j^{(n-1)} - \sum_{m=0}^{n-2} \bar{\Gamma}_{m,n}^{(\gamma)} (U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}) + F_j^{(n)}$$

or, in matrix-vector form

$$AU^{(n)} = G(U^{(n-1)}, U^{(n-2)}, \dots, U^{(0)}, F^{(n)}, t_n)$$

The coefficients $\bar{\Gamma}_{m,n}^{(\gamma)}$ are given here by the function TT[m,n, γ] where $t_n = tt[n]$

```
TT[m_, n_, gamma_] :=
  ((tt[n] - tt[m]) ^ (1 - gamma) - (tt[n] - tt[m + 1]) ^ (1 - gamma)) /
  (tt[m + 1] - tt[m])
```

The coefficient

$$G_j^{(n)} \equiv U_j^{(n-1)} - \sum_{m=0}^{n-2} \bar{\Gamma}_{m,n}^{(\gamma)} (U_j^{(m+1)} - U_j^{(m)}) + F_j^{(n)}$$

is given here by the function GG[j,n, γ], where $F_j^{(n)} = \Gamma(2 - \gamma) (t_n - t_{n-1})^\gamma f(x_j, t_n)$, and $f(x_j, t_n)$ is given by funSource[j $\Delta x, t_n, \gamma$]. The solution U is stored in the matrix Umatrix. The element (1+m,1+j) of this matrix, i.e., Umatrix[[1+m,1+j]], represents $U_j^{(m)}$ with j=0,1,..., m=0,1,...

```
GG[j_, 1, gamma_] := Umatrix[[1, j + 1]] +
  (tt[1] - tt[0]) ^ gamma * Gamma[2 - gamma] *
  funSource[j * deltax, tt[1], gamma] (* El elemento 1 de
  Umatrix es la solución en el instante inicial: u(x,0) *)
```

```
GG[j_, n_, gamma_] := (
  kk = (tt[n] - tt[n - 1]) ^ gamma *
  Sum[Umatrix[[m + 2, j + 1]] - Umatrix[[m + 1, j + 1]] *
  TT[m, n, gamma], {m, 0, n - 2}];
  Umatrix[[n, j + 1]] - kk + (tt[n] - tt[n - 1]) ^ gamma *
  Gamma[2 - gamma] * funSource[j * deltax, tt[n], gamma])
```

The coefficient S_n is given by the function Sfun[m, γ] where K=Kg and $\Delta x = \text{deltax}$

12 | Codes.v8.nb

```
Sfun[m_, gamma_] :=
  (Kg * Gamma[2 - gamma]) / (deltax) ^ 2 * (tt[m] - tt[m - 1]) ^ gamma
```

Next the matrix system

$$AU^{(m)} = G(U^{(m-1)}, U^{(m-2)}, \dots, U^{(0)}, F^{(m)}, t_m)$$

is built and then solved inside the functions U1stepMatrixt and U2stepsMatrixt.

The matrix A is built by means of the instruction SparseArray[...], while the vector G is generated by means of the instruction Table[Which[j=0, ..., {j, 0, Np}]. Here uL[tt[m]] = u(x_L, t_m) is the boundary condition to the left (at x=x₀) and uR[tt[m]] = u(x_R, t_m) is the boundary condition to the right (at x=x_R). The solution {U₀^(m), U₁^(m), U₂^(m), ..., U_{Np}^(m)}, is stored in the vector uVectortm

U1stepMatrixt[m] provides the solution of

$$AU^{(m)} = G(U^{(m-1)}, U^{(m-2)}, \dots, U^{(0)}, F^{(m)}, t_m)$$

i.e., it provides the solution {U₀^(m), U₁^(m), U₂^(m), ..., U_{Np}^(m)} at time t_m from the solutions {{U₀^(m-1), U₁^(m-1), U₂^(m-1), ..., U_{Np}^(m-1)}, {U₀^(m-2), U₁^(m-2), U₂^(m-2), ..., U_{Np}^(m-2)}, ...}, employing a single timestep of size t_m - t_{m-1} = ht

```
U1stepMatrixt[m_] := (tt[0] = 0;
  tt[m] = tt[m - 1] + ht;
  uVectortm =
  LinearSolve[
    SparseArray[{Band[{1, 2}] → Table[Which[j = 0, 0., True, -Sfun[m, gammak]],
      {j, 0, Np - 1}], Band[{1, 1}] → Table[Which[j = 0, 1., j = Np, 1.,
      True, 1. + 2. * Sfun[m, gammak]], {j, 0, Np}], Band[{2, 1}] →
      Table[Which[j = Np - 1, 0., True, -Sfun[m, gammak]], {j, 0, Np - 1}]],
      Np + 1], Table[Which[j = 0, uL[tt[m]], j = Np, uR[tt[m]],
      True, GG[j, m, gammak]], {j, 0, Np}]])
```

U2stepsMatrixt[n] provides the solution $\{U_0^{(n)}, U_1^{(n)}, U_2^{(n)}, \dots, U_{N_p}^{(n)}\}$ at time t_n from the solutions $\{\{U_0^{(n-1)}, U_1^{(n-1)}, U_2^{(n-1)}, \dots, U_{N_p}^{(n-1)}\}, \{U_0^{(n-2)}, U_1^{(n-2)}, U_2^{(n-2)}, \dots, U_{N_p}^{(n-2)}\}, \dots\}$, employing two timesteps of size $(t_n - t_{n-1})/2 = ht/2 = hthalf$

```

U2stepsMatrixt[n_] := (
  hthalf = ht/2.;
  Do[tt[m] = tt[m-1] + hthalf;
    uVectorm =
      LinearSolve[
        SparseArray[{Band[{1, 2}] →
          Table[Which[j == 0, 0., True, -Sfun[m, gammak]], {j, 0, Np-1}],
          Band[{1, 1}] → Table[Which[j == 0, 1., j == Np, 1., True,
            1. + 2. * Sfun[m, gammak]], {j, 0, Np}], Band[{2, 1}] →
          Table[Which[j == Np-1, 0., True, -Sfun[m, gammak]], {j, 0, Np-1}]],
          Np+1], Table[Which[j == 0, uL[tt[m]], j == Np, uR[tt[m]],
            True, GG[j, m, gammak]], {j, 0, Np}]];
    Umatrix = Append[Umatrix, uVectorm],
    {m, n, n+1}
  ];
  Umatrix = Drop[Umatrix, -2];
  uVectorm)

```

uMsolutionFixedTimesteps[t,Δ] provides the full solution $\{U_0^{(m)}, U_1^{(m)}, U_2^{(m)}, \dots, U_{N_p}^{(m)}\}$ with $m=0,1,2,\dots,n$ for fixed timesteps of size Δ from $t=0$ to $t=t_n$ where $n=t_n/\Delta$. The full solution is stored in the matrix Umatrix so that its element $(1+m,1+j)$, i.e., Umatrix[[1+m,1+j]], gives $U_j^{(m)}$.

```

uMsolutionFixedTimesteps[t_, htFixed_] := Module[{numpasos},
  ht = htFixed;
  numpasos = Round[t / htFixed];
  Umatrix = {}; Umatrix = AppendTo[Umatrix, UmatrixIni];
  Do[
    Umatrix = Append[Umatrix, U1stepMatrixt[m]],
    {m, 1, numpasos}];
  Umatrix
]

```

uMsolutionTE[n,τ] provides the full solution $\{U_0^{(m)}, U_1^{(m)}, U_2^{(m)}, \dots, U_{N_p}^{(m)}\}$ with $m=0,1,2,\dots,n$ for variable timesteps whose size is determined by the *trial and error* (T&E) method for a tolerance τ . The full solution is stored in the matrix Umatrix so that its element $(1+m,1+j)$, i.e., Umatrix[[1+m,1+j]], gives $U_j^{(m)}$.

Some arbitrary parameters one has to choose:

- The initial timestep $\Delta_0 = \text{Delta0TE}$. Here is fixed to the arbitrary (but hardly relevant) value of 0.01
- The maximum value of the timestep, DeltatcapTE , one is ready to accept. Here we choose $\text{Deltatmax} = 10^6$ (the actual value could be somewhat larger). [When the solution goes towards zero, the absolute value of this solution will be smaller than the tolerance for times long enough. In this case, the condition $\mathcal{E}^{(n)} = \text{udif} < \text{tolerance}$ always holds and the search of ever-increasing timesteps would never end. Besides, to cap the size of the timesteps guarantees a minimum sampling of the solution.]

```
Delta0TE = 0.01; DeltatcapTE = 10.^6;
```

14 | Codes.v8.nb

```

uMsolutionTE[numpasos_, tolerance_] := (
  Umatrix = {}; Umatrix = AppendTo[Umatrix, UmatrixIni];
  ht = Delta0TE;
  Do[
    usingle = U1stepMatrixt[m];
    uhalf = U2stepsMatrixt[m];
    udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];
    If[udif < tolerance,
      While[
        ht < DeltatcapTE && udif < tolerance,
          ht = 2. * ht;
          usingle = U1stepMatrixt[m];
          uhalf = U2stepsMatrixt[m];
          udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];
        ];
      ht = ht/2.;
    ],
    While[
      udif > tolerance,
        ht = ht/2.;
        usingle = U1stepMatrixt[m];
        uhalf = U2stepsMatrixt[m];
        udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];
      ]
  ];
  usingle = U1stepMatrixt[m];
  uhalf = U2stepsMatrixt[m];
  udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];

  Umatrix = Append[Umatrix, U1stepMatrixt[m]],
  {m, 1, numpasos}];
Umatrix
)

```

`uMsolutionPredictive[n,τ]` provides the full solution $\{U_0^{(m)}, U_1^{(m)}, U_2^{(m)}, \dots, U_{N_p}^{(m)}\}$ with $m=0,1,2,\dots,n$ for variable timesteps whose size is determined by the *predictive* method for a tolerance τ . The full solution is stored in the matrix `Umatrix` so that its element $(1+m,1+j)$, i.e., `Umatrix[[1+m,1+j]]`, gives $U_j^{(m)}$.

Some arbitrary parameters one has to chose:

- The initial timestep $\Delta_0 = \text{Delta0Predictive}$. Here is fixed to the arbitrary (but hardly relevant) value of 0.01
- The maximum value of the timestep, `DeltatcapTE`, one is ready to accept. Here we choose `Deltatmax=106` (the actual value could be somewhat larger). [When the solution goes towards zero, the absolute value of this solution will be smaller than the tolerance for times long enough. In this case, the condition $\mathcal{E}^{(j)} = \text{udif} < \text{fac2} * \text{tolerance}$ always holds and the search of ever-increasing timesteps would never end. Besides, to cap the size of the timesteps guarantees a minimum sampling of the solution.]
- The under-relaxation parameter $\omega = \text{omegaParameter}$. Here we use $\omega = 1/2$.
- The scaling exponent $\theta = \text{thetaParameter}$. Here we use $\theta = 3/2$.

• The fac1 and fac2 parameters. The timestep is accepted if the difference $\mathcal{E}^{(n)} = \text{udif}$ is larger than $\text{fac1} * \text{tolerance}$ and smaller than $\text{fac2} * \text{tolerance}$. Here we use $\text{fac1} = 1/2$ and $\text{fac2} = 2$ [see Eq. (18)]

```
Delta0Predictive = 0.01; DeltatcapPredictive = 10.^6;
omegaParameter = 0.5; thetaParameter = 3./2.; fac1 = 0.5; fac2 = 2.;
```

```
uMsolutionPredictive[numpasos_, tolerance_] := (
  Umatrix = {}; Umatrix = AppendTo[Umatrix, UmatrixIni];
  ht = Delta0Predictive;
  Do[
    usingle = U1stepMatrixt[m];
    uhalf = U2stepsMatrixt[m];
    udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];
    While[
      ht < DeltatcapPredictive &&
      (udif < fac1 * tolerance || udif > fac2 * tolerance),
      ht = (1. - omegaParameter) * ht + omegaParameter * ht *
      (tolerance / udif)^(1. / thetaParameter);
      uhalf = U2stepsMatrixt[m];
      usingle = U1stepMatrixt[m];
      udif = Max[Abs[usingle - uhalf]];
    ];
    Umatrix = Append[Umatrix, U1stepMatrixt[m]],
    {m, 1, numpasos}];
  htVariableUltimo = ht;
  Umatrix
)
```

Next we will show different sets of parameters corresponding to different problems solved by means of the two former (T&E and Predictive) methods.

6.1. Parameters for the implicit LI method with variable timesteps when we consider the problem

$${}_0^C D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x,0) = \sin x.$$

Here we provide the parameters of the problem

Parameter: $K_\gamma = Kg = 1$

```
Kg = 1.;
```

Source term. In this example is zero.

```
funSource[x_, t_, ga_] := 0.
```

Order of the fractional derivative: $\gamma = \text{gammak}$. Here we choose $\gamma = 1/4$

```
gammak = 0.25;
```

Spatial discretization: $\Delta x = \text{deltax} = \text{Pi}/\text{Np}$ where, in this case, we choose $\text{Np} = 2\text{Nx} = 40$

```
Nx = 20; Np = 2 * Nx; deltax = Pi / (2. * Nx);
```

We set the initial condition: $U^{(0)} = \text{UmatrixIni}$

```
UmatrixIni = Table[ Sin[j * deltax] , {j, 0, Np}] // N
```

Boundary conditions: $u(x=0,t) = uL[t] = 0$; $u(x=\pi,t) = uR[t] = 0$.

```
uL[t_] = 0.;  
uR[t_] = 0.;
```

We will consider tolerance $\tau = 0.001$ for both T&E and Predictive methods:

```
tolerance = 0.001;
```

6.2. Parameters for the implicit LI method with variable timesteps when we consider the problem

$${}_0^C D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x,0) = \frac{4x}{\pi} \left(1 - \frac{x}{\pi}\right)$$

Parameter: $K_\gamma = K_g = 1$

```
Kg = 1. ;
```

Source term. In this example is zero.

```
funSource[x_, t_, ga_] := 0.
```

Order of the fractional derivative: $\gamma = \text{gammak}$. Here we choose $\gamma = 1/4$

```
gammak = 0.25;
```

Spatial discretization: $\Delta x = \text{deltax} = \text{Pi}/\text{Np}$ where, in this case, we choose $\text{Np} = 2\text{Nx} = 40$

```
Nx = 20; Np = 2 * Nx; deltax = Pi / (2. * Nx);
```

We set the initial condition: $U^{(0)} = \text{UmatrixIni}$

```
UmatrixIni = Table[(4 * j * deltax / Pi) * (1 - j * deltax / Pi), {j, 0, Np}] // N
```

Boundary conditions: $u(x=0,t) = uL[t] = 0$; $u(x=\pi,t) = uR[t] = 0$.

```
uL[t_] = 0. ;  
uR[t_] = 0. ;
```

We will consider tolerance $\tau = 0.001$ for both T&E and Predictive methods:

```
tolerance = 0.001;
```


6.3. Parameters for the implicit LI method with variable timesteps when we consider the problem

$${}_0^c D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \left[1 + \frac{\Gamma(1+p)t^{-\gamma}}{\Gamma(1+p-\gamma)} \right] at^p \sin x, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x,0) = \sin x.$$

Here we provide the parameters of the problem

Parameters: $K_\gamma = Kg = 1$, $\nu = nu = 2 * \text{Pi}$; $a = aParameter = 1/10$; $p = pParameter$

```
Kg = 1. ; aParameter = 20 ; pParameter = 20
```

Source term:

$$\left[1 + \frac{\Gamma(1+p)t^{-\gamma}}{\Gamma(1+p-\gamma)} \right] at^p \sin x$$

```
funSource[x_, t_, ga_] := aParameter * t^pParameter *  
(1 + Gamma[1 + pParameter] * t^(-ga) / Gamma[1 + pParameter - ga]) * Sin[x]
```

Order of the fractional derivative: $\gamma = \text{gammak}$. Here we choose $\gamma = 1/4$

```
gammak = 0.25;
```

Spatial discretization: $\Delta x = \text{deltax} = \text{Pi} / \text{Np}$ where, in this case, we choose $\text{Np} = 2 * \text{Nx} = 40$

```
Nx = 20 ; Np = 2 * Nx ; deltax = Pi / (2. * Nx) ;
```

We set the initial condition: $U^{(0)} = \text{UmatrixIni}$

```
UmatrixIni = Table[ Sin[j * deltax] , {j, 0, Np} ] // N
```

Boundary conditions: $u(x=0,t) = uL[t] = 0$; $u(x=\pi,t) = uR[t] = 0$.

```
uL[t_] = 0. ;  
uR[t_] = 0. ;
```

We will consider tolerance $\tau = 0.001$ for both T&E and Predictive methods:

```
tolerance = 0.001;
```

6.4. Parameters for the implicit LI method with variable timesteps when we consider the problem

$${}^c D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + a[\sin(\nu t) + \nu^\gamma \sin(\nu t + \gamma \pi / 2)] \sin x, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(\pi,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x,0) = \sin x.$$

Here we provide the parameters of the problem

Parameters: $K_\gamma = K_g = 1$, $\nu = \text{nu} = 2 * \text{Pi}$; $a = \text{aParameter} = 1/10$

```
Kg = 1. ; nu = 2. * Pi ; aParameter = 0.1 ;
```

Source term:

$$a[\sin(\nu t) + \nu^\gamma \sin(\nu t + \gamma \pi / 2)] \sin x$$

```
funSource[x_, t_, ga_] :=  
  aParameter * (nu^ga * Sin[nu * t + ga * Pi / 2] + Sin[nu * t]) * Sin[x]
```

Order of the fractional derivative: $\gamma = \text{gammak}$. Here we choose $\gamma = 1/4$

```
gammak = 0.25 ;
```

Spatial discretization: $\Delta x = \text{deltax} = \text{Pi} / \text{Np}$ where, in this case, we choose $\text{Np} = 2 \text{Nx} = 40$

```
Nx = 20 ; Np = 2 * Nx ; deltax = Pi / (2. * Nx) ;
```

We set the initial condition: $U^{(0)} = \text{UmatrixIni}$

```
UmatrixIni = Table[ Sin[j * deltax] , {j, 0, Np} ] // N
```

Boundary conditions: $u(x=0,t) = uL[t] = 0$; $u(x=\pi,t) = uR[t] = 0$.

```
uL[t_] = 0. ;  
uR[t_] = 0. ;
```

We will consider tolerance $\tau = 0.001$ for both T&E and Predictive methods:

```
tolerance = 0.001 ;
```

6.5. Parameters for the implicit LI method with variable timesteps when we consider the problem

$${}_0^C D_t^\gamma u(x,t) = K_\gamma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \gamma < 1$$

$$CC : \begin{cases} u(0,t) = u_0 \\ u(L,t) = 0 \end{cases}$$

$$CI : u(x,0) = 0$$

Here we provide the parameters of the problem

Parameters: $K_\gamma=Kg=1$, $u_0=u0val=1$, $L=LL=4$, $M=Mvalue=8$

```
Kg = 1. ; u0value = 1. ; LL = 4. ; Mvalue = 8 ;
```

Source term. In this example is zero.

```
funSource[x_, t_, ga_] := 0.
```

Order of the fractional derivative: $\gamma=gammak$. Here we choose $\gamma=1/4$

```
gammak = 0.25 ;
gammaVal = Rationalize[gammak] ;
```

Spatial discretization: $\Delta x = \text{deltax} = \text{Pi}/\text{Np}$ where, in this case, we choose $\text{Np}=2\text{Nx}=40$

```
Nx = 20 ; Np = 2 * Nx ; deltax = LL / (2. * Nx) ;
```

We set the initial condition: $U^{(0)}=UmatrixIni$

```
UmatrixIni = Table[ Which[j == 0, u0value, j > 0, 0.], {j, 0, Np}]
```

Boundary conditions: $u(x=0,t)=uL[t]=u0val=1$; $u(x=\pi,t)=uR[t]=0$.

```
uL[t_] = u0value ;
uR[t_] = 0. ;
```

We will consider tolerance $\tau = 0.001$ for both T&E and Predictive methods:

```
tolerance = 0.001 ;
```


Bibliografía

- [1] J. M. Sánchez Muñoz, Génesis y desarrollo del Cálculo Fraccional, *Pensamiento Matemático*, **1**, 1, 2011.
- [2] G. Aguilar, El problema mecánico de Abel, *Miscelánea Matemática*, **24**, 1, 1996.
- [3] W. Center, On the value of $(d/dx)^\theta x^0$ when θ is a positive proper fraction, *Cambridge and Dublin Mathematical Journal*, **3**, 163, 1848.
- [4] H. Laurent, Sur le calcul des dérivées à indices quelconques, *Nouvelles Annales de Mathématiques*, **3**, 240, 1884.
- [5] M. Caputo, Linear model of dissipation whose Q is almost frequency independent II, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, **13**, 529, 1967.
- [6] K. B. Oldham y J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic Press, New York, 1974.
- [7] A. M. Mathai y H. J. Haubold, *Special Functions for Applied Scientists*, Springer, New York, 2008.
- [8] R. Metzler y J. Klafter, The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach, *Physics Reports*, **339**, 1, 2000.
- [9] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations*, Academic Press, New York, 1999.
- [10] C. Li y F. Zeng, Finite difference methods for fractional differential equations, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **22**, 1230014, 2012.
- [11] S. Shen y F. Liu, Error analysis of an explicit finite difference approximation for the space fractional diffusion equation with insulated ends, *ANZIAM Journal*, **46**, C871, 2005.

- [12] E. Sousa, How to approximate the fractional derivative of order $1 < \alpha \leq 2$, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **22**, 1250075, 2012.
- [13] I. Podlubny, Geometrical and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, **5**, 367386, 2002.
- [14] A. A. Kilbas, H. M. Srivastava y J. J. Trujillo, *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*, vol. 204, North Holland Mathematics Studies, Amsterdam, 2006.
- [15] J. Sabatier, O. P. Agrawal y J. A. Tenreiro Machado, editors. *Advanced in Fractional Calculus: Theoretical Developments and Applications in Physics and Engineering*, Springer, 2007.
- [16] F. Liu, V. Anh, I. Turner y P. Zhuang, Time fractional advection-dispersion equation, *Journal of Applied Mathematics and Computing*, **13**, 233, 2003.
- [17] F. Liu, V. Anh y I. Turner, Numerical solution of the space fractional Fokker-Planck equation, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **166**, 209, 2004.
- [18] M. Ciesielski y J. Leszczynski, Numerical solutions of a boundary problem for the anomalous diffusion equation with the Riesz fractional derivative, *16th International Conference on Computer Methods in Mechanics*, Czestochowa, Polonia, 21-24 de junio, 2005.
- [19] L. Vázquez y M. Velasco, El Cálculo Fraccionario como instrumento de modelización, *Memorias del Instituto de España*, Tomo Cálculo Fraccionario y Fractales, 5, 2011.
- [20] S. B. Yuste y K. Lindenberg, Trapping reactions with subdiffusive traps and particles characterized by different anomalous diffusion exponents, *Physical Review E*, **72**, 061103, 2005.
- [21] S. B. Yuste, J. J. Ruiz-Lorenzo y K. Lindenberg, Target problem with evanescent subdiffusive traps, *Physical Review E*, **74**, 046119, 2006.
- [22] S. B. Yuste y K. Lindenberg, Subdiffusive target problem: survival probability, *Physical Review E*, **76**, 051114, 2007.
- [23] M. M. Meerschaert y E. Scalas, Coupled continuous time random walks in Finance, *Physica A*, **370**, 114, 2006.

- [24] M. G. Hall y T. R. Barrica, From diffusion-weighted MRI to anomalous diffusion imaging, *Magnetic Resonance in Medicine*, **59**, 447, 2008.
- [25] E. Cuesta, A. Durán y M. Kirane, On evolutionary integral models for image restoration, *Developments in Medical Image Processing and Computational Vision*, **19**, 241, 2015.
- [26] T. A. M. Langlands, B. I. Henry y S. L. Wearne, Fractional cable equation models for anomalous electrodiffusion in nerve cells: infinite domain solutions, *Journal of Mathematical Biology*, **59**, 761, 2009.
- [27] B. I. Henry, T. A. M. Langlands y S. L. Wearne, Fractional cable models for spiny neuronal dendrites, *Physical Review Letters*, **100**, 128103, 2008.
- [28] B. M. Vinagre, I. Podlubny y V. Feliu-Batlle, Some approximations of fractional order operators used in control theory and applications, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, **3**, 231, 2000.
- [29] B. M. Vinagre y C. Monje, Introducción al Control Fraccionario, *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial*, **3**, 5, 2006.
- [30] C. Monje, Y. Chen, B. M. Vinagre, D. Xue y V. Feliu-Batlle, *Fractional-order Systems and Controls: Fundamentals and Applications*, Springer, London, 2010.
- [31] J. Klafter, S. C. Lim y R. Metzler, *Fractional Dynamics: recent advances*, World Scientific, Singapore, 2011.
- [32] J. Klafter, N. J. Ford, A. D. Freed y Y. Luchko, Algorithms for the Fractional Calculus: a selection of numerical methods, *Computer Methods for Mechanical Engineering*, **194**, 743, 2005.
- [33] G. Pfister y H. Scher, Time-dependent electrical transport in amorphous solids: As_2Se_3 , *Physical Review B*, **15**, 2062, 1977.
- [34] W. G. Glöckle y T. F. Nonnenmacher, Fractional integral operators and Fox functions in the theory of viscoelasticity, *Macromolecules*, **24**, 6426, 1991.
- [35] W. G. Glöckle y T. F. Nonnenmacher, A fractional calculus approach to self-similar protein dynamics, *Biophysical Journal*, **68**, 46, 1995.
- [36] R. Kimmich, *NMR: Tomography, Diffusometry, Relaxometry*, Springer, Berlin, 1997.

- [37] H. Yang, G. Luo, P. Karnchanaphanurach, T. M. Louie, I. Rech, S. Cova, L. Xun y X. S. Xie, Protein conformational dynamics probed by single-molecule electron transfer, *Science*, **302**, 262, 2003.
- [38] F. Mainardi, M. Raberto, R. Gorenflo y E. Scalas, Fractional calculus and continuous-time finance II: the waiting-time distribution, *Physica A*, **287**, 468, 2000.
- [39] M. Porto, A. Bunde, S. Havlin y H. E. Roman, Structural and dynamical of the percolation backbone in two and three dimensions, *Physical Review E*, **56**, 1667, 1997.
- [40] L. Vázquez, From Newton's equation to fractional diffusion and wave equations, *Advances in Difference Equations*, **2011**, 169421, 2011.
- [41] E. Barkai y J. Klafter, Comment on subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in actin networks, *Physical Review Letters*, **81**, 1134, 1998.
- [42] M. F. Schlesinger, B. J. West y J. Klafter, Lévy dynamics of enhanced diffusion: application to turbulence, *Physical Review Letters*, **58**, 1100, 1987.
- [43] H. Bulut, H. M. Baskonus y F. B. M. Belgacem, The analytical solution of some fractional ordinary differential equations by the Sumudu transform method, *Abstract and Applied Analysis*, **2013**, 203875, 2013.
- [44] M. Garg y P. Manohar, Analytical solution of space-time fractional Fokker Planck equations by generalized differential transform method, *Le Matematiche*, **LXVI**, 91, 2011.
- [45] G. Adomian, A review of the decomposition method in applied Mathematics, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **135**, 501, 1988.
- [46] S. S. Ray, Exact solutions for time-fractional diffusion-wave equations by decomposition method, *Physica Scripta*, **75**, 53, 2007.
- [47] C. Lubich, Discretized fractional calculus, *SIAM Journal of Mathematical Analysis*, **17**, 704, 1986.
- [48] K. Diethelm, An algorithm for the numerical solution of differential equations of fractional order, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, **5**, 1, 1997.

- [49] N. J. Ford y J. A. Connolly, Comparison of numerical methods for fractional differential equations, *Communications on Pure and Applied Analysis*, **5**, 289, 2006.
- [50] M. Benchohra, S. Hamani y S. K. Ntouyas, Boundary value problems for differential equations with fractional order and nonlocal conditions, *Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications*, **71**, 2391, 2009.
- [51] N. J. Ford y M. L. Morgado, Fractional boundary value problems: Analysis and numerical methods, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, **14**, 554, 2011.
- [52] M. Stynes y J. L. Gracia, A finite difference method for a two-point boundary value problem with a Caputo fractional derivative, *Journal of Numerical Analysis*, **35**, 698, 2014.
- [53] K. Diethelm, N. J. Ford y A. D. Freed, A predictor-corrector approach for the numerical solution of fractional differential equations, *Nonlinear Dynamics*, **29**, 3, 2002.
- [54] R. Garrappa, Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects, *Mathematics and Computers in Simulation*, **110**, 96, 2015.
- [55] B. Ahmad y J. J. Nieto, Existence results for a coupled system of nonlinear fractional differential equations with three-point boundary conditions, *Computers & Mathematics with Applications*, **58**, 1838, 2009.
- [56] F. Mainardi, A. Mura, G. Pagnini y R. Gorenflo, Time fractional diffusion of distributed order, *Journal of Vibration and Control*, **14**, 1267, 2008.
- [57] M. Bonforte y J. L. Vázquez, A priori estimates for fractional nonlinear degenerate diffusion equations on bounded domains, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **218**, 317, 2015.
- [58] S. B. Yuste, *Métodos Matemáticos Avanzados para Científicos e Ingenieros*, Universidad de Extremadura, Cáceres, 2006.
- [59] Q. Yang, *Novel Analytical and Numerical Methods for Solving Fractional Dynamical Systems*, Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy in the Faculty of Science and Technology, Queensland University of Technology, 2010.

- [60] R. Hilfer, Editor, *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, Singapur, 2000.
- [61] M. Ciesielski y J. Leszczynski, Numerical simulations of anomalous diffusion, *Proceedings of the 15th Conference on Computer Methods in Mechanics*, Wisla, Polonia, *Preprint arXiv:math-ph/0309007v1*, 2003.
- [62] S. B. Yuste, Weighted average finite difference methods for fractional diffusion equations, *Journal of Computational Physics*, **216**, 264, 2006.
- [63] Y. Lin y C. Xu, Finite difference/spectral approximations for the time fractional diffusion equation, *Journal of Computational Physics*, **225**, 1533, 2007.
- [64] E. Sousa, On the edge of stability analysis, *Applied Numerical Mathematics*, **59**, 1322, 2009.
- [65] R. Gorenflo, F. Mainardi, D. M. Cribisnet y P. Paradisi, Time fractional diffusion: a discrete random walk approach, *Nonlinear Dynamics*, **29**, 129, 2002.
- [66] S. B. Yuste y L. Acedo, An explicit finite difference method and a new Von Neumann-type stability analysis for fractional diffusion equations, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **42**, 1862, 2005.
- [67] F. Liu, S. Shen, V. Anh y I. Turner, Analysis of a discrete non-Markovian random walk approximation for the time fractional diffusion equation, *ANZIAM Journal*, **46**, 488, 2005.
- [68] F. Liu, P. Zhuang, V. Anh y I. Turner, A fractional-order implicit difference approximation for the space-time fractional diffusion equation, *ANZIAM Journal*, **47**, C48, 2006.
- [69] M. M. Meerschaert y C. Tadjeran, Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **172**, 65, 2004.
- [70] M. M. Meerschaert y C. Tadjeran, Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations, *Applied Numerical Mathematics*, **56**, 80, 2006.
- [71] S. Shen y F. Liu, Error analysis of an explicit finite difference approximation for the space fractional diffusion equation with insulated ends, *ANZIAM Journal*, **46**, 871, 2005.

- [72] S. B. Yuste y J. Quintana Murillo, On three explicit difference schemes for fractional diffusion and diffusion-wave equations, *Physica Scripta*, **T136**, 014025, 2009.
- [73] S. B. Yuste y J. Quintana Murillo, An explicit difference method for solving fractional diffusion and diffusion-wave equations in the Caputo form, *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*, **6**, 021014, 2011.
- [74] J. Quintana-Murillo y S. B. Yuste, An explicit numerical method for the fractional cable equation, *International Journal of Differential Equations*, **2011**, 231920, 2011.
- [75] R. Gorenflo y E. A. Abdel-Rehim, Convergence of the Grünwald-Letnikov scheme for time-fractional diffusion, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **205**, 871, 2007.
- [76] T. A. M. Langlands y B. I. Henry, The accuracy and stability of an implicit solution method for the fractional diffusion equation, *Journal of Computational Physics*, **205**, 719, 2005.
- [77] S. Shen, F. Liu, V. Anh y I. Turner, The fundamental solution and numerical solution of the Riesz fractional advection-dispersion equation, *IMA Journal of Applied Mathematics*, **73**, 850, 2005.
- [78] C. Chen, F. Liu, I. Turner y V. Anh, A Fourier method for the fractional diffusion equation describing sub-diffusion, *Journal of Computational Physics*, **227**, 886, 2007.
- [79] C. Chen, F. Liu, P. Zhuang y V. Anh, Finite difference approximations for the fractional Fokker-Planck equation, *Applied Mathematical Modelling*, **33**, 256, 2009.
- [80] P. Zhuang, F. Liu, V. Anh y I. Turner, Numerical treatment for the fractional Fokker-Planck equation, *ANZIAM Journal*, **48**, C759, 2007.
- [81] Z. Ding, A. Xiao y M. Li, Weighted finite difference methods for a class of space fractional partial differential equations with variable coefficients, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **233**, 1905, 2010.
- [82] X. Hu y L. Zhang, Implicit compact difference schemes for the fractional cable equation, *Applied Mathematical Modelling*, **36**, 4027, 2012.

- [83] G. H. Gao y Z. Z. Sun, A compact finite difference scheme for the fractional sub-diffusion equations, *Journal of Computational Physics*, **230**, 586, 2011.
- [84] G. H. Gao, Z. Z. Sun y H. W. Zhang, A new fractional numerical differentiation formula to approximate the Caputo fractional derivative and its applications, *Journal of Computational Physics*, **259**, 33, 2014.
- [85] I. Podlubny, A. Chechkin, T. Skovranek, Y. Q. Chen y B. M. Vinagre Jara, Matrix approach to discrete Fractional Calculus II: Partial Fractional Differential Equations, *Journal of Computational Physics*, **228**, 3137, 2009.
- [86] I. Podlubny, T. Skovranek, B. M. Vinagre Jara, I. Petras, V. Verbitsky y Y. Chen, Matrix approach to discrete Fractional Calculus III: non-equidistant grids, variable step length and distributed orders, *Philosophical Transactions. Series A, Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **371**, 1, 2013.
- [87] K. Mustapha, An implicit finite-difference time-stepping method for a sub-diffusion equation, with spatial discretization by finite elements, *IMA Journal of Numerical Analysis*, **30**, 1, 2011.
- [88] K. Mustapha y J. AlMutawa, A finite difference method for an anomalous sub-diffusion equation, theory and applications, *Numerical Algorithms*, **61**, 525, 2012.
- [89] R. Klages, G. Radons y I. M. Sokolov, Eds., *Anomalous Transport: Foundations and Applications*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2008.
- [90] A. A. Kilbas, T. Pierantozzi, J. J. Trujillo y L. Vázquez, On the solution of fractional evolution equations, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **37**, 3271, 2004.
- [91] R. L. Magin, O. Abdullah, D. Baleanu y X. J. Zhou, Anomalous diffusion expressed through fractional order differential operators in the Bloch-Torrey equation, *Journal of Magnetic Resonance*, **190**, 255, 2008.
- [92] D. Baleanu, Fractional variational principles in action, *Physica Scripta*, **T136**, 014006, 2009.
- [93] R. Metzler y J. Klafter, The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics, *Journal of Physics A*, **37**, R161, 2004.

- [94] S. B. Yuste, E. Abad y K. Lindenberg, A reaction-subdiffusion model of morphogen gradient formation, *Physical Review E*, **82**, 061123, 2010.
- [95] J. A. Dix y A. S. Verkman, Crowding effects on diffusion in solutions and cells, *Annual Review of Biophysics*, **37**, 247, 2008.
- [96] I. Y. Wong, M. L. Gardel, D. R. Reichman et al., Anomalous diffusion probes microstructure dynamics of entangled F-actin networks, *Physical Review Letters*, **92**, 178101, 2004.
- [97] J. H. Jeon, V. Tejedor, S. Burov et al., In vivo anomalous diffusion and weak ergodicity breaking of lipid granules, *Physical Review Letters*, **106**, 048103, 2011.
- [98] S. Momani, A. Odibat y V. S. Erturk, Generalized differential transform method for solving a space- and time-fractional diffusion-wave equation, *Physics Letters A*, **370**, 379, 2007.
- [99] H. Jafari y S. Momani, Solving fractional diffusion and wave equations by modified homotopy perturbation method, *Physics Letters A*, **370**, 388, 2007.
- [100] A. M. A. El-Sayed y M. Gaber, The Adomian decomposition method for solving partial differential equations of fractal order in finite domains, *Physics Letters A*, **359**, 175, 2006.
- [101] E. Barkai, Fractional Fokker-Planck equation, solution, and application, *Physical Review E*, **63**, 046118, 2001.
- [102] M. Enelund y G. A. Lesieutre, Time domain modeling of damping using anelastic displacement fields and fractional calculus, *International Journal of Solids and Structures*, **36**, 4447, 1999.
- [103] G. J. Fix y J. P. Roop, Least squares finite-element solution of a fractional order two-point boundary value problem, *Computers & Mathematics with Applications. An International Journal*, **48**, 1017, 2004.
- [104] Y. Zheng, C. Li y Z. Zhao, A note on the finite element method for the space-fractional advection diffusion equation, *Computers & Mathematics with Applications*, **59**, 1718, 2010.
- [105] Y. Zheng, C. Li y Z. Zhao, A fully discrete discontinuous Galerkin method for nonlinear fractional Fokker-Planck equation, *Mathematical Problems in Engineering*, **2010**, 279038, 2010.

- [106] P. Zhuang, F. Liu, V. Anh y I. Turner, New solution and analytical techniques of the implicit numerical method for the anomalous subdiffusion equation, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **46**, 1079, 2008.
- [107] F. Liu, Q. Yang y I. Turner, Stability and convergence of two new implicit numerical methods for the fractional cable equation, *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*, **6**, 01109, 2011.
- [108] A. M. Mathai y R. K. Saxena, *The H-Function with Applications in Statistics and Other Disciplines*, John Wiley & Sons, New York, 1978.
- [109] M. Cui, Compact finite difference method for the fractional diffusion equation, *Journal of Computational Physics*, **228**, 7792, 2009.
- [110] S. B. Yuste y L. Acedo, Some exact results for the trapping of subdiffusive particles in one dimension, *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, **336**, 334, 2004.
- [111] K. W. Morton y D. F. Mayers, *Numerical Solution of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [112] W. Deng, Short memory principle and a predictor-corrector approach for fractional differential equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **206**, 174, 2007.
- [113] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of their Solution and some of their Applications*, 1st Edition, Academic Press, San Diego, 1999.
- [114] N. Ford y A. Simpson, The numerical solution of fractional differential equations: Speed versus accuracy, *Numerical Algorithms*, **26**, 333, 2001.
- [115] T. Skovranek, V. V. Verbickij, Y. Tarte y I. Podlubny, Discretization of fractional order operators and fractional differential equations on a non-equidistant mesh, Article no. FDA10-062, edited by I. Podlubny, B.M. Vinagre Jara, YQ. Chen, V. Feliu Batlle, I. Tejado Balsera, *Proceedings of FDA10 (The 4th IFAC Workshop Fractional Differentiation and its Applications, Badajoz, 2010)*, 18, 2010.
- [116] K. Mustapha y W. McLean, Piecewise-linear discontinuous Galerkin method for a fractional diffusion equation, *Numerical Algorithms*, **56**, 159, 2011.

- [117] F. Ikeda, A numerical algorithm of discrete Fractional Calculus by using inhomogeneous sampling data, *Transactions of the Society of Instrument and Control Engineers*, **E-6**, 1, 2007.
- [118] E. Cuesta, C. Lubich y C. Palencia, Convolution quadrature time discretization of fractional diffusion-wave equations, *Mathematics of Computation*, **75**, 673, 2006.
- [119] S. B. Yuste y J. Quintana-Murillo, A finite difference method with non-uniform timesteps for fractional diffusion equations, *Computer Physics Communications*, **183**, 2594, 2012.
- [120] J. Quintana-Murillo y S. B. Yuste, A finite difference method with non-uniform timesteps for fractional diffusion and diffusion-wave equations, *European Physics Journal Special Topics*, **222**, 1987, 2013.
- [121] S. B. Yuste y J. Quintana-Murillo, Fast, accurate and robust adaptive finite difference methods for fractional diffusion equations, *Numerical Algorithms*, **69**, 1, 2015.
- [122] R. J. LeVeque, *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*, SIAM, Philadelphia, 2007.
- [123] Y. N. Zhang, Z. Z. Sun y H. L. Liao, Finite difference methods for the time fractional diffusion equation on non-uniform meshes, *Journal of Computational Physics*, **265**, 195, 2014.
- [124] D.A. Murio, Implicit finite difference approximation for time fractional diffusion equations, *Computers & Mathematics with Applications*, **56**, 1138, 2008.
- [125] G. Allaire, *Numerical Analysis and Optimization: An Introduction to Mathematical Modelling and Numerical Simulation*, Oxford University Press, New York, 2007.
- [126] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, 3rd Edition*, Cambridge University Press, New York, 2007.
- [127] C. W. Gear, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- [128] A. Mathai y R. Saxena, *The H-Function with Applications in Statistics and other Disciplines*, Wiley, New York, 1978.

- [129] H. S. Carslaw, J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, Oxford, 1959.