

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS MATEMÁTICAS

DEPARTAMENTO DE ANÁLISIS MATEMÁTICO Y MATEMÁTICA APLICADA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Estudio numérico de la ecuación de difusión fraccionaria en tiempo

Numerical study of the fractional time diffusion equation

Supervisores: Raúl Ferreira y Félix del Teso

Lucas Rincón de la Rosa

Doble grado en Matemáticas y Física

Curso académico 2021-22

Convocatoria Julio

Resumen:

El objetivo principal de este trabajo será el estudio de la ecuación de difusión fraccionaria en tiempo, para lo que se ha hecho uso de la definición de Caputo. En la primera parte del trabajo se desarrolla el esquema numérico discretizando la derivada fraccionaria, conocido como esquema L1 y se demuestran propiedades como la estabilidad, consistencia y convergencia del método para soluciones clásicas. El principal resultado es que el error del método es del orden de $\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha})$ para soluciones suficientemente regulares, donde α es el orden de la derivada fraccionaria. Una vez hecho esto, se dedican dos secciones añadiendo la discretización en espacio y desarrollando dos métodos: implícito y explícito. Este último se terminará por descartar del estudio numérico debido a que la condición de CFL que surge en el estudio de la consistencia es demasiado restrictiva. También se hará un estudio sobre las propiedades de las soluciones débiles del problema. Por último, se dedica una sección al estudio numérico del método implícito usando ejemplos de soluciones tanto regulares como no regulares, con el objetivo de comprobar que los errores que se obtienen son los deseados.

Abstract:

The main objective of this work is the study of the fractional time diffusion equation. The Caputo fractional derivative will be used for this purpose. In the first part of the study a time scheme discretization will be applied to the fractional derivative, known as L1 scheme, and properties such as stability, consistency and convergence will be studied for classical solutions. The main result is the $\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha})$ error for solutions with adequate regularity, where α is the order of the fractional derivative. Later, in the next two sections the space discretization will be added, so we end up with two different schemes: implicit and explicit. The last one will be dismissed as the CFL consistency condition is too restrictive. Closing the theoretical study, the next section is dedicated to weak solutions of the problem. Finally, last section is centered in the numerical study of the implicit scheme, using example solutions with and without sufficient regularity as to test if the errors are the ones derived from theory.

Índice

1. Introducción	4
1.1. Derivada fraccionaria de Caputo	4
1.2. Ecuación del calor fraccionaria en tiempo	5
2. Esquema L1 semidiscreto	6
2.1. Discretización en tiempo	6
2.2. Existencia y unicidad	9
2.3. Estabilidad	9
2.4. Consistencia	10
2.5. Convergencia	15
3. Esquema L1 implícito	19
3.1. Discretización en espacio	19
3.2. Existencia y unicidad	20
4. Esquema L1 explícito	21
4.1. Discretización	21
4.2. Existencia y unicidad	22
4.3. Estabilidad	22
5. Esquema L1 para soluciones débiles	24
5.1. Introducción	24
5.2. Existencia y unicidad	24
5.3. Estabilidad	25
5.4. Convergencia	26
6. Estudio numérico	31
6.1. Solución exacta	31
6.2. Solución C^2 en tiempo	33
6.3. Ejemplo 1: solución regular	33
6.4. Ejemplo 2: solución no regular	35
A. Transformada de Laplace	37
B. Formulación débil de un problema de contorno	43
B.1. Existencia y unicidad de soluciones débiles	45
C. Códigos	48

1. Introducción

El uso de las ecuaciones diferenciales parciales fraccionarias (EDPF) en el ámbito de las matemáticas y la física es cada vez más frecuente. En general, encontramos dos tipos de EDPF: fraccionarias en tiempo o fraccionarias en espacio. En este trabajo nos centraremos en la primera de ellas, donde tomaremos la ecuación de difusión (ecuación del calor) y sustituiremos la derivada primera en tiempo por una derivada fraccionaria de orden $0 < \alpha < 1$. Esto lo haremos en la sección 2, donde se definirá la derivada fraccionaria de Caputo y se presentará el problema de contorno a tratar. Para poder obtener un método numérico debemos de discretizar la ecuación en tiempo y espacio. Para la discretización en espacio no será ninguna sorpresa que se hará uso de las diferencias finitas centradas para el laplaciano (en una dimensión). En la sección 3 se desarrollará el esquema L1 para la discretización en tiempo. Este esquema es muy conocido en el ámbito de las EDPF, generalmente cuanto se usa la definición de Caputo para la derivada fraccionaria.

Puesto que la derivada fraccionaria hace uso de la definición de Caputo, los resultados sobre el análisis numérico del método para la ecuación de difusión local no se pueden aplicar. Por ello, uno de los objetivos principales de este trabajo consistirá en encontrar una cota de error para el esquema numérico.

Una vez analizado el esquema L1 semidiscreto (discretizando únicamente en tiempo) en las secciones 4 y 5 se introducirá la discretización en espacio, de manera que se desarrolle un método numérico completo. En función de cómo se discretice, terminaremos con un esquema implícito o explícito. Al igual que en la sección anterior, se hará un análisis numérico para ambos métodos.

El análisis numérico hecho en las secciones anteriores para los distintos esquemas se centra en las soluciones clásicas del problema. En la sección 6 se hará un breve estudio de las soluciones débiles, haciendo uso de las demostraciones de las secciones anteriores.

Por último, se programará en *Matlab* el método implícito, probando con distintos pasos del mallado para comprobar la convergencia del método. Además, se usarán distintos ejemplos de soluciones para estudiar el comportamiento de la ecuación en función de la regularidad.

1.1. Derivada fraccionaria de Caputo

En este capítulo se dará la definición formal de la derivada fraccionaria de Caputo (1), así como ciertas propiedades importantes como pueden ser la comprobación de su existencia y la regla de Leibniz.

Definición 1.1 (Derivada fraccionaria de Caputo) Sean $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$, $\alpha > 0$ y $n = \lfloor \alpha \rfloor + 1$ y sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función de clase C^n tal que $F^{(n)}$ es integrable en el intervalo $[0, x]$. Se define la derivada fraccionaria de Caputo de orden α de la función f como:

$$D_C^\alpha[f(x)] := \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_0^x (x - t)^{n - \alpha - 1} f^{(n)}(t) dt$$

donde $f^{(n)}(t)$ es la n -ésima derivada usual de la función f , $\Gamma(\cdot)$ es la función Gamma de Euler (2) y $\lfloor \cdot \rfloor$ es la función parte entera aproximando al natural inferior.

Teorema 1.1 *La derivada fraccionaria de Caputo de orden α dada en 1.1 coincide con la derivada usual m -ésima para $\alpha \rightarrow m^-$.*

Demostración. Basta notar que si $\alpha \rightarrow m^-$, por cómo se ha definido la derivada fraccionaria, se tiene que $n = \lfloor \alpha \rfloor + 1 = m$ tal que:

$$\lim_{\alpha \rightarrow m^-} D_C^\alpha[f(x)] = \lim_{\alpha \rightarrow m^-} \left(\frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^x (x-t)^{m-\alpha-1} f^{(m)}(t) dt \right),$$

y podemos resolverla por partes, integrando el término $(x-t)$ y derivando $f^{(m)}$:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow m^-} D_C^\alpha[f(x)] &= \lim_{\alpha \rightarrow m^-} \left(- \frac{f^{(m)}(t)}{\Gamma(m-\alpha)} \cdot \frac{(x-t)^{m-\alpha}}{m-\alpha} \Big|_0^x + \int_0^x \frac{(x-t)^{m-\alpha}}{(m-\alpha)\Gamma(m-\alpha)} \cdot m f^{(m-1)} dt \right) \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow m^-} \left(\frac{f^{(m)}(0) \cdot x^{m-\alpha}}{\Gamma(m-\alpha+1)} + \frac{m}{\Gamma(m-\alpha+1)} \int_0^x (x-t)^{m-\alpha} \cdot f^{(m-1)} dt \right) \\ &= f^{(m)}(0) + m \int_0^x f^{(m-1)} dt = f^{(m)}(x). \end{aligned}$$

□

1.2. Ecuación del calor fraccionaria en tiempo

Se considera el problema de contorno formado por la ecuación de difusión en tiempo fraccionario dado por:

$$\begin{cases} D_C^\alpha u(x, t) - \Delta u(x, t) = f(x, t), & x \in \Omega \quad 0 \leq t \leq T \\ u(x, t) = 0, & x \in \partial\Omega \quad 0 \leq t \leq T \\ u(x, 0) = g(x), & x \in \Omega \end{cases} \quad (1)$$

donde Ω es un dominio conexo cerrado en \mathbb{R}^d con frontera $\partial\Omega$ y $T > 0$ es un valor fijo. D_C^α es la derivada fraccionaria por la izquierda de Caputo, que tal como la hemos definido es:

$$D_C^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u(x, s)}{\partial s} \cdot \frac{ds}{(t-s)^\alpha},$$

donde $\Gamma(\cdot)$ es la función Gamma de Euler. En este caso supondremos una derivada del orden $0 < \alpha < 1$.

2. Esquema L1 semidiscreto

El esquema L1 (3) es uno de los más conocidos para discretizar la derivada fraccionaria de Caputo en tiempo. Es importante hacer notar esto. La idea desde el principio es estudiar la ecuación de difusión fraccionaria en tiempo, de manera que a la hora de hacer un tratamiento discreto del problema, tendremos que considerar un mallado temporal y otro espacial. Así, el esquema semi-discreto es el que surge de hacer la discretización temporal (que solo aparece en la derivada de Caputo, el otro término es el Laplaciano espacial).

Notación: dada $u(x, t)$ la solución exacta del problema de contorno 1, llamaremos U_i^j a la aproximación numérica de $u(x_i, t_j)$ para x_i, t_j puntos del mallado correspondiente. Puesto que por ahora sólo se va a trabajar con la discretización en tiempo, podemos obviar la dependencia en espacio de manera que $u(x, t_j) = u(t_j)$ y U^j denotará la solución del esquema.

2.1. Discretización en tiempo

Para esta parte supondremos la ecuación diferencial homogénea, es decir, $f \equiv 0$. Como hemos indicado, pasamos a discretizar en tiempo. La definición de Caputo para la derivada fraccionaria incluye una derivada primera (usual) en tiempo. Para poder discretizarla, lo primero que se hace es aproximar la derivada con el esquema *forward* (4). Para poder sacar este valor de la integral, se asumirá que es constante tomando el valor inferior del intervalo. Sea pues el mallado temporal dado por:

$$\mathcal{M} = \{t_n = n\tau, n = 0, \dots, N : \tau = T/N\},$$

donde se dispone de $N + 1$ puntos y N intervalos. Para todo $0 < n < N$ (puntos interiores), dividimos la integral en una suma finita e introducimos la discretización. Entrando en la derivada fraccionaria de Caputo obtenemos:

$$\begin{aligned} D_C^\alpha u(x, t_{n+1}) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{\partial u(x, s)}{\partial s} \frac{ds}{(t_{n+1}-s)^\alpha} \\ &\sim \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{ds}{(t_{n+1}-s)^\alpha} \\ &= L^\alpha U^{n+1}. \end{aligned}$$

La integral definida la podemos resolver de forma exacta:

$$\begin{aligned} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{ds}{(t_{n+1}-s)^\alpha} &= - \left. \frac{(t_{n+1}-s)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{t_j}^{t_{j+1}} = \frac{1}{1-\alpha} ((t_{n+1}-t_j)^{1-\alpha} - (t_{n+1}-t_{j+1})^{1-\alpha}) \\ &= \frac{\tau^{1-\alpha}}{1-\alpha} ((n+1-j)^{1-\alpha} - (n-j)^{1-\alpha}). \end{aligned}$$

donde en el último paso se ha usado que la diferencia entre dos puntos del mallado se puede expresar en función del paso de discretización. Para simplificar la notación, introducimos los *pesos de la discretización* como sigue:

$$b_j^n := (n+1-j)^{1-\alpha} - (n-j)^{1-\alpha}, \quad j = 0, \dots, n$$

Volviendo al desarrollo de la ecuación podemos escribir:

$$\begin{aligned}
 L^\alpha U^{n+1} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \\
 &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} \cdot \frac{\tau^{1-\alpha}}{1-\alpha} \cdot b_j^n \\
 &= \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U^{j+1} - U^j),
 \end{aligned}$$

donde se ha usado que $n\Gamma(n) = \Gamma(n+1)$ en el último paso.

Proposición 2.1 (Propiedades de los pesos) *Los pesos de la discretización cumplen las siguientes propiedades:*

1. $b_j^n > 0, \forall j = 0, 1, \dots, n$
2. $1 = b_n^n$ y $b_j^n < b_{j+1}^n, \forall j = 0, 1, \dots, n$
3. $\sum_{j=0}^n b_j^n = (n+1)^{1-\alpha}$
4. $b_0^n + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) = 1$

Demostración. Se demuestra cada apartado por separado.

1. Como $n \geq j$, cada sumando es positivo siempre. Teniendo en cuenta que $0 < \alpha < 1$, el exponente es positivo, de manera que el primer sumando es mayor que el segundo.
2. Para lo primero basta con sustituir. Para la segunda parte, nos damos cuenta que podemos escribir:

$$b_j^n = (n+1-j)^{1-\alpha} - (n-j)^{1-\alpha} = (n-j)^{1-\alpha} \cdot (2^{1-\alpha} - 1^{1-\alpha}) = (n-j)^{1-\alpha} \cdot b_{n-1}^n.$$

Como $0 < 1-\alpha < 1$, la función $x^{1-\alpha}$ es decreciente. Así, como $n \geq j$, $(n-j)^{1-\alpha}$ es creciente en j .

3. Nos damos cuenta que la suma es telescópica, de manera que se tiene:

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=0}^n b_j^n &= b_0^n + b_1^n + \dots + b_{n-1}^n + b_n^n \\
 &= (n+1)^{1-\alpha} - n^{1-\alpha} + n^{1-\alpha} - (n-1)^{1-\alpha} + \dots + 2^{1-\alpha} - 1 + 1 - 0 \\
 &= (n+1)^{1-\alpha}.
 \end{aligned}$$

4. La suma vuelve a ser telescópica, de manera que nos quedamos con el primer sumando del último término y con el segundo sumando del primer término:

$$\begin{aligned} b_0^n + \sum_{j=1}^n b_j^n - b_{j-1}^n &= b_0^n + b_1^n - b_0^n + b_2^n - b_1^n + \cdots + b_n^n - b_{n-1}^n \\ &= b_0^n - b_0^n + b_n^n \\ &= b_1^n = 1. \end{aligned}$$

□

Con esta notación, sea el operador definido por:

$$L^\alpha U^{n+1} := \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U^{j+1} - U^j),$$

tal que la ecuación de difusión semidiscreta toma la forma:

$$L^\alpha U(x, t_{n+1}) = \frac{\partial^2 U(x, t_{n+1})}{\partial x^2}. \quad (2)$$

Una vez tenemos esto, concluimos que el problema de contorno discretizado en tiempo es:

$$\begin{cases} L^\alpha U^{n+1}(x) = \frac{\partial^2 U^{n+1}(x)}{\partial x^2}, & x \in \Omega \quad 0 \leq n < N \\ U^n(x) = 0, & x \in \partial\Omega \quad 0 \leq n \leq N \\ U^0(x) = g(x), & x \in \Omega \end{cases} \quad (3)$$

La ecuación (2) la podemos desarrollar en función de si tenemos dos puntos en la malla o más. Así, un cálculo directo nos da:

$$n = 0: \quad U^1 - \beta \frac{\partial^2 U^1}{\partial x^2} = U^0. \quad (4)$$

Para el caso de $n \geq 1$ podemos desarrollar el operador para obtener una formulación análoga al caso $n = 0$, en el que tengamos las soluciones en tiempo $n + 1$ despejadas del resto:

$$\frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \left[b_n^n \cdot (U^{n+1} - U^n) + \sum_{j=0}^{n-1} b_j^n \cdot (U^{j+1} - U^j) \right] = \frac{\partial^2 U^{n+1}}{\partial x^2}.$$

Agrupando en mismos puntos del mallado, llegamos a:

$$\begin{aligned} b_n^n U^{n+1} - \tau^\alpha \Gamma(2-\alpha) \frac{\partial^2 U^{n+1}}{\partial x^2} &= b_n^n U^n - \sum_{j=0}^{n-1} b_j^n \cdot (U^{j+1} - U^j) \\ &= U^n (b_n^n - b_{n-1}^n) + b_0^n U^0 + \sum_{j=1}^{n-1} U^j \cdot (b_j^n - b_{j-1}^n) \\ &= b_0^n U^0 + \sum_{j=1}^n U^j \cdot (b_j^n - b_{j-1}^n). \end{aligned}$$

Llamando $\beta = \tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)$ y usando que $b_n^n = 1$, tenemos la siguiente expresión:

$$n > 0: \quad U^{n+1} - \beta \frac{\partial^2 U^{n+1}}{\partial x^2} = b_0^n U^0 + \sum_{j=1}^n U^j \cdot (b_j^n - b_{j-1}^n). \quad (5)$$

2.2. Existencia y unicidad

Teorema 2.1 (Existencia y unicidad de L1) *Para el esquema numérico definido en (3), existe una solución clásica siempre y cuando el dato inicial cumpla $g(x) \in C(\bar{\Omega})$ y $g \equiv 0$ en $\partial\Omega$. Además, esta solución es única.*

Demostración. Para el caso de $n = 0$ podemos tener que la ecuación del problema de contorno puede escribirse como en 4. Esto no es más que una ecuación diferencial de segundo orden de la forma:

$$A_0 y'' - y = -f,$$

donde A_0 es una constante e y es la solución que buscamos con $f = g$ la condición inicial. Puesto que $g(x) \in C(\bar{\Omega})$ por hipótesis, la solución de la ecuación existe y es única. Además, cumple que $y \in C(\bar{\Omega})$, $y \equiv 0$ en $\partial\Omega$. Supongamos que esto ocurre para $n = k$ y lo probamos para $n = k+1$. En este caso tenemos que la ecuación del problema de contorno viene dada por 5. De nuevo, tenemos una ecuación de la forma:

$$A_{k+1} y'' - y = \sum_{i=0}^k f_i,$$

donde las funciones f_i son continuas. Volviendo a usar el teorema de existencia y unicidad para las ecuaciones diferenciales ordinarias, tenemos que la solución existe y es única. □

2.3. Estabilidad

Teorema 2.2 (Estabilidad de L1) *El problema de contorno semidiscreto definido en (3) es estable en norma infinito, es decir, $\forall \tau > 0$ se cumple:*

$$\|U^n\|_\infty \leq \|U^0\|_\infty, \quad n = 0, 1, \dots, N$$

Demostración. En el caso de que probemos que $-\|U^0\|_\infty \leq U^n(x) \leq \|U^0\|_\infty$ para cada $x \in \Omega$ y $n = 0, 1, \dots, N$, entonces tendremos que $|U^n(x)| \leq \|U^0\|_\infty$ y, en particular, la cota del enunciado. Con esta idea, sea $x_M \in \Omega$ el punto tal que $U^1(x_M) = \max_{x \in \Omega} U^1(x)$. Este punto existe puesto que estamos trabajando en un conjunto acotado. Para $n = 0$, podemos evaluar la ecuación (4) en tal punto, tal que:

$$U^1(x_M) \leq U^1(x_M) - \beta \frac{\partial^2 U^1(x_M)}{\partial x^2} = U^0(x_M) \leq \|U^0\|_\infty,$$

donde en la primera desigualdad se ha hecho uso de que, por hipótesis, x_M es el punto de máximo, de manera que la segunda derivada es no positiva. Ahora, puesto que esto es cierto para todo punto de máximo, en particular se cumple que:

$$U^1(x) \leq \max_{x \in \Omega} U^1(x) = U^1(x_M) \leq \|U^0\|_\infty.$$

Del mismo modo, sea ahora el punto $x_m \in \Omega$ el punto tal que $U^1(x_m) = \min_{x \in \Omega} U^1(x)$. Haciendo un razonamiento análogo, ahora tenemos que la segunda derivada será positiva tal que:

$$U^1(x_m) \geq U^1(x_m) - \beta \frac{\partial^2 U^1(x_m)}{\partial x^2} = U^0(x_m) \geq -\|U^0\|_\infty.$$

Por tanto, se llega a que:

$$U^1(x) \geq \min_{x \in \Omega} U^1(x) = U^1(x_m) \geq - \|U^0\|_\infty.$$

Juntado las dos desigualdades, llegamos a:

$$- \|U^0\|_\infty \leq U^1(x) \leq \|U^0\|_\infty \iff |U^1(x)| \leq \|U^0\|_\infty.$$

Como esto se cumple para todo $x \in \Omega$, en particular se cumple para el máximo. Supongamos la hipótesis cierta para $j = 0, 1, \dots, n$ y aplicamos inducción para $n + 1$. Sea $x_M \in \Omega$ el punto tal que $U^{n+1}(x_M) = \max_{x \in \Omega} U^{n+1}(x)$. Entrando en la ecuación (5) tenemos:

$$\begin{aligned} U^{n+1}(x_M) - \frac{\partial^2 U^{n+1}(x_M)}{\partial x^2} &= b_0^n U^0(x_M) + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot U^j(x_M) \\ &\leq b_0^n \|U^0\|_\infty + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot \|U^j\|_\infty \\ &\leq \underbrace{\left(b_0^n + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \right)}_{b_n^n=1} \cdot \|U^0\|_\infty, \end{aligned}$$

donde recordemos que la primera parte acota a $U^{n+1}(x_M)$ por ser la derivada en el punto de máximo negativa. Si se razona de la misma manera para x_m el punto de mínimo en tiempo $n + 1$, se llega a lo siguiente:

$$\begin{aligned} U^{n+1}(x_m) - \frac{\partial^2 U^{n+1}(x_m)}{\partial x^2} &= b_0^n U^0(x_m) + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot U^j(x_m) \\ &\geq -b_0^n \|U^0\|_\infty - \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot \|U^j\|_\infty \\ &\geq - \underbrace{\left(b_0^n + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \right)}_{b_n^n=1} \cdot \|U^0\|_\infty. \end{aligned}$$

Juntando ambas desigualdades se tiene:

$$- \|U^0\|_\infty \leq U^{n+1}(x) \leq \|U^0\|_\infty \iff |U^{n+1}(x)| \leq \|U^0\|_\infty,$$

que se cumple para todo $x \in \Omega$, en particular para el máximo, por lo que queda probado. \square

2.4. Consistencia

Teorema 2.3 (Consistencia de L1) *Sea $u(x, t) \in C^2(\bar{\Omega} \times [0, T])$ la solución exacta del problema homogéneo asociado a (1). Entonces el error local de truncamiento del método numérico descrito en (3) cumple:*

$$|R_\tau^{n+1}| \leq C\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha}),$$

donde C es proporcional a $\max_{0 \leq t \leq T} u''(t)$. Por tanto, el método semidiscreto es consistente con la ecuación diferencial.

Demostración. Pasemos a analizar el error local de truncamiento del método. Recordemos que el esquema L1 surge de la idea de discretizar la derivada parcial que aparece en la definición de Caputo. Usando la discretización *forward* directamente, se obtiene un orden de $\mathcal{O}(\tau)$. Sin embargo, se puede obtener un error mejor (5) usando el teorema de Taylor con resto integral (6) (en lugar del resto de Lagrange). Recordamos que su expresión es:

$$g(x) = g(a) + \frac{g'(a)}{1!}(x-a) + \frac{g''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{g^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \frac{1}{n!} \int_a^x g^{(n+1)}(t) \cdot (x-t)^n dt.$$

Desarrollando hasta primer orden las derivadas y estimando la solución de nuestra ecuación para cada uno de los intervalos del mallado tenemos:

$$\begin{aligned} u(t_{j+1}) &= u(s) + u'(s) \cdot (t_{j+1} - s) + \int_s^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt, \\ u(t_j) &= u(s) + u'(s) \cdot (t_j - s) + \int_s^{t_j} u''(t) \cdot (t_j - t) dt. \end{aligned}$$

Restando ambas expresiones, para un punto $s \in [t_j, t_{j+1}]$ tenemos que:

$$u(t_{j+1}) - u(t_j) = \tau \cdot u'(s) + \int_s^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt - \int_s^{t_j} u''(t) \cdot (t_j - t) dt.$$

De esta manera, tenemos que el error entre la derivada y la discretización *forward*, escribiéndolo de manera que el integrando sea en todo momento positivo, es:

$$u'(s) - \frac{u(t_{j+1}) - u(t_j)}{\tau} = \frac{1}{\tau} \cdot \left(- \int_s^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt + \int_{t_j}^s u''(t) \cdot (t - t_j) dt \right).$$

Introduciendo esto en la derivada fraccionaria de Caputo tenemos:

$$\begin{aligned} D_C^\alpha u(x, t_{n+1}) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{\partial u(x, s)}{\partial s} \cdot \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{u(x, t_{j+1}) - u(x, t_j)}{\tau} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} + R_\tau^{n+1} \\ &= L^\alpha u(x, t_{n+1}) + R_\tau^{n+1}. \end{aligned}$$

Por lo que el error local de truncamiento queda como:

$$\begin{aligned}
R_\tau^{n+1} &:= D_C^\alpha u(x, t_{n+1}) - L^\alpha u(x, t_{n+1}) \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left[\frac{\partial u(x, s)}{\partial s} - \frac{u(x, t_{j+1}) - u(x, t_j)}{\tau} \right] \cdot \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \\
&\stackrel{1}{=} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{1}{\tau} \cdot \left(- \int_s^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt + \int_{t_j}^s u''(t) \cdot (t - t_j) dt \right) \cdot \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \\
&\stackrel{2}{=} \frac{1}{\tau \cdot \Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{1}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \int_s^{t_{j+1}} -u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt \cdot ds \right. \\
&\quad \left. + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{1}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \int_{t_j}^s u''(t) \cdot (t - t_j) dt \cdot ds \right).
\end{aligned}$$

Como tenemos las integrales dobles, podemos cambiar el límite de integración. Haciéndolo para la primera de las integrales tenemos:

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{1}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \int_s^{t_{j+1}} -u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) dt \cdot ds \\
&= \int_{t_j}^{t_{j+1}} -u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) \int_{t_j}^t \frac{ds}{(t_{n+1} - s)^\alpha} \cdot dt \\
&= \int_{t_j}^{t_{j+1}} -u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) \cdot \left[-\frac{(t_{n+1} - s)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{t_j}^t \cdot dt \\
&= \int_{t_j}^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t_{j+1} - t) \cdot \left[\frac{(t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - (t_{n+1} - t_j)^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right] \cdot dt.
\end{aligned}$$

Haciendo el mismo razonamiento con la otra integral obtenemos:

$$I_2 = \int_{t_j}^{t_{j+1}} u''(t) \cdot (t - t_j) \cdot \left[\frac{(t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - (t_{n+1} - t_{j+1})^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right] \cdot dt.$$

Con esto podemos sustituir ambos resultados en la expresión general del error local de truncamiento:

$$\begin{aligned}
R_\tau^{n+1} &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} u''(t) \cdot \left((t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - \frac{1}{\tau} \cdot [(t_{j+1} - t) \cdot (t_{n+1} - t_j)^{1-\alpha} \right. \\
&\quad \left. + (t - t_j) \cdot (t_{n+1} - t_{j+1})^{1-\alpha}] \right) \cdot dt.
\end{aligned}$$

Una vez tenemos calculado (aún no se ha aproximado) el valor del error local de truncamiento, podemos tratar de acotarlo. Para ello, usaremos el polinomio de interpolación de Lagrange junto su resto:

$$p(x) = \sum_{k=1}^n f(x_k) \left(\prod_{j=1, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right); \quad R_p = f(x) - p(x) = \frac{f^{(n)}(\xi_x)}{n!} \prod_{l=1}^n (x - x_l);$$

Calculando el polinomio de interpolación de primer orden a la función $g(t) = (t_{n+1} - t)^{1-\alpha}$ en el

intervalo $t \in [t_j, t_{j+1}]$ tenemos que el resto es:

$$\begin{aligned}
g(t) - p(t) &\stackrel{1}{=} (t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - \left[g(t_j) \cdot \frac{t - t_{j+1}}{t_j - t_{j+1}} + g(t_{j+1}) \cdot \frac{t - t_j}{t_{j+1} - t_j} \right] \\
&= (t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - \frac{1}{\tau} [g(t_j) \cdot (t_{j+1} - t) + g(t_{j+1}) \cdot (t - t_j)] \\
&\stackrel{2}{=} \frac{g''(\xi_j)}{2!} \cdot (t - t_j) \cdot (t - t_{j+1}) \\
&= \frac{1}{2} (1 - \alpha)(\alpha)(t_{n+1} - \xi_j)^{-\alpha-1} (t - t_j)(t_{j+1} - t) \stackrel{3}{\geq} 0,
\end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la definición del polinomio de interpolación, en (2) se ha igualado a la expresión teórica del resto y en (3) que $t, \xi_j \in (t_j, t_{j+1})$ y $\alpha \in (0, 1)$. Si nos fijamos, la segunda ecuación del desarrollo anterior coincide con parte del integrando que teníamos en la expresión del error local de truncamiento. Sin embargo, nos aparece el término $(t_{n+1} - \xi_j)^{-\alpha-1}$ que para $j = n+1$ explota. Por ello, empezaremos acotando solo en los puntos anteriores:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=0}^{n-2} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left[\frac{1}{2} (1 - \alpha)(\alpha)(t_{n+1} - \xi_j)^{-\alpha-1} (t - t_j)(t_{j+1} - t) \right] \cdot dt \\
&= \frac{(1 - \alpha)(\alpha)}{2 \cdot \Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=0}^{n-2} (t_{n+1} - \xi_j)^{-\alpha-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} (t - t_j)(t_{j+1} - t) dt \\
&= \frac{(1 - \alpha)(\alpha)}{2 \cdot \Gamma(2 - \alpha)} \cdot \frac{\tau^3}{6} \sum_{j=0}^{n-2} (t_{n+1} - \xi_j)^{-\alpha-1} \\
&\leq \frac{(1 - \alpha)(\alpha)}{2 \cdot \Gamma(2 - \alpha)} \cdot \frac{\tau^3}{6} \underbrace{\sum_{j=0}^{n-2} (t_{n+1} - t_{j+1})^{-\alpha-1}}_S,
\end{aligned}$$

donde se ha usado que la integral se puede resolver de forma directa:

$$\begin{aligned}
I &= \int_{t_j}^{t_{j+1}} (t - t_j)(t_{j+1} - t) dt \\
&= \int_{t_j}^{t_{j+1}} -t^2 + (t_{j+1} + t_j) \cdot t - t_{j+1}t_j dt \\
&= -\frac{t^3}{3} + (t_{j+1} + t_j) \cdot \frac{t^2}{2} - t_{j+1}t_j t \Big|_{t_j}^{t_{j+1}} \\
&= -\frac{\tau^3}{3} ((j+1)^3 - j^3) + \frac{\tau^3}{2} (j+1+j)((j+1)^2 - j^2) - \tau^3(j+1)j \\
&= -\frac{\tau^3}{3} (3j^2 + 3j + 1) + \frac{\tau^3}{2} (2j+1)^2 - \tau^3(j^2 + j) = \frac{\tau^3}{6}.
\end{aligned}$$

De esta manera, solo queda poder acotar la serie que aparece. Démonos cuenta que la serie es creciente en j . Si la multiplicamos por el ancho de cada intervalo, lo que tenemos es una suma de Riemman con los puntos inferiores del intervalo. Así, es claro que esa suma siempre será menor que

la integral. Con esto podemos acotar como sigue:

$$\begin{aligned}
S &= \sum_{j=0}^{n-2} (t_{n+1} - t_{j+1})^{-\alpha-1} \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} (t_{n+1} - t_j)^{-\alpha-1} \\
&\leq \frac{1}{\tau} \int_{t_1}^{t_n} (t_{n+1} - t)^{-\alpha-1} dt \\
&= \frac{1}{\tau} \cdot \left. \frac{(t_{n+1} - t)^{-\alpha}}{\alpha} \right]_{t_1}^{t_n} \\
&= \frac{1}{\tau} \cdot \frac{(t_{n+1} - t_n)^{-\alpha} - (t_{n+1} - t_1)^{-\alpha}}{\alpha} \\
&\leq \frac{1}{\tau} \cdot \frac{(t_{n+1} - t_n)^{-\alpha}}{\alpha} \\
&= \frac{1}{\tau} \cdot \frac{\tau^{-\alpha}}{\alpha},
\end{aligned}$$

de donde obtenemos que:

$$A \leq \frac{1 - \alpha}{12 \cdot \Gamma(2 - \alpha)} \cdot \tau^{2-\alpha}.$$

Por otro lado, solo queda estimar el desarrollo para los últimos puntos del intervalo. Esto lo podemos hacer de la misma forma como:

$$\begin{aligned}
B &= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=n-1}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left((t_{n+1} - t)^{1-\alpha} - \frac{1}{\tau} \cdot [(t_{j+1} - t) \cdot (t_{n+1} - t_j)^{1-\alpha} \right. \\
&\quad \left. + (t - t_j) \cdot (t_{n+1} - t_{j+1})^{1-\alpha}] \right) \cdot dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=n-1}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(g(t) - \frac{1}{\tau} [(t_{j+1} - t)g(t_j) + (t - t_j)g(t_{j+1})] \right) \cdot dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=n-1}^n \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} g(t) dt - \frac{1}{\tau} \left[\frac{(t_{j+1} - t)^2}{-2} \cdot g(t_j) + \frac{(t - t_j)^2}{2} \cdot g(t_{j+1}) \right]_{t_j}^{t_{j+1}} \right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \sum_{j=n-1}^n \left(\int_{t_j}^{t_{j+1}} g(t) dt - \frac{1}{\tau} \left[\frac{\tau^2}{2} \cdot g(t_j) + \frac{\tau^2}{2} \cdot g(t_{j+1}) \right]_{t_j}^{t_{j+1}} \right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \left(\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} g(t) dt - \tau \left[\frac{g(t_{n+1})}{2} + g(t_n) + \frac{g(t_{n-1})}{2} \right] \right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \left(\left[\frac{(t_{n+1} - t)^{2-\alpha}}{\alpha - 2} \right]_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} - \tau \left[g(t_n) + \frac{g(t_{n-1})}{2} \right] \right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \left(\left[\frac{(t_{n+1} - t)^{2-\alpha}}{-(2 - \alpha)} \right]_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} - \tau \left[g(t_n) + \frac{g(t_{n-1})}{2} \right] \right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(2 - \alpha)} \left(\frac{(2\tau)^{2-\alpha}}{2 - \alpha} - \tau \left[\tau^{1-\alpha} + \frac{(2\tau)^{1-\alpha}}{2} \right] \right) \\
&= \frac{\tau^{2-\alpha}}{\Gamma(2 - \alpha)} \left[\frac{2^{2-\alpha}}{2 - \alpha} - (1 + 2^{-\alpha}) \right].
\end{aligned}$$

Juntando ambos resultados A y B y volviendo sustituyendo en el desarrollo del error local de truncamiento obtenemos la siguiente cota

$$\begin{aligned}
|R_\tau^{n+1}| &= \left| \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} u''(t) \cdot \left(g(t) - \frac{1}{\tau} \cdot [(t_{j+1}-t) \cdot g(t_j) + (t-t_j)g(t_{j+1})] \right) \cdot dt \right| \\
&\leq \frac{U}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(g(t) - \frac{1}{\tau} \cdot [(t_{j+1}-t) \cdot g(t_j) + (t-t_j)g(t_{j+1})] \right) \cdot dt \\
&\leq \frac{U}{\Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{1-\alpha}{12} + \frac{2^{2-\alpha}}{2-\alpha} - (1+2^{-\alpha}) \right] \tau^{2-\alpha} \\
&= C\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha}),
\end{aligned}$$

donde $U = \max_{0 \leq t \leq t_{n+1}} |u''(t)|$, con lo que la demostración queda completada. \square

2.5. Convergencia

Teorema 2.4 (Convergencia de L1) *Sea $u(x, t) \in C^2(\bar{\Omega} \times [0, T])$ la solución exacta del problema homogéneo asociado a (1) y sea U^n , $n = 1, \dots, N+1$ la solución de la aproximación numérica dada en el esquema (3). Definiendo el error en cada tiempo como:*

$$e^n = u(x, t_n) - U^n.$$

Se tiene que:

1. Para $0 \leq \alpha < 1$:

$$\|e^n\|_\infty \leq C_{u,\alpha} T^\alpha \tau^{2-\alpha}, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

2. Para $\alpha \rightarrow 1$:

$$\|e^n\|_\infty \leq C_u T \tau, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

donde $C_{u,\alpha}, C_u$ son constantes.

Demostración. Se seguirá un razonamiento análogo al que se ha hecho para probar la estabilidad. Recordemos que, por definición de error local de truncamiento, la solución exacta de la ecuación diferencial verifica la ecuación del método numérico más el error local de truncamiento.

1. $0 \leq \alpha < 1$: Lo primero que se demostrará es que se cumple la siguiente desigualdad:

$$\|e^n\|_\infty \leq C_u (b_0^{n-1})^{-1} \mathcal{O}(\tau^2), \quad (6)$$

donde C_u es la constante que aparece en la acotación del error local de truncamiento en el teorema 2.3. Para cualquier valor de α se tiene que el valor de la solución exacta y aproximada en tiempo cero es el dato inicial, por lo que:

$$\|e^0\| = \|u(t_0) - U^0\| = 0.$$

Pasamos ahora a demostrarlo para el resto de casos. Para $n = 1$ usamos la ecuación (4) tanto para la solución numérica como para la exacta, tal que al restarlas tenemos:

$$e^1(x) - \beta \frac{\partial^2 e^1(x)}{\partial x^2} = e^0(x) + \beta R_\tau^1(x).$$

Siguiendo la demostración del teorema (2.2), sean x_M y x_m los puntos de máximo y mínimo para $e^1(x)$. Entonces, es claro que podemos llegar a:

$$\|e^1\|_\infty \leq \|e^0\|_\infty + \beta \|R_\tau^1\|_\infty = \beta \|R_\tau^1\|_\infty \leq C_u (b_0^0)^{-1} \mathcal{O}(\tau^2),$$

donde se ha usado que el error en tiempo 0 es nulo y que $b_0^0 = 1$. Además, recordemos que $\beta = \tau^\alpha \Gamma(2 - \alpha)$. Para $n = 2$ podemos usar la ecuación (5) de manera que, evaluando en la solución exacta y aproximada, la ecuación del error queda:

$$e^2(x) - \beta \frac{\partial^2 e^2(x)}{\partial x^2} = b_0^1 e^0(x) + (b_1^1 - b_0^1) \cdot e^1(x) + \beta R_\tau^2(x).$$

Si acotamos por la norma infinito y usamos el resultado anterior:

$$\begin{aligned} \|e^2\|_\infty &\leq (b_1^1 - b_0^1) \cdot \|e^1\|_\infty + \beta \|R_\tau^2\|_\infty \\ &\stackrel{1}{\leq} \beta \|R_\tau\|_\infty ((b_1^1 - b_0^1) \cdot (b_0^0)^{-1} + 1) \\ &\leq C_u (b_0^1)^{-1} ((b_1^1 - b_0^1) \cdot (b_0^0)^{-1} b_0^1 + b_0^1) \mathcal{O}(\tau^2) \\ &\stackrel{2}{\leq} C_u (b_0^1)^{-1} \mathcal{O}(\tau^2), \end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la cota del caso anterior y en (2) se ha usado la propiedad 2 de la proposición 2.1, de manera que $(b_0^0)^{-1} b_0^1 \leq 1$. Suponiendo la hipótesis cierta para $n = 1, 2, \dots, k$ lo probamos para $n = k + 1$ tal que usando la ecuación 5:

$$\begin{aligned} \|e^{k+1}\|_\infty &\leq b_0^k \|e^0\|_\infty + \sum_{j=1}^k \|e^j\|_\infty \cdot (b_j^k - b_{j-1}^k) + \beta \|R_\tau^{k+1}\|_\infty \\ &\stackrel{1}{\leq} \sum_{j=1}^k C_u (b_0^{j-1})^{-1} \cdot (b_j^k - b_{j-1}^k) \mathcal{O}(\tau^2) + \beta \|R_\tau\|_\infty \\ &\stackrel{2}{\leq} C_u \mathcal{O}(\tau^2) \left[\sum_{j=1}^k (b_0^{j-1})^{-1} \cdot (b_j^k - b_{j-1}^k) + 1 \right] \\ &\leq C_u (b_0^k)^{-1} \left[\sum_{j=1}^k (b_0^{j-1})^{-1} b_0^k \cdot (b_j^k - b_{j-1}^k) + b_0^k \right] \mathcal{O}(\tau^2) \\ &\stackrel{3}{\leq} C_u (b_0^k)^{-1} \underbrace{\left[\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) + b_0^k \right]}_{=1} \mathcal{O}(\tau^2) \\ &\leq C_u (b_0^k)^{-1} \mathcal{O}(\tau^2), \end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la hipótesis de inducción, en (2) la cota viene dada por la consistencia del método y en (3) se ha usado que $b_j^k < b_j^n, \forall k > n$ y la propiedad 4 de la proposición 2.1. Con esto, queda probada la ecuación 6. Para terminar de probar el teorema, usamos la definición de los pesos de discretización para ver que la función:

$$\phi(x) = \frac{x^{-\alpha}}{x^{1-\alpha} - (x-1)^{1-\alpha}} = x^{-\alpha} (b_0^{x-1})^{-1},$$

es creciente al ser $\phi'(x) \geq 0, \forall x > 1, \alpha \in [0, 1]$. Además, haciendo el desarrollo de Taylor siguiente:

$$f(x) = \left(1 - \frac{1}{x}\right)^{1-\alpha} = 1 + (1-\alpha)\frac{-1}{x} + (1-\alpha)(-\alpha)\frac{1}{2x^2} + \dots$$

se puede ver que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x \left[1 - \left(1 - \frac{1}{x}\right)^{1-\alpha}\right]} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{1 - \alpha + \frac{(1-\alpha)\alpha}{2x} + \mathcal{O}(x^{-2})} = \frac{1}{1 - \alpha}.$$

Al ser la función creciente y estar acotada, se encuentra la siguiente cota para el error:

$$\|e^n\|_\infty \leq C_u k^{-\alpha} (b_0^{k-1})^{-1} k^\alpha \mathcal{O}(\tau^2) \leq \frac{C_u}{1-\alpha} (k\tau)^\alpha \tau^{2-\alpha} \leq \frac{C_u}{1-\alpha} T^\alpha \mathcal{O}(\tau^{2-\alpha}),$$

para todo $n = 1, 2, \dots, N$ ya que $T = \tau N$. Con esto queda probado el primer caso.

2. $\alpha \rightarrow 1$: démonos cuenta que ya no es válida la acotación anterior ya que tiene una singularidad en $\alpha = 1$. Siguiendo un poco la idea del caso anterior, probemos primero la siguiente cota:

$$\|e^n\|_\infty \leq n C_u \tau^2, \quad n = 1, 2, \dots, N + 1 \quad (7)$$

De la misma forma que antes, lo probamos por inducción. Para $n = 1$ se tiene:

$$\|e^1\|_\infty \leq \beta \|R_\tau^1\|_\infty \leq C_u \tau^2.$$

Para $n = 2$ se tiene que:

$$\begin{aligned} \|e^2\|_\infty &\leq \beta (\|(b_1^1 - b_0^1)R_\tau^1\|_\infty + \|R_\tau^2\|_\infty) \\ &\leq C_u \tau^2 (b_1^1 - b_0^1 + 1) \\ &\leq C_u \tau^2 (b_1^1 + 1) \\ &= 2C_u \tau^2. \end{aligned}$$

Suponiendo la hipótesis cierta para $n = k$ lo probamos para $k + 1$:

$$\begin{aligned}
\|e^{k+1}\|_\infty &\leq \sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) \|e^j\|_\infty + \beta \|R_\tau^{k+1}\|_\infty \\
&\leq C_u \tau^2 \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) j + 1 \right) \\
&= (k+1) C_u \tau^2 \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) \cdot \frac{j}{k+1} + \frac{1}{k+1} \right) \\
&= (k+1) C_u \tau^2 \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) \cdot \left(1 - \frac{k+1-j}{k+1} \right) + \frac{1}{k+1} \right).
\end{aligned}$$

Para terminar bastará probar que el paréntesis es menor que 1. Usando la propiedad 4 de la proposición 2.1 tenemos:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k+1} &= \frac{1}{k+1} \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) + b_0^k \right) \\
&\leq \frac{1}{k+1} \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) (k+1-j) + b_0^k \right) \\
&\leq \frac{1}{k+1} \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) (k+1-j) \right) + b_0^k.
\end{aligned}$$

Que reordenando queda como:

$$-\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) \frac{k+1-j}{k+1} + \frac{1}{k+1} \leq b_0^k.$$

Por último, sustituyendo en el desarrollo del error tenemos:

$$\|e^{k+1}\|_\infty \leq C_u (k+1) \tau^2 \left(\sum_{j=1}^k (b_j^k - b_{j-1}^k) + b_0^k \right) = C_u (k+1) \tau^2.$$

Como se ha probado la cota de la ecuación 7, basta notar que $n\tau \leq T$ para $n = 0, 1, \dots, N+1$ tal que queda probada la segunda parte.

□

3. Esquema L1 implícito

Hasta ahora, el esquema L1 semidiscreto ha consistido en discretizar la derivada en tiempo que aparece en la formulación de la derivada fraccionaria de Caputo. En la ecuación de difusión también aparece una segunda derivada en espacio, que hasta ahora no se ha discretizado. La idea de hacer esto era ver el comportamiento de la ecuación en tiempo y comprobar que la dependencia con el espacio sólo interviene en aspectos como la consistencia, a la hora de acotar en norma L_∞ .

Lo que haremos en esta sección será usar la discretización en tiempo que hemos desarrollado en las secciones anteriores y añadir la discretización en espacio, de manera que terminemos con un problema de contorno totalmente discretizado.

3.1. Discretización en espacio

Empezamos creando el mallado espacial dado por:

$$\mathcal{N} = \{x_m = mh, m = 0, \dots, M : h = L/M\}$$

tal que haya N intervalos y $N + 1$ puntos, siendo $x_0 = 0$ el punto inicial y $x_M = L$ el final del intervalo, donde generalmente tomaremos $L = 1$. Con esto, teniendo en cuenta la discretización centrada de la segunda derivada (4) a una función $f(x) \in C^4(\Omega)$ para $x \subset \Omega$:

$$\frac{\partial^2 f(x_m)}{\partial x^2} = \frac{f(x_{m+1}) + f(x_{m-1}) - 2f(x_m)}{h^2} - \frac{f^{(4)}(\xi)}{12}h^2,$$

donde $\xi \subset (x_{m-1}, x_{m+1})$. Recordando la notación $U(x_m, t_n) = U_m^n$ y entrando en la ecuación (2) tenemos:

$$I^\alpha U_m^{n+1} := \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U_m^{j+1} - U_m^j) \quad (8)$$

$$= \frac{U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}}{h^2} \quad (9)$$

$$=: \Delta_h U_m^{n+1}. \quad (10)$$

Si se agrupan los términos en mismos puntos temporales la ecuación discretizada se puede escribir como:

$$U_m^{n+1} - \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}) = b_0^n U_m^0 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot U_m^j. \quad (11)$$

Escrito de forma matricial es más sencillo de interpretar:

$$\left(\left(1 + \frac{2\beta}{h^2} \right) \mathcal{I} - \frac{\beta}{h^2} \mathcal{A} \right) \mathcal{U}^{n+1} = b_0^n \cdot \mathcal{U}^0 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot \mathcal{U}^j,$$

donde el sumatorio solo interviene para $n \geq 1$ y las matrices y vectores implicados son:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U}^j = \begin{pmatrix} U_0^j \\ U_1^j \\ U_2^j \\ \vdots \\ U_M^j \end{pmatrix}.$$

Con esto, el esquema implícito quedaría de la siguiente forma:

$$\begin{cases} I^\alpha U(x_m, t_{n+1}) = \Delta_h U(x_m, t_{n+1}), & M > m > 0 & N > n > 0 \\ U(0, t_n) = U(L, t_n) = 0, & & N > n > 0 \\ U(x_m, 0) = g(x_m), & & M > m > 0 \end{cases} \quad (12)$$

3.2. Existencia y unicidad

Teorema 3.1 (Existencia y unicidad) *El esquema implícito discreto en tiempo y espacio definido en (12) tiene una solución. Además, esta es única.*

Demostración. Basta ver que el esquema numérico tal y como lo hemos definido, no es más que un sistema de ecuaciones de la forma:

$$My = Nx \iff y = M^{-1}Nx,$$

donde la matriz N se construye a partir de la solución en los tiempo anteriores. Para ver que existe a solución, basta con comprobar que la matriz M es invertible:

$$M = \left(1 + \frac{2\beta}{h^2}\right) \mathcal{I} - \frac{\beta}{h^2} \mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 + 2\beta/h^2 & -\beta/h^2 & 0 & \dots & 0 \\ -\beta/h^2 & 1 + 2\beta/h^2 & -\beta/h^2 & \dots & 0 \\ 0 & -\beta/h^2 & 1 + 2\beta/h^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -\beta/h^2 & 1 + 2\beta/h^2 \end{pmatrix}.$$

Puesto que es de diagonal estrictamente dominante, es invertible. □

Observación 3.1 El resto de propiedades numéricas, como la estabilidad, consistencia y convergencia no se añadirán. Démonos cuenta que en las demostraciones de la sección anterior, en las que se probaban estas propiedades para el esquema semidiscreto, la dependencia espacial de la solución sólo se tenía en cuenta a la hora de acotar la segunda derivada en espacio, que podemos seguir haciendo con la discretización en diferencias centradas. De esta forma, bastaría repetir las demostraciones anteriores para tener los resultados.

4. Esquema L1 explícito

En la sección anterior hemos introducido la discretización en espacio haciendo uso de las diferencias centradas para la segunda derivada. Sin embargo, comprobamos que el esquema numérico con el que terminamos es implícito, de manera que la solución en un determinado tiempo nos depende de los tiempo anteriores, pero también de él mismo, de manera que hay que resolver un sistema de ecuaciones. El objetivo de esta sección será desarrollar un esquema para el problema de contorno que sea explícito.

4.1. Discretización

El hecho de que el esquema en la sección anterior fuese implícito depende directamente de la discretización usada en la derivada de Caputo. Si se recuerda, usamos la discretización *forward* dentro de la integral y asumimos que es constante, usando el extremo inferior de los intervalos. Ahora se hará el mismo desarrollo, pero usando los extremos superiores. Con esto tenemos:

$$\begin{aligned}
D_C^\alpha u(x_m, t_{n+1}) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{\partial u(x, s)}{\partial s} \cdot \frac{ds}{(t_{n+1}-s)^\alpha} \\
&\sim \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{U_m^{j+2} - U_m^{j+1}}{\tau} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{ds}{(t_{n+1}-s)^\alpha} \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^n \frac{U_m^{j+2} - U_m^{j+1}}{\tau} \cdot \frac{\tau^{1-\alpha}}{1-\alpha} \cdot b_j^n \\
&= \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U_m^{j+2} - U_m^{j+1}) \\
&= E^\alpha U_m^{n+1}.
\end{aligned}$$

Si usamos la misma discretización espacial para el laplaciano, obtenemos el siguiente esquema:

$$\begin{aligned}
E^\alpha U_m^{n+1} &:= \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U_m^{j+2} - U_m^{j+1}) \\
&= \frac{U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}}{h^2} \\
&=: \Delta_h U_m^{n+1}.
\end{aligned}$$

Agrupando las soluciones en mismos puntos de tiempo, llegamos a un esquema explícito, en el que la solución en un punto temporal depende únicamente de los anteriores:

$$U_m^{n+2} = b_0^n U_m^1 + \sum_{j=0}^{n-1} (b_{j+1}^n - b_j^n) \cdot U_m^{j+2} + \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}) \quad (13)$$

$$= b_0^n U_m^1 + \sum_{j=2}^{n+1} (b_{j-1}^n - b_{j-2}^n) \cdot U_m^j + \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}). \quad (14)$$

Démonos cuenta que, por la propia construcción, la primera solución que podemos calcular con este esquema es para tiempo 2. Así, una forma de resolverlo sería inicializar la solución con la condición inicial, aplicar el esquema implícito para calcular la solución en tiempo 1 y aplicar el esquema explícito para el resto de puntos.

Con esto, el esquema explícito quedaría de la siguiente forma:

$$\begin{cases} E^\alpha U(x_m, t_{n+1}) = \Delta_h U(x_m, t_{n+1}), & M > m > 0 \quad N > n > 0 \\ U(0, t_n) = U(L, t_n) = 0, & N > n > 0 \\ U(x_m, 0) = g(x_m), & M > m > 0 \end{cases} \quad (15)$$

4.2. Existencia y unicidad

Teorema 4.1 (Existencia y unicidad) *El esquema explícito discreto en tiempo y espacio definido en (15) tiene una solución. Además, esta es única.*

Demostración. Siguiendo lo comentado anteriormente, para tiempo cero tenemos que la solución es la condición inicial. Para tiempo uno, se aplica el esquema implícito que, por lo visto en la sección anterior, tiene solución única. Para el resto de tiempos, por la construcción del esquema, tenemos despejada la solución en tiempos posteriores en función, únicamente, de los anteriores, de manera que la solución existe y es única. □

4.3. Estabilidad

Teorema 4.2 (Estabilidad) *Sea $u(x, t) \in C^4([0, 1]) \times C^2([0, T])$ y sea U la aproximación numérica dada por el esquema 15. Entonces U verifica el principio del máximo siempre y cuando se cumpla la condición de CFL:*

$$1 - b_{n-1}^n - \frac{2\beta}{h^2} \geq 0.$$

Demostración. La idea es acotar la solución en tiempos posteriores por la solución en tiempos anteriores, de manera que el máximo siempre se alcanza en los extremos. Esto significa que la solución dada por el método numérico no oscila "demasiado". Procedemos por inducción. Para tiempo cero tenemos que:

$$U_m^0 = g(x_m) \leq \max_{0 < m < M} g(x_m).$$

Para tiempo uno se aplica el método implícito, que ya sabemos que es estable, de manera que:

$$U_m^1 = A^{-1} \cdot g(x_m) \Rightarrow \|U^1\|_\infty \leq \|U^0\|_\infty.$$

Para el resto de puntos temporales, podemos hacer uso de la ecuación 13. Para $n = 0$ la ecuación se simplifica a:

$$U_m^2 = b_0^0 U_m^1 + \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^1 + U_{m-1}^1 - 2U_m^1) = \left(1 - \frac{2\beta}{h^2}\right) \cdot U_m^1 + \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^1 + U_{m-1}^1).$$

Puesto que por hipótesis se cumple la condición de CFL, claramente se cumple también que $1 - 2\beta/h^2 \geq 0$. Tomando normas infinito y aplicando las hipótesis en los puntos anteriores se tiene:

$$\|U^2\|_\infty \leq \left(1 - \frac{2\beta}{h^2}\right) \cdot \|U^1\|_\infty + \frac{2\beta}{h^2} \cdot \|U^1\|_\infty = \|U^1\|_\infty \leq \|U^0\|_\infty.$$

Suponiendo la hipótesis cierta para $n = k - 1$ lo probamos por inducción para $n = k$. Entrando en la ecuación 13 y agrupando los términos U_m^{k+1} :

$$U_m^{k+2} = b_0^k U_m^1 + \left(1 - b_{k-1}^k - \frac{2\beta}{h^2}\right) \cdot U_m^{k+1} + \sum_{j=2}^k (b_{j-1}^k - b_{j-2}^k) \cdot U_m^j + \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^{k+1} + U_{m-1}^{k+1}). \quad (16)$$

Ahora se pueden tomar normas infinito y tener en cuenta que, por la propiedad 3 del teorema 2.1, $b_{j+1}^k - b_j^k \geq 0$. Teniendo en cuenta que el segundo sumando es positivo por hipótesis de la condición de CFL, se puede acotar como sigue:

$$\begin{aligned} \|U^{k+2}\|_\infty &\leq b_0^k \|U^1\|_\infty + \left(1 - b_{k-1}^k - \frac{2\beta}{h^2}\right) \cdot \|U^{k+1}\|_\infty + \sum_{j=2}^k (b_{j-1}^k - b_{j-2}^k) \cdot \|U^j\|_\infty + \frac{2\beta}{h^2} \cdot \|U^{k+1}\|_\infty \\ &\leq b_0^k \|U^1\|_\infty + \left(1 - b_{k-1}^k\right) \cdot \|U^{k+1}\|_\infty + \sum_{j=2}^k (b_{j-1}^k - b_{j-2}^k) \cdot \|U^j\|_\infty \\ &\leq \underbrace{\left(b_0^k + 1 - b_{k-1}^k + \sum_{j=2}^k (b_{j-1}^k - b_{j-2}^k)\right)}_{=b_{k-1}^k - b_0^k} \cdot \|U^0\|_\infty = \|U^0\|_\infty. \end{aligned}$$

Por lo que queda probado por inducción. □

Observación 4.1 1. Es claro que si se hace tender $\alpha \rightarrow 1$ se obtiene la condición de CFL $\tau \leq h^2/2$ típica de la ecuación del calor.

2. Démonos cuenta de lo restrictiva que es esta condición de CFL para el esquema explícito. Si despejamos el paso del tiempo en función del paso en espacio se tiene:

$$\tau \leq \left(\frac{1 - b_{n-1}^n}{2 \cdot \Gamma(2 - \alpha)} \cdot h^2\right)^{1/\alpha} = \mathcal{O}(h^{2/\alpha}).$$

Tomando un paso relativamente grande en espacio como $h = 10^{-1}$, tenemos que el paso en tiempo debe de ser del orden de $\tau = \mathcal{O}(6^{-3})$ para $\alpha = 0,9$ y de $\tau = \mathcal{O}(10^{-20})$ para $\alpha = 0,1$. Esto implica que es excesivamente costoso computacionalmente, sobre todo si queremos refinar el mallado en espacio.

De esta manera se ha decidido que, si bien el esquema es totalmente válido, no tiene gran interés en este tipo de ecuaciones, ya que el método implícito puede resolverse de forma mucho más rápida. Puesto que no le vamos a dar ningún uso, no se ha visto conveniente demostrar la consistencia y convergencia del método.

5. Esquema L1 para soluciones débiles

5.1. Introducción

En las secciones anteriores se ha hecho un estudio numérico de las soluciones del esquema L1, siempre y cuando el dato inicial fuese una función continua. De esta manera, se podía garantizar la existencia y unicidad de soluciones clásicas para el problema de contorno discreto, así como propiedades como la estabilidad, consistencia y convergencia de las soluciones. En esta sección supondremos que el dato inicial no es una función continua, si no únicamente integrable, de manera que no se podrá garantizar la existencia de soluciones clásicas. Introduciremos un tipo distintos de solución para estos casos, llamadas soluciones débiles.

En el anexo se ha añadido una sección entera a la formulación débil de un problema de contorno, de manera que aquí solo se definirá lo que es una solución débil para nuestro problema en concreto y se estudiarán las propiedades numéricas para este tipo de soluciones.

5.2. Existencia y unicidad

Definición 5.1 (Solución débil del esquema L1) Diremos que $u(x, t)$ es una solución débil de (3) si $u(\cdot, t) \in H_0^1([0, L])$, $U^0 = g(x) \in L^2(0, L)$ y se verifican las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} n = 0 : \quad & \int_0^L U^1 \varphi dt + \beta \int_0^L \frac{\partial U^1}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} dt = \int_0^L U^0 \varphi dt, \\ n > 0 : \quad & \int_0^L U^{n+1} \varphi dt + \beta \int_0^L \frac{\partial U^{n+1}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} dt = \\ & = (1 - b_{n-1}^n) \int_0^L U^n \varphi dt + b_0^n \int_0^L U^0 \varphi dt + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \int_0^L U^j \varphi dt, \end{aligned}$$

para toda función test $\varphi \in H_0^1([0, L])$.

Teorema 5.1 (Existencia y unicidad débil de L1) Para el esquema numérico definido en (3), existe una solución débil según la definición dada en (5.1) siempre y cuando el dato inicial cumpla $g(x) \in L^2(\Omega)$. Además, esta solución es única.

Demostración. Se procederá por inducción. Recordemos que el problema de contorno discretizado está descrito en (3). Para el caso base, ya hemos visto que el operador se puede escribir de forma simplificada como se muestra en la ecuación (4). Esto corresponde a un problema de contorno asociado a una ecuación diferencial de segundo orden de la forma:

$$y - Ay'' = f \iff Ay'' - y = -f,$$

donde $y(x, t)$ es la solución que estamos buscando y $f = g(x)$ es la condición inicial. Para un problema de este estilo escrito de forma variacional ¹:

$$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dt} x(x) \right) + q(x)x(x) = f(x).$$

¹Ver la ecuación (18) de la sección de formulación débil de un problema de contorno.

Nos damos cuenta que equivale a tener $p(x) = A$ y $q(x) = -1$, coeficientes constantes. Así, aplicando el teorema de existencia y unicidad para soluciones débiles, basta pedir que el dato inicial cumpla $U^0 = g(x) \in L^2(\Omega)$, ya que $p(x) > 0$ y p, q son funciones continuas a trozos (por ser constantes). Supongamos que la solución al problema de contorno discretizado existe para un mallado temporal con n puntos y veamos qué ocurre con $n + 1$. Para $n > 0$, el operador L1 podíamos expandirlo para obtener las soluciones en tiempo $n + 1$ despejadas del resto, obteniendo la ecuación (5).

De nuevo, tenemos una ecuación que es de la forma:

$$y - Ay'' = f.$$

Aplicando la hipótesis de inducción, tenemos que f es una combinación lineal de funciones $L^2(\Omega)$, por lo que $f \in L^2(\Omega)$. Así, aplicando de nuevo el teorema de existencia y unicidad para soluciones débiles, concluimos la demostración. \square

5.3. Estabilidad

Teorema 5.2 (Estabilidad débil de L1) *Sea $g(x) \in L^2(\Omega)$, entonces el problema de contorno semi-discreto definido en (3) es incondicionalmente estable, es decir, $\forall \tau > 0$ se cumple:*

$$\|U^{n+1}\|_1 \leq \|U^0\|_0, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1$$

Demostración. Recordemos que el operador (2) se escribía de forma distinta en función de si $n = 0$ ó $n > 0$. Para el primer caso tenemos que ²:

$$(U^1, \varphi)_0 + \beta \left(\frac{\partial U^1}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_0 = (U^0, \varphi)_0.$$

Particularizando para $\varphi = U^1$ tenemos que:

$$\|U^1\|_1^2 = \|U^1\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial U^1}{\partial x} \right\|_0^2 \stackrel{1}{\leq} \|U^0\|_0 \|U^1\|_0 \stackrel{2}{\leq} \|U^0\|_0 \|U^1\|_1,$$

donde en (1) se ha usado la desigualdad de Schwarz y en (2) que $\|\varphi\|_0 \leq \|\varphi\|_1$ para toda función $\varphi \in H^1$. Por tanto, dividiendo a ambos lados por $\|U^1\|_1$ lo tenemos probado.

Pasamos ahora al caso $n > 0$, que probamos por inducción. Como caso base tomaremos $n = 1$. De nuevo, tomando una función test $\varphi = U^2 \in H_0^1([0, T])$, que se cumple por hipótesis del teorema, tenemos:

$$(U^2, U^2)_0 + \beta \left(\frac{\partial U^2}{\partial x}, \frac{\partial U^2}{\partial x} \right)_0 = (1 - b_0^1)(U^1, U^2)_0 + b_0^1(U^0, U^2)_0.$$

Ahora, podemos pasar a las normas para obtener:

$$\begin{aligned} \|U^2\|_1^2 &= \|U^2\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial U^2}{\partial x} \right\|_0^2 \stackrel{1}{\leq} (1 - b_0^1) \|U^1\|_0 \|U^2\|_0 + b_0^1 \|U^0\|_0 \|U^2\|_0 \\ &\stackrel{2}{\leq} (1 - b_0^1) \|U^1\|_1 \|U^2\|_1 + b_0^1 \|U^0\|_0 \|U^2\|_1 \\ &\stackrel{3}{\leq} \|U^0\|_0 \|U^2\|_1, \end{aligned}$$

²En la sección dedicada a la formulación débil se explica por qué el segundo sumando queda de esta forma

donde en (1) se ha usado la desigualdad de Schwarz, en (2) se han acotado las normas en L^2 por las de H^1 y en (3) se ha usado el resultado de $n = 0$, para poder acotar $\|U^1\|_1 \leq \|U^0\|_0$. Con esto, basta dividir por $\|U^2\|_1$ para tener el resultado.

Supongamos la acotación $\|U^j\|_1 \leq \|U^0\|_0$ para todo $j = 0, 1, \dots, n$. Para el caso $n + 1$ tenemos que, tomando la formulación débil para $\varphi = U^{n+1} \in H_0^1([0, T])$ queda, tomando directamente las normas:

$$\begin{aligned} \|U^{n+1}\|_1^2 &= \|U^{n+1}\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial U^{n+1}}{\partial x} \right\|_0^2 \\ &\stackrel{1}{\leq} b_0^n \|U^0\|_0 \|U^{n+1}\|_0 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \|U^j\|_0 \|U^{n+1}\|_0 \\ &\stackrel{2}{\leq} b_0^n \|U^0\|_0 \|U^{n+1}\|_1 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \|U^j\|_1 \|U^{n+1}\|_1 \\ &\stackrel{3}{\leq} \underbrace{\left(b_0^n + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \right)}_{=1} \|U^0\|_0 \|U^{n+1}\|_1, \end{aligned}$$

donde se han seguido las mismas acotaciones que en el caso de $n = 1$, usando la hipótesis de inducción en (3) y la propiedad 4 de la proposición (2.1). Por último, basta dividir por la norma $\|U^{n+1}\|_1$. □

5.4. Convergencia

Teorema 5.3 (Convergencia débil de L1) *Sea $u(x, t) \equiv u(t) \in C^3([0, T])$ la solución exacta del problema homogéneo asociado a (1) y sea U^j , $j = 0, \dots, N$ la solución de la aproximación numérica dada en el esquema (3). Entonces se tiene que el error cumple:*

1. Para $0 \leq \alpha < 1$:

$$e_j = \|u(t_j) - U^j\|_1 \leq c_1 T^\alpha \tau^{2-\alpha}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N$$

2. Para $\alpha \rightarrow 1$:

$$e_j = \|u(t_j) - U^j\|_1 \leq c_2 T \tau, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N$$

donde c_1, c_2 son constantes a determinar.

Demostración. El error global absoluto viene dado por la diferencia entre la solución exacta y la aproximada dada por el método numérico en un punto de la malla. Recordemos que, por definición de error local de truncamiento, la solución exacta de la ecuación diferencial verifica la ecuación del método numérico más el error local de truncamiento. Con esto pasamos a la demostración.

Para cualquier valor de α se tiene que el valor de la solución exacta y aproximada en tiempo cero es el dato inicial, por lo que:

$$\|e_0\|_1 = \|u(t_0) - U^0\|_1 = 0,$$

y se cumplen las desigualdades trivialmente. Demostramos cada una de las implicaciones para $j \neq 0$.

1. Para $0 \leq \alpha < 1$: se demostrará haciendo uso de la inducción matemática. Empezaremos probando que se cumple la acotación:

$$\|e_j\|_1 = \|u(t_j) - U^j\|_1 \leq c_u (b_{n+1-j}^n)^{-1} \tau^2, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

Para $j = 1$ usamos la ecuación (2) tanto para la solución numérica como para la exacta, tal que:

$$\begin{aligned} \beta^{-1} (U^1 - U^0) &= \frac{\partial^2 U^1}{\partial x^2}, \\ \beta^{-1} (u(t_1) - u(t_0)) &= \frac{\partial^2 u(t_1)}{\partial x^2} + R_\tau^1. \end{aligned}$$

Restando la segunda ecuación a la primera y reordenando llegamos a:

$$e_1 - e_0 = \beta \frac{\partial^2 e_1}{\partial x^2} + \beta R_\tau^1 \iff e_1 - \beta \frac{\partial^2 e_1}{\partial x^2} = e_0 + \beta R_\tau^1.$$

Si se usa ahora la formulación débil del problema queda que:

$$(e_1, \varphi)_0 + \beta \left(\frac{\partial e_1}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_0 = (e_0, \varphi)_0 + \beta (R_\tau^1, \varphi)_0 = \beta (R_\tau^1, \varphi)_0, \quad \forall \varphi \in H_0^1([0, T]).$$

Donde se ha usado que $e_0 = 0$. Particularizando para $\varphi = e_1$:

$$\|e_1\|_1^2 = \|e_1\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial e_1}{\partial x} \right\|_0^2 = \beta (R_\tau^1, e_1) \leq \beta \|R_\tau^1\|_0 \|e_1\|_0.$$

Dividiendo por la norma $\|e_1\|_1$ y usando el teorema (2.3) se llega al resultado:

$$\|e_1\|_1 \leq \beta \|R_\tau^1\|_0 \leq c_u \tau^2 = c_u (b_n^n)^{-1} \tau^2,$$

donde se ha tenido en cuenta que $\beta \equiv \beta(\tau)$ y que $b_n^n = 1$. Suponiendo el teorema cierto para $j = 1, 2, \dots, n$, para $j = n + 1$ usamos el desarrollo de la ecuación (5) añadiendo el error de truncamiento (junto con el factor β tras operar):

$$\begin{aligned} U^{n+1} - \beta \frac{\partial^2 U^{n+1}}{\partial x^2} &= U^n (1 - b_{n-1}^n) + b_0^n U^0 + \sum_{j=1}^{n-1} U^j \cdot (b_j^n - b_{j-1}^n), \\ u(t_{n+1}) - \beta \frac{\partial^2 u(t_{n+1})}{\partial x^2} &= u(t_n) (1 - b_{n-1}^n) + b_0^n u(t_0) + \sum_{j=1}^{n-1} u(t_j) \cdot (b_j^n - b_{j-1}^n) + \beta R_\tau^{n+1}. \end{aligned}$$

Restando ambas ecuaciones y $\forall \varphi \in H_0^1([0, T])$, podemos escribir la formulación débil del problema como sigue:

$$\begin{aligned} (e_{n+1}, \varphi)_0 + \beta \left(\frac{\partial e_{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_0 \\ = (1 - b_{n-1}^n)(e_n, \varphi)_0 + b_0^n(e_0, \varphi)_0 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n)(e_j, \varphi)_0 + \beta(R_\tau^{n+1}, \varphi)_0. \end{aligned}$$

Particularizando para $\varphi = e_{n+1}$ y volviendo a considerar $e_0 = 0$ tenemos:

$$\begin{aligned} \|e_{n+1}\|_1^2 &= \|e_{n+1}\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial e_{n+1}}{\partial x} \right\|_0^2 \\ &\stackrel{1}{\leq} (1 - b_{n-1}^n) \|e_n\|_0 \|e_{n+1}\|_0 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \|e_j\|_0 \|e_{n+1}\|_0 + \beta \|R_\tau^{n+1}\|_0 \|e_{n+1}\|_0 \\ &\stackrel{2}{\leq} (1 - b_{n-1}^n) \|e_n\|_1 \|e_{n+1}\|_1 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \|e_j\|_1 \|e_{n+1}\|_1 + \beta \|R_\tau^{n+1}\|_0 \|e_{n+1}\|_1 \\ &\stackrel{3}{\leq} c_u \tau^2 \left((1 - b_{n-1}^n) (b_1^n)^{-1} + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) (b_{n+1-j}^n)^{-1} + 1 \right) \|e_{n+1}\|_1 \\ &\stackrel{4}{\leq} c_u \tau^2 (b_0^n)^{-1} \underbrace{\left((1 - b_{n-1}^n) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) + b_0^n \right)}_{=1} \|e_{n+1}\|_1 \\ &= c_u (b_0^n)^{-1} \tau^2 \|e_{n+1}\|_1, \end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la desigualdad de Schwarz, en (2) la relación entre las normas y en (3) la hipótesis de inducción. Para (4) se ha hecho uso de la propiedad 2 de la proposición (2.1) teniendo en cuenta que estamos tratando con los inversos de los pesos. Dividiendo por la norma $\|e_{n+1}\|_1$ tenemos el resultado.

Una vez tenemos probada esta acotación, usando la definición de los pesos de la discretización se puede ver que la función:

$$\phi(x) = \frac{x^{-\alpha}}{x^{1-\alpha} - (x-1)^{1-\alpha}} = x^{-\alpha},$$

es creciente al ser $\phi'(x) > 0$, $\forall x > 1$, $\alpha \in [0, 1]$. Además, $j^{-\alpha} (b_{n+1-j}^n)^{-1} = 1$ para $j = 1$ y usando el mismo desarrollo de Taylor de $(1+x)^a$ usado en el teorema 2.4 se llega a que:

$$\phi(x) = \frac{1}{x - x(1 - \frac{1}{x})^{1-\alpha}} \rightarrow \frac{1}{1 - \alpha}, \quad x \rightarrow \infty$$

Con esto, concluimos que para todo valor de $j = 1, 2, \dots, N$ tal que $j\tau \leq T$:

$$\|e_j\|_1 \leq c_u (b_{n+1-j}^n)^{-1} \tau^2 = c_u j^{-\alpha} (b_{n+1-j}^n)^{-1} j^\alpha \tau^2 \leq \frac{c_u}{1 - \alpha} (j\tau)^\alpha \tau^{2-\alpha} \leq c_{u,\alpha} T^\alpha \tau^{2-\alpha}.$$

2. Para $\alpha \rightarrow 1$: démonos cuenta que en este caso, la acotación del apartado anterior no es válida, puesto que $c_{u,\alpha} \rightarrow \infty$. Hay que buscar una cota distinta. Veamos primero que:

$$\|e_j\|_1 = \|u(t_j) - U^j\|_1 \leq c_u j \tau^2, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

ya que esta cota es análoga a la del enunciado, usando que $j\tau < T$. Al igual que en el otro caso, lo probaremos por inducción. Para $j = 1$, podemos usar el desarrollo anterior para llegar a:

$$\|e_1\|_1 \leq c_u \tau^2.$$

Por lo que la acotación es trivial. Si se supone cierto para $j = 1, 2, \dots, n$, para $j = n + 1$ podemos usar el mismo desarrollo anterior hasta el paso de inducción, donde usaremos la nueva cota, tal que se tiene:

$$\begin{aligned} \|e_{n+1}\|_1^2 &= \|e_{n+1}\|_0^2 + \beta \left\| \frac{\partial e_{n+1}}{\partial x} \right\|_0^2 \\ &\stackrel{1}{\leq} (1 - b_{n-1}^n) \|e_n\|_0 \|e_{n+1}\|_0 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \|e_j\|_0 \|e_{n+1}\|_0 + \beta \|R_\tau^{n+1}\|_0 \|e_{n+1}\|_0 \\ &\stackrel{2}{\leq} (1 - b_{n-1}^n) \|e_n\|_1 \|e_{n+1}\|_1 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \|e_j\|_1 \|e_{n+1}\|_1 + \beta \|R_\tau^{n+1}\|_0 \|e_{n+1}\|_1 \\ &\stackrel{3}{\leq} c_u \tau^2 \left((1 - b_{n-1}^n) n + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) j + 1 \right) \|e_{n+1}\|_1 \\ &= c_u \tau^2 (n + 1) \left((1 - b_{n-1}^n) \frac{n}{n+1} + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \frac{j}{n+1} + \frac{1}{n+1} \right) \|e_{n+1}\|_1. \end{aligned}$$

Para terminar la demostración, vemos que basta demostrar que el término central entre paréntesis es menor que 1. Veamos que esto lo podemos hacer. Empezamos separando las fracciones para poder usar la propiedad 4 de la Proposición 2.1:

$$(1 - b_{n-1}^n) \left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \left(1 - \frac{n+1-j}{n+1}\right) + \frac{1}{n+1}.$$

Por otro lado, podemos encontrar la cota:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n+1} &= \frac{1}{n+1} \left((1 - b_{n-1}^n) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) + b_0^n \right) \\ &\leq \frac{1}{n+1} \left((1 - b_{n-1}^n) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) (n+1-j) + b_0^n \right). \end{aligned}$$

Que reordenando queda como:

$$-(1 - b_{n-1}^n) \frac{1}{n+1} - \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \frac{n+1-j}{n+1} + \frac{1}{n+1} \leq b_0^n.$$

Por tanto, sustituyendo ambos desarrollos en la cota del error obtenemos:

$$\begin{aligned}
\|e_{n+1}\|_1 &\leq c_u \tau^2 (n+1) \left((1 - b_{n-1}^n) \frac{n}{n+1} + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \frac{j}{n+1} + \frac{1}{n+1} \right) \\
&= c_u \tau^2 (n+1) \left((1 - b_{n-1}^n) \left(1 - \frac{1}{n+1} \right) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) \left(1 - \frac{n+1-j}{n+1} \right) + \frac{1}{n+1} \right) \\
&\leq c_u \tau^2 (n+1) \left((1 - b_{n-1}^n) + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j^n - b_{j-1}^n) + b_0^n \right) \\
&= c_u \tau^2 (n+1).
\end{aligned}$$

De manera que queda probado.

□

6. Estudio numérico

Esta última sección está dedicada al estudio numérico del problema. Puesto que las soluciones deben de cumplir ciertas condiciones de regularidad, como es ser C^2 en tiempo y C^4 en espacio, se usarán distintos ejemplos de soluciones para comprobar el error del método implícito. Se usarán soluciones con la suficiente regularidad para comprobar si el error es el que estima la teoría y soluciones no regulares para comprobar su comportamiento.

Lo primero que se hará es definir correctamente el problema de contorno a estudiar y calcular la solución exacta. Como veremos en el siguiente apartado, hay formas de calcular la solución exacta para estos problemas, pero habrá que tener en cuenta la regularidad de la solución obtenida.

6.1. Solución exacta

Sea pues el problema de contorno siguiente:

$$\begin{cases} D_C^\alpha u(x, t) - \Delta u(x, t) = 0, & x \in [0, 1] \quad t \in [0, 1] \\ u(x, t) = 0, & x = \{0, 1\} \quad t \in [0, 1] \\ u(x, 0) = g(x), & x \in [0, 1] \end{cases} \quad (17)$$

Vamos a empezar tratando el problema de contorno con la ecuación homogénea asociada, tal que $f(x, t) = 0$ y el dominio acotado $x, t \in [0, 1] \times [0, 1]$. Para encontrar la solución exacta podemos proceder por separación de variables. Sea:

$$u(x, t) = X(x) \cdot T(t).$$

De manera que sustituyendo en la ecuación de difusión y operando tenemos:

$$\frac{T^\alpha(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda,$$

donde se ha abreviado usando la notación $D_C^\alpha T(t) \sim T^\alpha(t)$ y λ es una constante. Como ya sabemos, para el caso $\lambda \geq 0$ no hay solución del problema de contorno, ya que al imponer las condiciones en el borde nulas, se obtiene la solución $u(x, t) \sim 0$. Así, para $\lambda = -\omega^2 < 0$ tenemos que la parte espacial es una combinación de funciones trigonométricas:

$$X(x) = A \cos(\omega x) + B \sin(\omega x).$$

Imponiendo $u(0, t) = u(1, t) = 0$ debe de cumplirse que $X(0) = X(1) = 0$ (ya que si no tendríamos $T(t) \sim 0$). Esto lleva directamente a $A = 0$ y $\sin(\omega) = 0$ tal que la solución es:

$$X(x) = B \sin(n\pi x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(n\pi x).$$

Pasamos a resolver ahora la parte temporal. Usando los valores propios obtenidos en la parte espacial tenemos que la ecuación a resolver es:

$$\frac{T^\alpha(t)}{T(t)} = -\omega^2 = -(n\pi)^2 \iff T^\alpha(t) + n^2 \pi^2 T(t) = 0.$$

La solución de este tipo de ecuaciones diferenciales ordinarias con derivada fraccionaria está desarrollada en la sección 7, en particular, en el ejemplo 2. Recordemos que:

$$Y^\alpha(y) = \lambda Y(y) \implies Y(y) = Y(0)E_{\alpha,1}(\lambda y^\alpha).$$

Donde se ha abreviado $D_C^\alpha Y(y) \sim Y^\alpha(y)$ y $E_{\alpha,\beta}(\cdot)$ es la función de Mittag-Leffler de dos parámetros definida en A.5. Sustituyendo todos los datos tenemos:

$$T(t) = T(0)E_{\alpha,1}(-n^2\pi^2t^\alpha).$$

Donde $T(0)$ es una constante independiente de x . De esta manera, al juntar la solución espacial y temporal podemos juntar los coeficientes de la forma $C_n = T(0)B_n$. Imponiendo la condición inicial:

$$u(x, 0) = X(x) \cdot T(0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x).$$

Y podemos obtener los coeficientes de la serie aplicando Fourier:

$$C_n = 2 \int_0^1 g(x) \sin(n\pi x) dx.$$

Observación 6.1 Claramente, si la condición inicial es una de las funciones de la base de Fourier $g(x) = \sin(m\pi x)$ para algún m fijo, obtenemos que los coeficientes de la serie son $C_m = 1$ y $C_n = 0$ para $n \neq m$. Esto es especialmente útil ya que usando condiciones iniciales de este tipo se ahorra mucho tiempo computacional.

Observación 6.2 La solución exacta para el problema de contorno homogéneo que acabamos de resolver es:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x) E_{\alpha,1}(-t^\alpha n^2 \pi^2).$$

Si recordamos el teorema 2.3, el orden del error local de truncamiento del método implícito es de $\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha})$ siempre y cuando la solución exacta tuviese regularidad $C^2([0, T])$ en tiempo. Sin embargo, esto no ocurre con la solución del problema homogéneo, ya que la función de Mittag-Leffler se comporta como t^α cerca del origen y, como mucho, tendrá regularidad C^α para $0 < \alpha < 1$.

Queda claro que si usamos este tipo de soluciones, el error obtenido no tendría por qué ser el obtenido en teoría. Por ello, se debe de buscar una forma de encontrar soluciones al problema que sean suficientemente regulares. Lo más sencillo será imponer una solución al problema de contorno y entrar en la primera ecuación de 1. En caso de que se pueda computar la derivada fraccionaria de Caputo de esa función, bastará con llamar $f(x, t)$ a la resta $D_C^\alpha u(x, t) - \Delta u(x, t)$. Obviamente, ya no se trataría del problema homogéneo.

6.2. Solución C^2 en tiempo

Puesto que ahora vamos a tratar el problema no homogéneo, no podemos considerar $f(x, t) \equiv 0$ como se ha hecho hasta ahora. Puesto que el esquema implícito desarrollado lo hemos hecho con esa suposición, se reescribirá ahora teniendo en cuenta el término de forzamiento $f(x, t)$. Entrando en la ecuación 8, basta añadir esta función evaluada en los puntos de la malla en el lado derecho:

$$\begin{aligned} I^\alpha U_m^{n+1} &:= \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^n b_j^n \cdot (U_m^{j+1} - U_m^j) \\ &= \frac{U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}}{h^2} + f(x_m, t_{n+1}) \\ &=: \Delta_h U_m^{n+1} + f_m^{n+1}, \end{aligned}$$

donde se ha abreviado $f(x_m, t_{n+1}) = f_m^{n+1}$. Despejando la solución en tiempos posteriores, se tiene:

$$U_m^{n+1} - \frac{\beta}{h^2} (U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1} - 2U_m^{n+1}) = b_0^n U_m^0 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot U_m^j + \beta f_m^{n+1}.$$

Escrito de forma matricial es más sencillo de interpretar:

$$\left(\left(1 + \frac{2\beta}{h^2} \right) \mathcal{I} - \frac{\beta}{h^2} \mathcal{A} \right) \mathcal{U}^{n+1} = b_0^n \cdot \mathcal{U}^0 + \sum_{j=1}^n (b_j^n - b_{j-1}^n) \cdot \mathcal{U}^j + \beta f_m^{n+1},$$

donde las matrices y vectores son los mismos que se explicaron en la sección dedicada al método implícito.

6.3. Ejemplo 1: solución regular

Con las ideas que se acaban de comentar, tratemos de encontrar una solución que cumpla con las hipótesis de regularidad. Para ello imponemos una solución exacta que sea C^2 en tiempo y C^4 en espacio. Además, la solución debe de anularse en los extremos, de manera que un ejemplo sencillo es tomar:

$$u(x, t) = t^2 x(1-x).$$

Haciendo la derivada de Caputo en tiempo, la segunda derivada en espacio y restando ambas expresiones se obtiene:

$$f(x, t) = \frac{2}{\Gamma(3-\alpha)} t^{2-\alpha} x(1-x) + 2t^2.$$

Como se está imponiendo la solución exacta del problema, debe de ser $g(x) = u(x, 0) = 0$.

Como se puede ver en la Figura 1, el orden teórico y el experimental coinciden con una precisión de un decimal. Sin embargo, se pueden encontrar soluciones en las que el orden de error es incluso mejor que el calculado teóricamente.

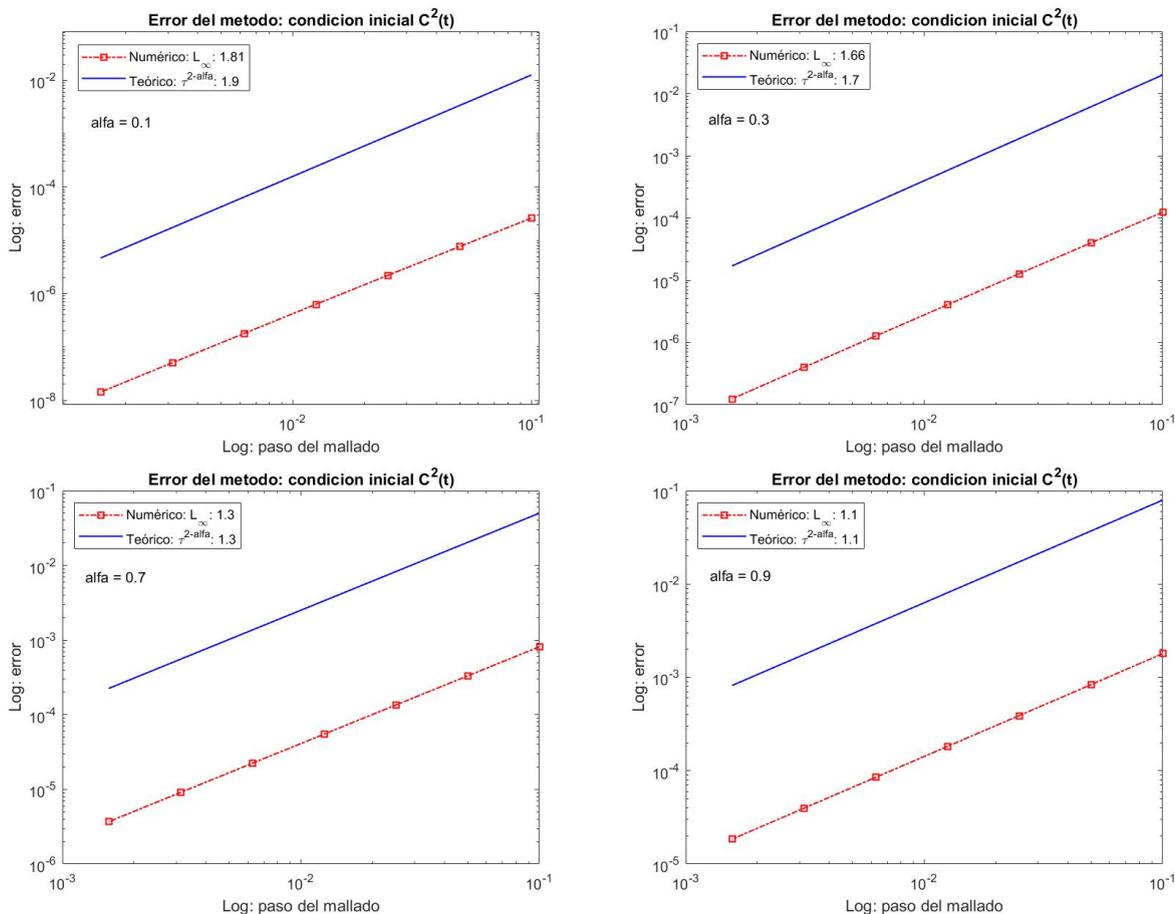


Figura 1: Gráficas de error para el método implícito usando una solución regular en tiempo para distintos valores de α .

Usando como solución exacta:

$$u(x, t) = t^2 \sin(2\pi x).$$

Claramente esta función es $u(x, t) \in C^4([0, 1]) \times C^2([0, 1])$. En este caso, la función del problema no homogéneo queda:

$$f(x, t) = \frac{2}{\Gamma(3 - \alpha)} t^{2-\alpha} \sin(2\pi x) + 4\pi^2 t^2 \sin(2\pi x).$$

En la Figura 2 se representan los errores del método usando los mismo pasos y órdenes de la derivada fraccionaria que en el ejemplo anterior. Como se puede comprobar, pendiente del orden de error calculada numéricamente para este problema es mayor que la teórica, siendo cercana a $1,7 - 2$.

De esta manera, vemos que el orden de error de las soluciones con suficiente regularidad cumple que es siempre mayor o igual que el obtenido en teoría de $\mathcal{O}(\tau^{2-\alpha})$. Sin embargo, ya se ha comentado que las soluciones exacta para el problema homogéneo no cumplen con la condición de regularidad necesaria cerca del origen. Veamos cómo se comporta su error.

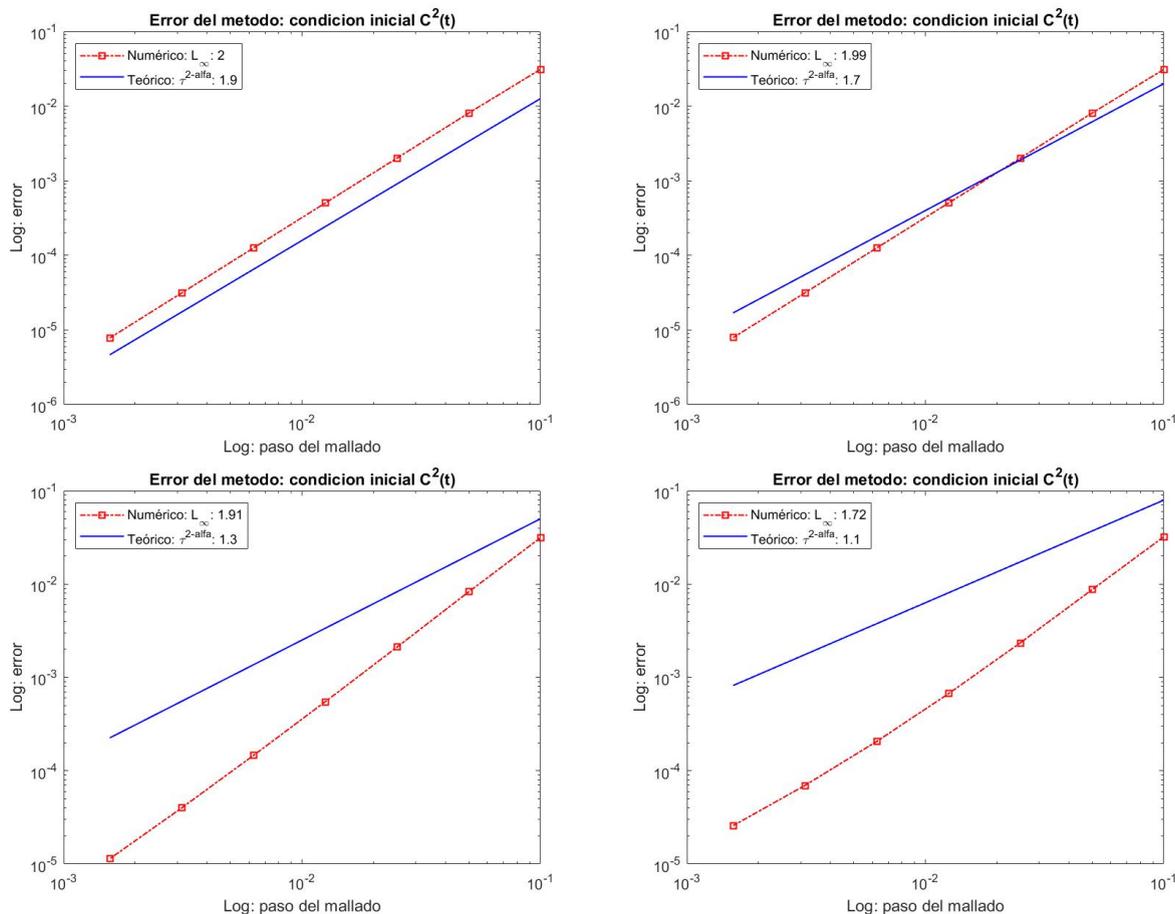


Figura 2: Gráficas de error para el método implícito usando una solución regular en tiempo para distintos valores de α .

6.4. Ejemplo 2: solución no regular

Para esta parte se usarán las soluciones desarrolladas en el apartado anterior sobre soluciones exactas. Recordando la observación 6.1, si usamos como condición inicial $g(x) = \sin(\pi x)$, tenemos que los coeficientes de la serie son todos nulos excepto el primero de ellos, de manera que la solución exacta es:

$$u(x, t) = \sin(\pi x) E_{\alpha, 1}(-t^{\alpha} \pi^2).$$

En la Figura 3 se ha representado el error para la solución no regular definida anteriormente. Salta a la vista que, a diferencia de lo que se veía para las soluciones regulares, ahora el orden del error no depende del orden de la derivada fraccionaria α . En todos los casos parece obtenerse un orden de error de $\mathcal{O}(\tau)$. Los mismos errores se obtienen al probar con la condición inicial $g(x) = x(1 - x)$.

Observación 6.3 Como se ha podido comprobar con el último ejemplo, incluso aunque la solución no sea regular, el método converge con un orden de $\mathcal{O}(\tau)$. Esto se estudia en el trabajo de Bangti (7), donde se trata la ecuación de difusión fraccionaria en tiempo para soluciones no regulares.

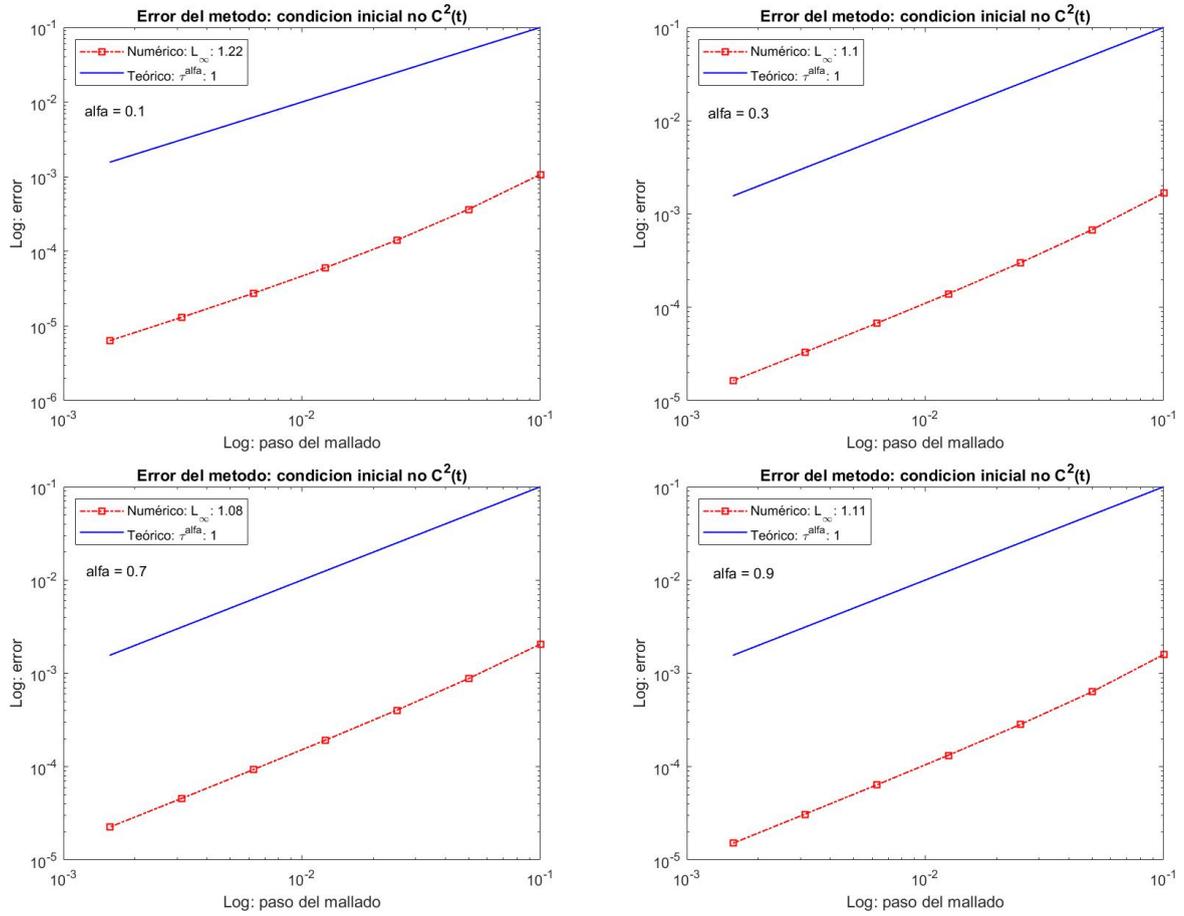


Figura 3: Gráficas de error para el método implícito usando una solución no regular cerca del origen para distintos valores de α .

A. Transformada de Laplace

Definición A.1 (Transformada de Laplace) Sea $f(t)$ una función definida para $t \geq 0$. La función transformada de Laplace denotada como $F(s)$ se define como la integral impropia:

$$F(s) = \mathcal{L}[f(t)] := \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt,$$

para los valores de s donde la integral sea convergente (8).

Observación A.1 Es inmediato comprobar que si $F(s_0)$ es convergente, tal que existe la transformada de Laplace, entonces $F(s)$ es convergente $\forall s \geq x_0$.

Definición A.2 (Función de orden exponencial) Una función $f(t)$ se dice que es de orden exponencial α para $t \rightarrow \infty$ si existen constantes $M, t_0 \in \mathbb{R}^+$ tales que:

$$|f(t)| \leq Me^{\alpha t}, \quad \forall t \geq 0.$$

Como ejemplos de estas funciones tenemos todas las funciones polinómicas, las funciones racionales, trigonométricas, así como las propias exponenciales y logarítmicas.

Teorema A.1 (Existencia de la transformada de Laplace) Si $f(x)$ es una función continua (posiblemente a trozos) y de orden exponencial α , entonces su transformada de Laplace existe para todo $s > \alpha$.

Demostración. Basta acotar la integral que aparece en la transformada de Laplace por otra que sea convergente. Por definición tenemos:

$$\begin{aligned} |\mathcal{L}[f(t)]| &= \left| \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \right| \leq \int_0^{\infty} |e^{-st} f(t)| dt \leq \int_0^{\infty} Me^{(\alpha-s)t} dt = \\ &= M \int_0^{\infty} e^{(\alpha-s)t} dt = \frac{M}{\alpha-s} e^{(\alpha-s)t} \Big|_0^{\infty} = \frac{M}{\alpha-s} \left(e^{(\alpha-s)\infty} - 1 \right), \end{aligned}$$

que será acotado siempre y cuando $\alpha - s < 0$.

□

Definición A.3 (Convolución de funciones) Sean dos funciones $f, g : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ integrables en su dominio de definición. Se define su convolución como:

$$f * g : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} \text{ con } (f * g)(t) = \int_0^t f(t-x)g(x)dx.$$

Proposición A.1 (Conmutatividad) La convolución de dos funciones tal y como se ha definido es conmutativa, tal que se cumple:

$$(f * g)(t) = (g * f)(t).$$

Demostración. Mediante un cambio de variable podemos ver que la convolución es conmutativa, tal que:

$$(f * g)(t) = \int_0^t f(t-x)g(x)dx \stackrel{u=t-x}{=} \int_t^0 f(u)g(t-u)(-du) = \int_0^t f(u)g(t-u)du = (g * f)(t),$$

donde se ha hecho uso en el último paso de que la variable de integración es muda. \square

Proposición A.2 (Propiedades de la transformada de Laplace) Sean $f(t), g(t)$ funciones tales que su transformada de Laplace existe y sean A, B, ω constantes. Entonces se verifican las siguientes propiedades:

1. *Linealidad:* $\mathcal{L}[Af(t) + Bg(t)] = A\mathcal{L}[f(t)] + B\mathcal{L}[g(t)]$.
2. *Traslación en frecuencia:* $g(t) = e^{\omega t} f(t) \Rightarrow G(s) = F(s - \omega)$.
3. *Proporcionalidad:* $g(t) = f(At) \Rightarrow G(s) = \frac{1}{A} F\left(\frac{s}{A}\right)$.
4. *Derivada primera:* $g(t) = f'(t) \Rightarrow G(s) = sF(s) - f(0)$.
5. *Derivada n-ésima:* $g(t) = f^{(n)}(t) \Rightarrow G(s) = s^n F(s) - \sum_{i=0}^{n-1} s^{n-1-i} f^{(i)}(0)$.
6. *Convolución:* $\mathcal{L}[(f * g)(t)] = \mathcal{L}[f(t)] \cdot \mathcal{L}[g(t)]$.

Demostración.

1.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[Af(t) + Bg(t)] &:= \int_0^\infty e^{-st} (Af(t) + Bg(t)) dt = \int_0^\infty e^{-st} Af(t) + e^{-st} Bg(t) dt = \\ &= A \int_0^\infty e^{-st} f(t) + B \int_0^\infty e^{-st} g(t) dt = A\mathcal{L}[f(t)] + B\mathcal{L}[g(t)]. \end{aligned}$$

$$2. \mathcal{L}[e^{\omega t} f(t)] := \int_0^\infty e^{-st} e^{\omega t} f(t) dt = \int_0^\infty e^{(\omega-s)t} f(t) dt = F(s - \omega).$$

$$3. \mathcal{L}[f(At)] = \int_0^\infty e^{-st} f(At) dt = \int_0^\infty e^{-s(u/A)} f(u) \frac{du}{A} = \frac{1}{A} F\left(\frac{s}{A}\right).$$

$$4. \mathcal{L}[f'(t)] = \int_0^\infty e^{-st} f'(t) dt. \text{ Resolvemos la integral por partes:}$$

$$\begin{cases} u = e^{-st}; & du = -se^{-st}, \\ dv = f'(t)dt; & v = f(t). \end{cases}$$

de manera que entrando en la expresión anterior tenemos:

$$\mathcal{L}[f'(t)] = e^{-st} f(t) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty s f(t) e^{-st} dt = [e^{-\infty} f(\infty) - f(0)] + s \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt = sF(s) - f(0),$$

donde se ha usado que $f(t)$ es una función de orden exponencial α , por lo que la función es acotada. Así, solo tiene sentido considerar la transformada para $s > \alpha$.

5. No es más que una generalización del caso anterior, integrando sucesivamente por partes.
6. Por definición tanto de la transformada de Laplace como de la convolución de dos funciones tenemos:

$$\mathcal{L}[(f * g)(t)] = \int_0^\infty e^{-st}(f * g)(t)dt = \int_0^\infty e^{-st} \left[\int_0^t f(t-x)g(x)dx \right] dt = \dots$$

La idea ahora es cambiar el orden de integración, para lo cual tenemos que cambiar los límites. Tenemos en cuenta que:

$$\mathcal{M} = \{x, t \in \mathbb{R}^+ : 0 < x < t\} = \{x, t \in \mathbb{R}^+ : x < t < \infty\},$$

volviendo a nuestro desarrollo tenemos que:

$$\begin{aligned} \dots &= \int_0^\infty \int_x^\infty f(t-x)g(x)e^{-st} dt dx \stackrel{1}{=} \int_0^\infty g(x)dx \int_x^\infty f(t-x)e^{-st} dt \stackrel{2}{=} \\ &= \int_0^\infty g(x)dx \int_0^\infty f(u)e^{-s(u+x)} du = \int_0^\infty g(x)dx \int_0^\infty f(u)e^{-su}e^{-sx} du \stackrel{3}{=} \\ &= \int_0^\infty e^{-sx}g(x)dx \int_0^\infty e^{-su}f(u)du = \mathcal{L}[f(t)] \cdot \mathcal{L}[g(t)], \end{aligned}$$

donde en (1) y (3) se han separado las variables de integración y en (2) se ha hecho uso del cambio de variable $u = t - x$.

□

Ejemplo 1 (Transformada de Laplace de $f(t) = t^n$) A modo de ejemplo y puesto que más tarde la necesitaremos para resolver el problema de contorno inicial, resolveremos esta transformada. Para ello trabajaremos por inducción.

$$1. \mathcal{L}[t] = \int_0^\infty e^{-st}t dt \stackrel{1}{=} \int_0^\infty e^{-u} \left(\frac{u}{s}\right) \frac{du}{s} = \frac{1}{s^2} \int_0^\infty e^{-u}u du \stackrel{2}{=} \frac{1}{s^2} \Gamma(2),$$

donde en (1) se ha hecho uso del cambio de variable $u = st$ y en (2) la definición de la función Gamma de Euler.

$$2. \text{ Hipótesis de inducción: } \mathcal{L}[t^n] = \frac{\Gamma(n+1)}{s^{n+1}}.$$

$$3. \mathcal{L}[t^{n+1}] = \int_0^\infty s^{-st}t^{n+1} dt \stackrel{1}{=} \int_0^\infty t^{n+1} \frac{1}{s} e^{-st} dt \stackrel{2}{=} \frac{n+1}{s} \int_0^\infty e^{-st}t^n dt = \frac{n+1}{s} \mathcal{L}[t^n] \stackrel{2}{=} \frac{\Gamma(n+2)}{s^{n+2}},$$

donde en (1) se ha integrado por parte tomando $u = t^{n+1}$ y en (2) se ha usado la propiedad de la función Gamma $n\Gamma(n) = \Gamma(n+1)$.

Definición A.4 (Derivada fraccionaria de Caputo) Sea $\alpha \in \mathbb{R}^+$ y $n = [\alpha] + 1$. La derivada fraccionaria de orden α de Caputo se define como:

$$D_C^\alpha[f(x)] = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^x (x-t)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(t) dt.$$

Observación A.2 Recordando la definición de convolución de dos funciones definida anteriormente, se puede ver fácilmente que la derivada fraccionaria de Caputo se puede escribir como:

$$D_C^\alpha[f(x)] = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(t^{n-\alpha-1} * f^{(n)} \right) (t).$$

Teorema A.2 (Transformada de Laplace de D_C^α) Dada la derivada fraccionaria de Caputo de orden α tal como se ha descrito antes, su transformada de Laplace es:

$$\mathcal{L}[D_C^\alpha(f(x))] = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0).$$

Demostración. La forma más sencilla de demostrarlo es usando la representación de la derivada de Caputo en forma de convolución de funciones. Puesto que ya se ha visto cuál es la transformada de Laplace de la convolución, basta sustituir:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[D_C^\alpha(f(x))] &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L}\left[t^{n-\alpha-1} * f^{(n)}\right] \stackrel{1}{=} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L}[t^{n-\alpha-1}] \cdot \mathcal{L}[f^{(n)}] \stackrel{2}{=} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \cdot \frac{\Gamma(n-\alpha)}{s^{n-\alpha}} \left(s^n F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} f^{(k)}(0) \right) = \\ &= \frac{1}{s^{n-\alpha}} \left(s^n F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} f^{(k)}(0) \right) = \\ &= s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0), \end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la propiedad de la transformada de la convolución de funciones y en (2) se han usado los resultados anteriormente obtenidos para cada una de las transformadas que aparecen. □

Definición A.5 (Mittag-Leffler) La función de Mittag-Leffler de dos parámetros se define como la serie:

$$E_{\alpha,\beta}(t) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)},$$

donde $t, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ y $\operatorname{Re}(\alpha), \operatorname{Re}(\beta) > 0$ (9).

Observación A.3 Démonos cuenta que podemos obtener funciones muy conocidas para distintos parámetros α y β , como por ejemplo:

$$E_{1,1}(t) = e^t; \quad E_{0,1}(t) = \frac{1}{1-t}; \quad E_{2,1}(t) = \cosh \sqrt{t};$$

Teorema A.3 (Transformada de Laplace de Mittag-Leffler) Dada la función de Mittag-Leffler de dos parámetros $E_{\alpha,\beta}(t)$, se cumple que su transformada de Laplace existe y vale:

$$\mathcal{L}\left[t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(\mp \lambda t^\alpha)\right] = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha \pm \lambda},$$

siempre y cuando se cumple que $\operatorname{Re}(s) > |\lambda|^{-\alpha}$.

Demostración.

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} \left[t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(\mp \lambda t^\alpha) \right] &\stackrel{1}{=} \int_0^\infty e^{-st} t^{\beta-1} \sum_{k=0}^\infty \frac{(\mp \lambda)^k t^{\alpha k}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} dt \\
&\stackrel{2}{=} \sum_{k=0}^\infty \frac{(\mp \lambda)^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\beta-1} t^{\alpha k} dt \\
&= \sum_{k=0}^\infty \frac{(\mp \lambda)^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \mathcal{L} \left[t^{\alpha k + \beta - 1} \right] \\
&= \sum_{k=0}^\infty \frac{(\mp \lambda)^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \cdot \frac{\Gamma(\alpha k + \beta)}{s^{\alpha k + \beta}} \\
&= \sum_{k=0}^\infty \frac{1}{s^\beta} \left(\frac{\mp \lambda}{s^\alpha} \right)^k = \frac{1}{s^\beta} \cdot \frac{1}{1 - \frac{\mp \lambda}{s^\alpha}} \\
&= \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha \pm \lambda},
\end{aligned}$$

donde en (1) se ha usado la definición de la transformada de Laplace y de la función de Mittag-Leffler, en (2) se ha sacado de la integral todo lo que no depende de la variable de integración (t), incluida la suma puesto que solo tiene sentido cuando la serie es convergente, y en el resto de pasos se ha vuelto a usar la transformada de t^n así como la definición de serie geométrica. \square

Ejemplo 2 (Oscilador armónico fraccionario) Una vez se ha introducido la teoría sobre cómo resolver problemas de contorno en el que intervienen derivadas fraccionarias (10) (con la definición de Caputo) usando la transformada de Laplace, terminamos la sección formulando un ejemplo de lo más sencillo. Este será usado en la solución exacta de la ecuación de difusión fraccionaria en tiempo. Sea el problema de contorno definido por la ecuación siguiente:

$$\begin{cases} D_C^\alpha[y(x)] = \lambda y(x) + f(x), & x > 0, \alpha \in (0, 1) \\ y(0) = A, & A \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Puesto que $0 < \alpha < 1$, tenemos que $n = [\alpha] + 1 = 1$. Aplicando la transformada de Laplace a ambos miembros de la ecuación obtenemos:

- $\mathcal{L}[D_C^\alpha(y(x))] = s^\alpha Y(s) - s^{\alpha-1} y(0) = s^\alpha Y(s) - s^{\alpha-1} A.$
- $\mathcal{L}[\lambda y(x) + f(x)] = \lambda Y(s) + F(s).$

donde se ha usado la notación $\mathcal{L}[y(x)] = Y(s)$ y $\mathcal{L}[f(x)] = F(s)$. Si igualamos ambas partes y despejamos se tiene:

$$Y(s) = A \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} + \frac{F(s)}{s^\alpha - \lambda}.$$

No es difícil notar que se obtiene la transformada de Laplace de las funciones de Mittag-Leffler para distintos parámetros. Recordando el resultado anterior:

$$\mathcal{L} \left[t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(\mp \lambda t^\alpha) \right] = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha \pm \lambda}.$$

Podemos tomar la transformada de Laplace inversa para calcular la solución:

$$y(x) = \mathcal{L}^{-1}[Y(s)] = AE_{\alpha,1}(\lambda x^\alpha) + \mathcal{L}^{-1}\left[\frac{F(s)}{s^\alpha - \lambda}\right].$$

Para calcular el último término, podemos usar el teorema de convolución y notar que:

$$\mathcal{L}^{-1}[F(s) \cdot G(s)] = f * g = \mathcal{L}^{-1}[F(s)] * \mathcal{L}^{-1}[G(s)].$$

De manera que nos queda:

$$\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{F(s)}{s^\alpha - \lambda}\right) = \mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^\alpha - \lambda}\right] * \mathcal{L}^{-1}[F(s)] = x^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(\lambda x^\alpha) * f(x).$$

Por tanto, la solución del sistema de contorno vienen dada por:

$$y(x) = AE_{\alpha,1}(\lambda x^\alpha) + \int_0^x t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}[\lambda t^\alpha]f(x-t) dt.$$

Observación A.4 Las funciones de Mittag-Leffler forman un sistema fundamental de soluciones para el problema homogéneo asociado. Por supuesto, una de las dificultades con la que nos encontramos es poder resolver la integral que aparece en la convolución para la solución particular.

B. Formulaci3n d3bil de un problema de contorno

Al desarrollar el esquema L1 semi-discreto (discretizando solamente en tiempo), no se obtienen soluciones todo lo regulares que nos gustar3a, de hecho, ni siquiera tienen por qu3 ser regulares. Esto significa que no podemos encontrar soluciones fuertes o cl3sicas, que mantienen la regularidad en todo el intervalo. El problema surge cuando los datos de la ecuaci3n diferencial del problema de contorno no verifican ciertas hip3tesis de regularidad (por ejemplo si est3n en L^2). Por ello surge la necesidad de definir otro tipo de soluciones que no sean necesariamente regulares en todos los puntos del intervalo.

Consideremos el problema de contorno lineal en forma variacional (11) definido como:

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} x(x) \right) + q(x)x(x) = f(x), & x \in [x_0, L] \\ x(x_0) = a, x(L) = b \end{cases} \quad (18)$$

Supongamos que los coeficientes cumplen: $p \in C^1([x_0, L])$ y $q, f \in C([x_0, L])$. Sea $\phi(x) \in C^1([x_0, L])$ una funci3n cualquiera a la que llamaremos funci3n test. Multiplicando la ecuaci3n (18) por esta funci3n e integrando en el intervalo $I = [x_0, L]$ obtenemos lo siguiente:

$$-\int_{x_0}^L \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} x(x) \right) \varphi(x) dx + \int_{x_0}^L q(x)x(x)\varphi(x) dx = \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x) dx.$$

El primer t3rmino de la ecuaci3n anterior podemos integrarlo por partes, de manera que tenemos:

$$\int_{x_0}^L \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} x(x) \right) \varphi(x) dx = \left. p(x)x'(x)\varphi(x) \right]_{x_0}^L - \int_{x_0}^L p(x)x'(x)\varphi'(x) dx.$$

Sustituyendo llegamos a la siguiente expresi3n:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^L p(x)x'(x)\varphi'(x) dx + \int_{x_0}^L q(x)x(x)\varphi(x) dx &= \\ &= \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x) dx + \left. p(x)x'(x)\varphi(x) \right]_{x_0}^L. \end{aligned}$$

D3monos cuenta que nuestro problema (18) est3 definido con condiciones tipo Dirichlet, por lo que los valores de la derivada $x'(x)$ en el contorno no los conocemos. As3, para simplificar la expresi3n anterior, pediremos a la funci3n test $\varphi(x)$ que se anule en los extremos del intervalo. As3 la ecuaci3n se simplifica a:

$$\int_{x_0}^L p(x)x'(x)\varphi'(x) dx + \int_{x_0}^L q(x)x(x)\varphi(x) dx = \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x) dx. \quad (19)$$

Observaci3n B.1 1. D3monos cuenta que, a diferencia de los problemas de contorno de segundo orden en los que la soluci3n deb3a de ser una funci3n C^2 , en este caso vale con que sea C^1 , de hecho H^1 . Por as3 decirlo, un orden de regularidad se lo hemos pasado a la funci3n test.

2. Para que la ecuaci3n (19) est3 bien definida, las integrales deben de ser finitas. Al ser $x, \varphi \in C^1([x_0, L])$, basta con que los coeficientes p, q, f sean integrables.

3. Por último, ni siquiera es necesario que la solución x sea C^1 , basta con que sea integrable (al estar la derivada definida dentro de la integral) por lo que el tipo de soluciones que estamos buscando estarán bien definidas incluso cuando x' tenga discontinuidades.

Definición B.1 (Derivación débil) Diremos que una función $x \in L^2([x_0, L])$ es derivable en sentido débil si existe una función $g \in L^2([x_0, L])$ tal que se cumple:

$$\int_{x_0}^L x(x)\phi'(x)dx = - \int_{x_0}^L g(x)\phi(x)dx,$$

para toda función $\phi \in C_0^1([x_0, L])$. A dicha función g le llamaremos derivada débil de x y la denotaremos como $g = x'$.

Observación B.2 Démonos cuenta que si x es una función derivable con derivada continua, entonces podemos integrar por partes y la expresión anterior se cumple para $g(t) = x'(t)$, la derivada usual. Sin embargo, esta nueva definición de derivada nos servirá para aquellas funciones en las que la derivada clásica no esté bien descrita en todos los puntos, como funciones con discontinuidades.

Antes de definir lo que será una solución débil del problema, introduciremos unos espacios de funciones que están directamente relacionados con lo que acabamos de ver:

$$\begin{aligned} L^2(I) &:= \left\{ v \in I : \int_I |v(x)|^2 dx < \infty \right\}, \\ H^1(I) &:= \{ v \in L^2(I) : v' \in L^2(I) \}, \\ H_0^1(I) &:= \{ v \in H^1(I) : v|_{\partial I} = 0 \}, \end{aligned}$$

donde la derivada que aparece en el espacio H^1 se entiende en sentido débil.

Observación B.3 Démonos cuenta de que necesitamos que las soluciones sean integrables, por lo que deberán de ser L^2 o estar en un subconjunto suyo. Puesto que también necesitamos que lo sea su derivada, es necesario definir un nuevo espacio en el que esto se cumpla. De ahí obtenemos el espacio H^1 . Además, como se ha visto en el desarrollo anterior, nos gustaría llegar a una formulación simplificada del problema, para lo que pedimos que las funciones test, además de lo anterior, cumplan que se anulan en los extremos, es decir, que estén en el espacio H_0^1 . Vemos que es en el espacio H^1 donde interesa buscar las soluciones débiles del problema, y el espacio H_0^1 simplemente es un subespacio del primero, en el que pedimos que la función se anulen en los extremos, para obtener nuestro esquema simplificado.

En estos espacios podemos definir el producto escalar de funciones:

$$(u, v)_{L^2} := \int_{x_0}^L u(x)v(x)dx, \quad u, v \in L^2(I),$$

$$(u, v)_{H^1} := (u, v)_{L^2} + (u', v')_{L^2} = \int_{x_0}^L u(x)v(x)dx + \int_{x_0}^L u'(x)v'(x)dx, \quad u, v \in H^1(I),$$

los cuales inducen las respectivas normas:

$$\|u\|_{L^2} := \sqrt{(u, u)_{L^2}} = \left(\int_{x_0}^L |u(x)|^2 dx \right)^{1/2},$$

$$\|u\|_{H^1} := \sqrt{(u, u)_{H^1}} := \left(\|u\|_{L^2}^2 + \|u'\|_{L^2}^2 \right)^{1/2}.$$

Con esto ya estamos en condiciones de formular de manera precisa la solución débil del problema de contorno (18).

Definición B.2 (Solución débil) Sean p y q funciones continuas a trozos, con un número finito de discontinuidades, todas de salto o evitables y $f \in L^2(x_0, L)$. Diremos que $x(x)$ es una solución débil de (18) si $x \in H_0^1([x_0, L])$ y verifica

$$\int_{x_0}^L p(x)x'(x)\varphi'(x)dx + \int_{x_0}^L q(x)x(x)\varphi(x)dx = \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x)dx,$$

para todas función test $\varphi \in H_0^1([x_0, L])$.

B.1. Existencia y unicidad de soluciones débiles

Definición B.3 (Espacio de Hilbert) Diremos que un espacio vectorial normado es un espacio de Hilbert si:

1. La norma está inducida por un producto escalar.
2. Es un espacio completo.

Observación B.4 Todos los espacio que se han descrito en esta sección son de Hilbert: $L^2([x_0, L])$, $H^1([x_0, L])$ y $H_0^1([x_0, L])$.

Teorema B.1 (Lax-Milgram) Sea V un espacio de Hilbert con norma $\|\cdot\|_V$ y sea $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ una forma bilineal y $L : V \rightarrow \mathbb{R}$ una forma lineal que verifican:

1. a es coercitiva, tal que existe una constante $\alpha > 0$ con:

$$a(\varphi, \varphi) \geq \alpha \|\varphi\|_V^2, \quad \text{para } \varphi \in V.$$

2. a es continua, es decir, existe una constante $\beta > 0$ tal que:

$$|a(\varphi, \phi)| \leq \beta \|\varphi\|_V \|\phi\|_V, \quad \text{para } \varphi, \phi \in V.$$

3. L es continua, es decir, existe una constante $\gamma > 0$ tal que:

$$|L(\varphi)| \leq \gamma \|\varphi\|_V, \quad \text{para } \varphi \in V.$$

Entonces existe un único $u \in V$ tal que

$$a(u, \varphi) = L(\varphi), \quad \text{para } \varphi \in V.$$

Además se cumple la acotación de la norma:

$$\|u\|_V \leq \frac{\gamma}{\alpha}.$$

La idea para ver la existencia y unicidad del problema de contorno descrito por la formulación débil, será poder reescribirlo en la forma del teorema anterior. Sea entonces el espacio de Hilbert $V = H_0^1([t_0, T])$ y la forma lineal:

$$L : H_0^1([x_0, L]) \rightarrow \mathbb{R}, \quad L(\varphi) := \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x)dx,$$

y la forma bilineal:

$$a : H_0^1([x_0, L]) \times H_0^1([x_0, L]) \rightarrow \mathbb{R}, \quad a(u, \varphi) := \int_{x_0}^L p(x)u'(x)\varphi'(x)dx + \int_{x_0}^L q(x)u(x)\varphi(x)dx.$$

Por tanto, una solución débil del problema (19) será una función u que cumpla:

$$u \in H_0^1([x_0, L]) : a(u, \varphi) = L(\varphi), \quad \forall \varphi \in H_0^1([x_0, L]).$$

Antes de enunciar el teorema formal sobre la existencia y unicidad de soluciones débiles, veremos una acotación importante que usaremos en la demostración del teorema siguiente:

Teorema B.2 (Desigualdad de Poincaré) Para toda función $u \in H_0^1([x_0, L])$ se verifica que:

$$\int_{x_0}^L |u(x)|^2 dx \leq (L - x_0)^2 \int_{x_0}^L |u'(x)|^2 dx,$$

que podemos simplificar a:

$$\|u\|_{L^2} \leq (L - x_0) \|u'\|_{L^2}.$$

Teorema B.3 (Existencia y unicidad débil) Sean p, q funciones continuas a trozos, con un número finito de discontinuidades, todas de salto o evitables y que $f \in L^2([x_0, L])$. Supongamos que $p(x) \geq p_0 > 0$ para todo $x \in [x_0, L]$ y sea:

$$\alpha = \min \left\{ p_0, p_0 + (L - x_0)^2 \min_{[x_0, L]} q(x) \right\} > 0.$$

Entonces, existe una única solución débil $u \in H_0^1([x_0, L])$ del problema (18) y se cumple:

$$\|u\|_{H^1} \leq \frac{\|f\|_{L^2} (L - x_0)}{\alpha}.$$

Demostración. La idea será usar el teorema de Max-Milgram. Ya vemos cómo deben de ser las funciones L, a para poder describir el problema en la notación del teorema. Por tanto, solo basta

comprobar que estamos en las hipótesis correctas.

Para ver que las funciones L y a son continuas, vemos que:

$$|L(\varphi)| = \left| \int_{x_0}^L f(x)\varphi(x)dx \right| \stackrel{1}{\leq} \|f\|_{L^2} \|\varphi\|_{L^2} \stackrel{2}{\leq} \|f\|_{L^2} (L - x_0) \|\varphi\|_{H_0^1} = \gamma \|\varphi\|_{H_0^1},$$

donde en (1) se ha usado la desigualdad de Cauchy-Schwartz y en (2) la desigualdad de Poincaré. Podemos hacer lo análogo con la forma bilineal:

$$\begin{aligned} |a(u, \varphi)| &\leq \int_{x_0}^L |p(x)u'(x)\varphi'(x)| dx + \int_{x_0}^L |q(x)u(x)\varphi(x)| dx \\ &\leq \|p\|_{\infty} \|u'\|_{L^2} \|\varphi'\|_{L^2} + \|q\|_{\infty} \|u\|_{L^2} \|\varphi\|_{L^2} \\ &\leq (\|p\|_{\infty} + \|q\|_{\infty} (L - x_0)^2) \|u\|_{H_0^1} \|\varphi\|_{H_0^1} \\ &= \beta \|u\|_{H_0^1} \|\varphi\|_{H_0^1}. \end{aligned}$$

Solo queda probar que la función bilineal es coercitiva, para lo cual tenemos:

$$a(u, u) = \int_{x_0}^L p(x) |u'(x)|^2 dx + \int_{x_0}^L q(x) |u(x)|^2 dx \geq p_0 \|u'\|_{L^2}^2 + \min_{[x_0, L]} q(x) \|u\|_{L^2}^2,$$

donde se ha usado la hipótesis $p(x) \geq p_0 > 0$. Ahora bien, en caso de que $q(x) \geq 0$ para todo punto del intervalo, podemos deshacernos del último sumando y llegar a que a es coercitiva con $\alpha_1 = p_0$. En caso de que $q(x) < 0$ para algún punto, entonces podemos volver a usar la desigualdad de Poincaré:

$$a(u, u) \geq \left(p_0 + (L - x_0)^2 \min_{[x_0, L]} q(x) \right) \|u'\|_{L^2}^2 = \alpha_2.$$

Con esto, vemos que la función a siempre es coercitiva tomando:

$$\alpha = \min\{\alpha_1, \alpha_2\}.$$

□

C. Códigos

```

function U = implicito(dx,dt,L,T,alfa,inicial,funcion)

% La funcion calcula la solucion numerica para el problema de
% contorno en x,t = [0,L]x[0,T] para la ecuacion de difusion
% fraccionaria en tiempo de orden alfa usando el esquema implicito
%
%     dx: paso en espacio
%     dt: paso en tiempo
%     L: extremo superior en espacio
%     T: extremo superior en tiempo
%     alfa: orden de la derivada fraccionaria (0<alfa<1)
%     inicial: condicion inicial g (x)
%     funcion: funcion f(x)
%
% Las dos funciones hay que llamarlas en modo 'handle' =@(x,t)

g = inicial;
f = funcion;

%numero de puntos del mallado
Nx = round(L/dx) - 1; %interiores para espacial
Nt = round(T/dt) + 1; %todos para el temporal

x = dx:dx:L-dx; x = x'; %vector de puntos espaciales

%creamos la matriz del sistema
beta = dt^alfa*gamma(2-alfa);
D = beta/dx^2;
E = 1+2*D;

e = ones(Nx,1);
A = spdiags([-D*e, E*e, -D*e],-1:1,Nx,Nx);

%solucion en tiempo 0 y 1
Ui = zeros(Nx,Nt);
Ui(:,1) = g(x,0,alfa);
Ui(:,2) = A\(beta*f(x,dt,alfa)+Ui(:,1));

%solucion para tiempo >= 2
for n=1:Nt-2
    Uf = pesos(n,0,alfa)*Ui(:,1) + beta*f(x,(n+1)*dt,alfa);

    k = 1:n; k = k';
    Uf = Uf + Ui(:,2:n+1)*(pesos(n,k,alfa)-pesos(n,k-1,alfa));

    Ui(:,n+2) = A\Uf;
end

```

```

%condiciones de contorno
U = zeros(Nx+2,Nt); U(2:end-1,:) = Ui;

end

```

```

function b = pesos(n,j,alfa)

% calcula los pesos b^n_j de la discretizacion del esquema L1

b = (n+1-j).^(1-alfa)-(n-j).^(1-alfa);

end

```

```

function B = coeficientes(n,modo,inicial)

% Coeficientes de Fourier de la solucion exacta.
%
%     n: indice del coeficiente a calcular
%     modo: tipo de problema a resolver
%     inicial: condicion inicial g(x)
%
% Si el modo es 2, calcula numericamente los coeficientes para una condicion
% inicial dada. Para los modos 3 y 4, devuelve los coeficientes calculados
% previamente para dos condiciones iniciales concretas

if modo == 2
    %condicion inicial g(x)

    g = inicial;

    B = @(n) 2*integral(@(x) g(x).*sin(n.*pi.*x),0,1);

elseif modo == 3
    %condicion inicial: x(1-x)

    B = -(4*cos(pi*n)-4)./(n*pi).^3;

elseif modo == 4
    %condicion inicial: x^2(1-x)

    B = -(8*cos(pi*n)+4)./(n*pi).^3;

end
end

```

```

function U = exacta(x,t,alfa,inicial,p,modo)

% Calcula la solucion exacta para la ecuacion de difusion fraccionaria
% en tiempo de orden alfa dada la condicion inicial.
%

```

```

%     x: punto espacial
%     t: punto temporal
%     alfa: orden de la derivada (0<alfa<1)
%     inicial: condicion inicial g(x)
%     p: numero de sumas de Fourier
%     modo: tipo de problema a resolver

if modo == 2
    B = coeficientes(1,modo,inicial);
    for k=1:p
        b(k) = B(k);
    end

    k = 1:p;
    U = b.*mlf(alfa,1,-t^alfa.*k.^2.*pi^2,16)*sin(k'*pi*x);

else
    k = 1:p;
    B = coeficientes(k,modo,inicial);
    U = B.*mlf(alfa,1,-t^alfa.*k.^2.*pi^2,16)*sin(k'*pi*x);

end
end

```

```

function y = error_implicito(tau,L,T,alfa,inicial,funcion,solucion,p,modo)

% La funcion crea la grafica del error frente al paso del mallado para el
% esquema implicito, tomando el mismo paso en espacio y tiempo.
%
%     tau: vector de pasos de mallado
%     L: extremo superior en espacio
%     T: extremo superior en tiempo
%     alfa: orden de la derivada fraccionaria
%     inicial: condicion inicial g(x)
%     funcion: funcion f(x)
%     solucion: solucion exacta u(x,t) si se conoce
%     p: numero de sumas de Fourier
%     modo: tipo de problema a resolver
%
% Las tres funciones hay que darlas en modo 'handle' @(x,t,alfa) aunque
% solo dependan de una variable. La funcion devuelve la grafica y la
% pendiente de la recta de ajuste (orden del error)

for i = 1:length(tau)
    dx = tau(i);
    dt = tau(i);

    x = 0:dx:L;

    if modo == 1

```

```
    u = solucion;
    U_exacta = u(x,T,alfa);

    else
        U_exacta = exacta(x,T,alfa,inicial,p,modo);

    end

    U_implicito = implicito(dx,dt,L,T,alfa,inicial,funcion);
    error(i) = max(abs(U_exacta'-U_implicito(:,end)));

end

model = @(k,x) k(1)*x+k(2);

figure
if modo == 1
    y = nlinfit(log(tau),log(error),model,[2-alfa,0]);
    p=loglog(tau,error,'r-.s',tau,tau.^(2-alfa),'b');
    p(1).LineWidth = 1; p(2).LineWidth = 1;
    title('Error del metodo: condicion inicial C^{2}(t)')
    text2 = ['Teorico: \tau^{2-alfa}: ' num2str(round(2-alfa,2))];

else
    y = nlinfit(log(tau),log(error),model,[alfa,0]);
    p=loglog(tau,error,'r-.s',tau,tau.^(1),'b');
    p(1).LineWidth = 1; p(2).LineWidth = 1;
    title('Error del metodo: condicion inicial no C^{2}(t)')
    text2 = ['Teorico: \tau^{alfa}: ' num2str(round(1,2))];

end

xlabel('Log: paso del mallado')
ylabel('Log: error')
text1 = ['Numerico: L_{\infty}: ' num2str(round(y(1),2))];
legend(text1,text2,"Location","northwest")

end
```

Referencias

- [1] GEORGIAN, ANDREI: *Estudio comparativo de derivadas fraccionarias*. TFG Universidad Complutense de Madrid, Sep 2020.
- [2] TABOGA, MARCO: *Gamma function*. <https://www.statlect.com/mathematical-tools/gamma-function>, 2021. Accedido en 2022.
- [3] XU, LIN : *Finite difference/spectral approximations for the time-fractional diffusion equation*. Journal of computational physics, Feb 2007.
- [4] YEW, A.: *Numerical differentiation: finite differences*. <https://www.dam.brown.edu/people/alcyew/handouts/numdiff.pdf>, 2021. Accedido en 2022.
- [5] WU, SUN : *A fully discrete difference scheme for a diffusion-wave system*. Applied numerical mathematics, Abr 2005.
- [6] KHIM, LIU : *Taylor's Theorem (with Lagrange Remainder)*. <https://brilliant.org/wiki/taylor-theorem-with-lagrange-remainder/>, 2021. Accedido en 2022.
- [7] BANGTI et al: *An analysis of the L1 scheme for the subdiffusion equation with nonsmooth data*. IMA Journal of numerical analysis, Ene 2015.
- [8] JIGEN, KEXUE : *Laplace transform and fractional differential equations*. ELSEVIER: Applied Mathematics Letters, May 2011.
- [9] HAUBOLD, H. J.: *Mittag-Leffler Functions and Their Applications*. Hindawi, May 2011.
- [10] RODRÍGUEZ, M.: *Introducción al cálculo fraccionario y a los modelos de crecimiento tumoral clásicos y fraccionarios*. TFG Universidad Complutense de Madrid, Feb 2020.
- [11] ARRIETA, FERRERIRA et al: *Análisis numérico de ecuaciones diferenciales ordinarias*. 1^ª edición, Mayo 2020, ISBN 8428344418.
- [12] FLORES, D.: *Una introducción a las ecuaciones diferenciales fraccionarias*. Tesis de Licenciatura, Universidad Autónoma de México.