

Capítulo 9

Problemas de contorno y de valores propios

9.1. Método del disparo lineal

Consideremos una ecuación diferencial de segundo orden

$$y'' = f(x, y, y')$$

sujeta a las condiciones de contorno $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$. Esta ecuación tiene solución única si f y sus derivadas parciales son continuas, $\partial f / \partial y > 0$ y $|\partial f / \partial y'|$ está acotado. Si tenemos $f(x, y, y') = p(x)y' + q(x)y + r(x)$, el problema es lineal. Las condiciones anteriores equivalen a $q(x) > 0$ y $|p(x)| < M$, donde M es un número positivo.

La solución general de la ecuación

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x)$$

es una solución particular de esta ecuación más una solución general de la ecuación homogénea

$$y'' = p(x)y' + q(x)y$$

Este problema se puede resolver mediante dos problemas de valor inicial. Consideremos los dos problemas de valor inicial siguientes, en el intervalo $[a, b]$:

$$y_1'' = p(x)y_1' + q(x)y_1 + r(x)$$

con $y_1(a) = \alpha$ e $y_1'(a) = 0$, y

$$y_2'' = p(x)y_2' + q(x)y_2$$

con $y_2(a) = 0$ e $y_2'(a) = 1$. Llamemos $y_1(x)$ a la solución de la primera ecuación e $y_2(x)$ a la solución de la segunda. Supongamos que $y_2(b) \neq 0$. Entonces, la función $y(x)$

$$y(x) = y_1(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(x)$$

es la solución del problema de contorno. Esto se deduce de escribir la solución $y(x)$ como la combinación lineal

$$y(x) = y_1(x) + c_2 y_2(x)$$

e imponer las condiciones de contorno en b

$$\beta = y_1(b) + c_2 y_2(b)$$

y despejar c_2 . Para comprobar que $y(x)$ es efectivamente una solución, hay que verificar que esta solución satisface la ecuación diferencial con las condiciones de contorno. Basta sustituir los valores de $x = a$ y $x = b$ para obtener $y(a) = \alpha$ y $y(b) = \beta$:

$$\begin{aligned} y(a) &= y_1(a) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(a) = \alpha + 0 = \alpha \\ y(b) &= y_1(b) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(b) = y_1(b) + \beta - y_1(b) = \beta \end{aligned}$$

Además, se satisface la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y''(x) &= y_1''(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2''(x) = p(x)y_1 + q(x)y_1 + r(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} (p(x)y_2'(x) + q(x)y_2(x)) \\ &= p(x) \left(y_1'(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2'(x) \right) + q(x) \left(y_1(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(x) \right) + r(x) \\ &= p(x)y'(x) + q(x)y(x) + r(x) \end{aligned}$$

Queda estudiar el caso particular en que $y_2(b) = 0$, para el que la solución anterior no está definida. En este caso, podemos definir una tercera solución de la ecuación homogénea

$$y_3'' = p(x)y_3' + q(x)y_3$$

con las condiciones iniciales $y_3(a) = 1$ y $y_3'(a) = 0$. Por la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias, la solución existe, es única y se puede escribir como la suma de una solución particular de la ecuación no homogénea y una combinación lineal de las dos soluciones de la homogénea

$$y(x) = y_1(x) + c_2 y_2(x) + c_3 y_3(x)$$

De las condiciones de contorno tenemos

$$y(a) = \alpha = y_1(a) + c_2 y_2(a) + c_3 y_3(a) = \alpha + c_3$$

por lo que $c_3 = 0$. Además, de la condición de contorno en b y de la suposición $y_2(b) = 0$, se deduce

$$y(b) = \beta = y_1(b) + c_2 y_2(b) = y_1(b)$$

por lo que se cumple $y_1(a) = \alpha$ y $y_1(b) = \beta$. Como $y_1(x)$ es una solución que satisface las condiciones de contorno, y además es única, $y_2(x)$ debe ser idénticamente nula. Por lo tanto, en

este caso, la solución del problema es $y_1(x)$. El método del disparo lineal se puede emplear de forma similar para condiciones de contorno generales

$$\begin{aligned}d_{11}y(a) + d_{12}y'(a) &= \alpha \\d_{21}y(b) + d_{22}y'(b) &= \beta\end{aligned}$$

En este caso escribimos

$$y(x) = y_1(x) + c_2y_2(x) + c_3y_3(x)$$

con $y_2(x)$ e $y_3(x)$ definidas como antes, pero con $y_1(x)$ definida con condiciones de contorno $y_1(a) = 0$ e $y_1'(a) = 0$, y sustituimos en las ecuaciones de las condiciones iniciales

$$\begin{aligned}d_{11}c_3 + d_{12}c_2 &= \alpha \\d_{21}(y_1(b) + c_2y_2(b) + c_3y_3(b)) + d_{22}(y_1'(b) + c_2y_2'(b) + c_3y_3'(b)) &= \beta\end{aligned}$$

que proporciona el sistema

$$\begin{aligned}d_{12}c_2 + d_{11}c_3 &= \alpha \\(d_{21}y_2(b) + d_{22}y_2'(b))c_2 + (d_{21}y_3(b) + d_{22}y_3'(b))c_3 &= \beta - d_{21}y_1(b) - d_{22}y_1'(b)\end{aligned}$$

que resolvemos para c_2 y c_3 a partir de los valores numéricos de las tres soluciones de los problemas de valores iniciales y sus derivadas en b .

Ejemplo: Consideremos el caso del tiro parabólico, tal como ocurre en el caso de un proyectil disparado por un cañón inclinado un ángulo α . No interesamos en que el impacto se produzca en un punto $x = b$. Las ecuaciones dinámicas son

$$\begin{aligned}\frac{d^2x(t)}{dt^2} &= 0 \\ \frac{d^2y(t)}{dt^2} &= -g\end{aligned}$$

con condiciones de contorno $x(0) = y(0) = 0$ y $x(t_f) = b$ con $y(t_f) = 0$, donde t_f es el tiempo de impacto. Consideramos un ángulo de inclinación α , de forma que $x'(0) = v_0 \cos \alpha$ y $y'(0) = v_0 \sin \alpha$. Como la solución de la primera ecuación es $x(t) = x_0 + v_0 \cos \alpha t$, tenemos para la ecuación de la trayectoria $y(x)$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{-g}{v_0^2 \cos^2 \alpha}$$

con $y(0) = 0$ e $y(b) = 0$, es decir $\alpha = \beta = 0$. Consideramos dos soluciones, $y_1(x)$ con $y_1(0) = 0$ e $y_1'(0) = 0$ de la no homogénea, que es

$$y_1(x) = \frac{-gx^2}{2v_0^2 \cos^2 \alpha}$$

y una solución $y_2(x)$ de la ecuación homogénea,

$$\frac{d^2y}{dx^2} = 0$$

con $y_2(0) = 0$ e $y_2'(0) = 1$, que es

$$y_2(x) = x$$

La solución del problema es por lo tanto

$$y(x) = y_1(x) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(x) = \frac{-gx^2}{2v_0^2 \cos^2 \alpha} + \frac{gbx}{2v_0^2 \cos^2 \alpha}$$

que vemos que cumple las condiciones de contorno $y(0) = y(b) = 0$.

9.2. Método del disparo no lineal

Los problemas que aparecen en Física e Ingeniería son con frecuencia no lineales. En este caso no se puede aplicar el método anterior, ya que la solución general no se puede expresar como una combinación lineal de soluciones.

Sea la ecuación

$$y'' = f(x, y, y')$$

con $f(x, y, y')$ una función no lineal de $y(x)$ e $y'(x)$, sometida a las condiciones de contorno $f(a) = \alpha$ y $f(b) = \beta$. El método del disparo consiste en resolverla tomando $y'(a)$ como un parámetro, y variando $y'(a)$ hasta que $y(b) = \beta$. Si partimos de un valor de partida t_0 de $y'(a)$, tenemos que construir una sucesión $t_0, t_1, t_2, t_3, \dots, t_k, \dots$ que converga a t , con $y(b, t) = \beta$. Este problema equivale a resolver una ecuación no lineal

$$y(b, \alpha, t) = \beta$$

donde el término de la izquierda se obtiene integrando la ecuación diferencial

$$y'' = f(x, y, y')$$

en el intervalo $[a, b]$, con las condiciones iniciales $y(a) = \alpha$ e $y'(a) = t$. Cualquiera de los métodos de resolución de ecuaciones no lineales es aplicable en principio. Vamos a considerar el método de la secante y el método de Newton. El método de la secante construye la sucesión t_k mediante el método de la secante de solución de ecuaciones no lineales, aplicado a la ecuación $f(t) = y(b, \alpha, t) - \beta = 0$. Este método produce la sucesión

$$t_k = t_{k-1} - \frac{f(t_{k-1})(t_{k-1} - t_{k-2})}{f(t_{k-1}) - f(t_{k-2})} = t_{k-1} - \frac{(y(b, \alpha, t_{k-1}) - \beta)(t_{k-1} - t_{k-2})}{y(b, \alpha, t_{k-1}) - y(b, \alpha, t_{k-2})}$$

cuya determinación requiere la resolución de un problema de valor inicial para cada iteración. Si el punto de partida t_0 no está próximo a t , este método puede requerir un número de iteraciones muy elevado, en cuyo caso es más eficiente el método de Newton, que construye la sucesión t_k a partir de

$$t_k = t_{k-1} - \frac{f(t_{k-1})}{f'(t_{k-1})} = t_{k-1} - \frac{y(b, \alpha, t_{k-1}) - \beta}{\frac{dy}{dt}(b, \alpha, t_{k-1})}$$

Sin embargo, para poder aplicar el método de Newton hace falta poder determinar $\frac{dy}{dt}(b, \alpha, t_{k-1})$. Esta función se puede determinar a partir de un segundo problema de valor inicial, como vamos a ver a continuación.

Definimos la función $w(x, t) = \frac{dy}{dt}(x, \alpha = y(a), t = y'(a))$, con lo que $w(b, t) = \frac{dy}{dt}(b, \alpha, t)$. Podemos construir una ecuación para $w(x, t)$ a partir de la ecuación para $y(x)$, suponiendo que las derivadas con respecto de x y t son intercambiables y que las derivadas necesarias existen y son continuas. Derivando $y'' = f(x, y(x, \alpha, t), y'(x, \alpha, t))$ con respecto de t , tenemos

$$w''(x, t) = \frac{dy''(x, y(a) = \alpha, y'(a) = t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y'} \frac{dy'}{dt} = \frac{\partial f}{\partial y} w(x, t) + \frac{\partial f}{\partial y'} w'(x, t)$$

donde hemos empleado que $\frac{dx}{dt}$ se anula ya que x es independiente de t . Notemos que las primas indican derivadas con respecto a x

$$\frac{dy'}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dx} w(x, t)$$

De la definición de $w(x, t)$, las condiciones iniciales son $w(a, t) = \frac{dy(a)}{dy'(a)} = 0$ y $w'(a, t) = \frac{dy'(a)}{dy'(a)} = 1$. Integrando la ecuación para $w(x, t)$ en el intervalo $a \leq x \leq b$ con dichas condiciones iniciales, obtenemos $dy(b, \alpha, t)/dt$, para cada valor de t_k , lo que nos permite obtener t_{k+1} . Tenemos que resolver, por lo tanto, dos problemas de valor inicial en el intervalo $[a, b]$ por iteración;

$$y'' = f(x, y, y')$$

con las condiciones iniciales $y(a) = \alpha$, $y'(a) = t_k$, que proporciona $y(x, \alpha, t_k)$ y $y'(x, \alpha, t_k)$, y el problema de valor inicial

$$w''(x, t_k) = f_y(x, y, y') w(x, t_k) + f_{y'}(x, y, y') w'(x, t_k)$$

con las condiciones iniciales $w(a, t_k) = 0$ y $w'(a, t_k) = 1$. Los valores de $y(b, t_k)$ y $w(b, t_k)$ nos permiten calcular t_{k+1} . Estos dos problemas de valor inicial se pueden resolver por cualquier método standard, como Runge-Kutta.

9.3. Método de diferencias finitas lineal

El método del disparo lineal tiene problemas de redondeo cuando una de las soluciones es una exponencial creciente que crece demasiado deprisa. El método de diferencias finitas tiene mejor comportamiento en este aspecto, pero requiere un mayor tiempo de cálculo. Dividimos el intervalo de integración en N subintervalos, que producen $N + 1$ puntos incluidos los de contorno, con lo que el espaciado $h = \frac{b-a}{N}$. En cada uno de los puntos de la malla de integración, la ecuación diferencial

$$y''(x_i) = p(x_i)y'(x_i) + q(x_i)y(x_i) + r(x_i)$$

se reemplaza por la versión discretizada, en la que las derivadas se reemplazan por las fórmulas centrales de diferencias finitas:

$$\frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = p(x_i) \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} + q(x_i)y(x_i) + r(x_i)$$

Reordenando estas ecuaciones, nos queda el sistema tridiagonal

$$y_{i-1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_i}{2h} \right) + y_i \left(-\frac{2}{h^2} - q_i \right) + y_{i+1} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_i}{2h} \right) = r_i$$

con las condiciones iniciales $y_0 = \alpha$ e $y_{N+1} = \beta$. Las ecuaciones primera y última contienen las condiciones de contorno, y tienen una forma ligeramente distinta de las otras. La primera ecuación queda por lo tanto como

$$y_1 \left(-\frac{2}{h^2} - q_1 \right) + y_2 \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_1}{2h} \right) = r_1 - \alpha \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_1}{2h} \right)$$

mientras que la última

$$y_{N-1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_N}{2h} \right) + y_N \left(-\frac{2}{h^2} - q_N \right) = r_N - \beta \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_N}{2h} \right)$$

Este sistema tridiagonal se puede escribir en forma matricial como

$$Ay = b$$

con

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} r_1 - \alpha \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_1}{2h} \right) \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{N-1} \\ r_N - \beta \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_N}{2h} \right) \end{bmatrix}$$

y

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{2}{h^2} - q_1 & \frac{1}{h^2} - \frac{p_1}{2h} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{h^2} + \frac{p_2}{2h} & -\frac{2}{h^2} - q_2 & \frac{1}{h^2} - \frac{p_2}{2h} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} + \frac{p_3}{2h} & -\frac{2}{h^2} - q_3 & \frac{1}{h^2} - \frac{p_3}{2h} & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & 0 & \frac{1}{h^2} + \frac{p_{N-1}}{2h} & -\frac{2}{h^2} - q_{N-1} & \frac{1}{h^2} - \frac{p_{N-1}}{2h} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{h^2} + \frac{p_N}{2h} & -\frac{2}{h^2} - q_N \end{bmatrix}$$

Este es un sistema tridiagonal, que se resuelve fácilmente por factorización LU. La solución es única si la matriz A no es singular, lo cual sucede siempre si h es suficientemente pequeño.

9.4. Método de diferencias finitas no lineal

En el caso de que $f(x, y, y')$ no es una función lineal de y e y' , no se puede resolver el problema de la forma expuesta en el apartado anterior. Tenemos el sistema de ecuaciones no lineales

$$y''(x_i) \simeq \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = f(x_i, y_i, y'_i) \simeq f\left(x_i, y(x_i), \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h}\right)$$

con las condiciones de contorno $y_0 = \alpha$ y $y_{N+1} = \beta$. Las ecuaciones que resultan son las siguientes:

$$\begin{aligned} y_2 - 2y_1 &= -\alpha + h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2 - \alpha}{2h}\right) \\ y_3 - 2y_2 + y_1 &= h^2 f\left(x_2, y_2, \frac{y_3 - y_1}{2h}\right) \\ &\vdots \\ y_N - 2y_{N-1} + y_{N-2} &= h^2 f\left(x_{N-1}, y_{N-1}, \frac{y_N - y_{N-2}}{2h}\right) \\ -2y_N + y_{N-1} &= -\beta + h^2 f\left(x_N, y_N, \frac{\beta - y_{N-1}}{2h}\right) \end{aligned}$$

Este es un sistema de ecuaciones no lineales, que se puede resolver por el método de Newton, descrito a continuación. Para aplicar este método hace falta una aproximación inicial a x_i , que puede tomarse como el conjunto de puntos (x_i, y_i) que pasan sobre la recta que pasa por los puntos extremos (a, α) y (b, β) . La matriz Jacobiana es tridiagonal. El método de Newton implica la resolución de un sistema de ecuaciones lineales para cada iteración, por lo que el volumen de cálculo necesario es superior al método lineal en un factor igual al número de iteraciones necesarias, suponiendo que se alcance la convergencia en el primer valor inicial utilizado.

9.5. Método de Newton para funciones de varias variables

El método de Newton se puede extender fácilmente al caso de funciones de varias variables. Consideraremos aquí el caso de un sistema de m ecuaciones no lineales con n incógnitas:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

que podemos escribir en notación vectorial como:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

donde $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ es un vector de m dimensiones y \mathbf{x} un vector de n dimensiones. Las soluciones de este sistema de ecuaciones (raíces) son vectores \mathbf{x} a los que la función $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ transforma en el vector nulo. Llamemos $\vec{\alpha}$ a una de estas raíces. Si tenemos una aproximación \mathbf{x}_r a la raíz, desarrollando en serie de Taylor alrededor de la misma, y denominando $\mathbf{e}_r = \mathbf{x}_r - \alpha$, podemos escribir :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) = \mathbf{f}(\vec{\alpha}) + \nabla \mathbf{f}(\alpha) \cdot \mathbf{e}_r + \dots$$

Si nos quedamos en primer orden, y dado que no conocemos α , podemos suponer que la igualdad

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) = \nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}_r) \cdot (\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_{r+1})$$

define un vector \mathbf{x}_{r+1} más próximo a la raíz que \mathbf{x}_r . Hemos utilizado $\mathbf{f}(\vec{\alpha}) = 0$ y reemplazado la raíz por \mathbf{x}_{r+1} en \mathbf{e}_r . El término $\nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$ es una matriz $m \times n$, que denotamos por \mathbf{J} , conocida con el nombre de Jacobiana de la función $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, y que viene dada por:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

De la anterior igualdad, multiplicando por la matriz inversa por la izquierda de \mathbf{J} (hemos supuesto que en principio \mathbf{J} no es cuadrada), \mathbf{J}^{-1} , que es una matriz de dimensiones $n \times m$, obtenemos la relación:

$$\mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{x}_r - \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$$

que es la generalización del método de Newton para n variables. Esta relación proporciona una relación de recurrencia a partir de un vector de partida \mathbf{x}_0 , que converge a la raíz si \mathbf{x}_0 se encuentra en el atractor de ésta (como se denomina a la zona de convergencia), y si además, la matriz inversa de la Jacobiana existe (\mathbf{J} es no singular, en el caso de una matriz cuadrada). Como es más fácil resolver un sistema de ecuaciones lineales que calcular la inversa de la matriz de los coeficientes. Por lo tanto, desde el punto de vista práctico, conviene escribir el método de Newton multidimensional como:

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{x}_r - \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$$

donde \mathbf{J} es la matriz jacobiana calculada en el punto \mathbf{x}_r . Cada iteración consiste en resolver un sistema de ecuaciones lineales y utilizar la solución encontrada para calcular la nueva matriz de coeficientes y el nuevo vector de términos independientes (que supone la evaluación de $(n+1)m$ funciones). En general, lo que se hace es actualizar el valor de \mathbf{x}_r por un valor $\delta \mathbf{x}_r$, de forma que $\mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{x}_r + \delta \mathbf{x}_r$. Podemos escribir la anterior ecuación como una ecuación para $\delta \mathbf{x}_r$:

$$\mathbf{J} \cdot \delta \mathbf{x}_r = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) \quad (9.1)$$

que resolveremos en cada iteración para actualizar \mathbf{x}_r , parando cuando $\|\delta \mathbf{x}_r\| < \varepsilon$.

9.6. Problemas de valores propios

En Física aparecen frecuentemente problemas de valores propios. Un ejemplo es la resolución de la ecuación de Schrödinger con un potencial $V(x)$. Lo que deseamos obtener son las funciones de onda $\psi(x)$ y los valores correspondientes de la energía E para dicho potencial:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

En general, ponemos unas condiciones de contorno sobre la función de onda. Las más simples es cuando las condiciones se imponen en dos puntos distintos. Supongamos el caso $\psi(x_{min}) = \psi(x_{max}) = 0$. En este caso dividimos el intervalo $[x_{min}, x_{max}]$ en $N + 1$ subintervalos, con espaciado

$$h = \frac{x_{max} - x_{min}}{N + 1}$$

con lo que tendremos $N + 2$ puntos de integración, con N incógnitas: $\psi(x_1) \dots \psi(x_N)$. Si reemplazamos la derivada segunda por su expresión en diferencias, tenemos

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \simeq \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2}$$

con lo que tenemos el sistema de N ecuaciones lineales

$$\begin{aligned} -\psi(x_2) + 2\psi(x_1) + h^2V(x_1)\psi(x_1) &= Eh^2\psi(x_1) \\ -\psi(x_3) + 2\psi(x_2) - \psi(x_1) + h^2V(x_2)\psi(x_2) &= Eh^2\psi(x_2) \\ &\vdots \\ -\psi(x_{n+1}) + 2\psi(x_n) - \psi(x_{n-1}) + h^2V(x_n)\psi(x_n) &= Eh^2\psi(x_n) \\ &\vdots \\ -\psi(x_N) + 2\psi(x_{N-1}) - \psi(x_{N-2}) + h^2V(x_N)\psi(x_{N-1}) &= Eh^2\psi(x_{N-1}) \\ 2\psi(x_N) - \psi(x_{N-1}) + h^2V(x_N)\psi(x_N) &= Eh^2\psi(x_N) \end{aligned}$$

que se puede escribir en forma matricial

$$A\Psi = Eh^2\Psi$$

con A la matriz tridiagonal

$$A = \begin{bmatrix} 2+h^2V_1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2+h^2V_2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2V_3 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & -1 & 2+h^2V_{N-1} & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2+h^2V_N \end{bmatrix}$$

y

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{bmatrix}$$

La resolución de este problema de valores propios nos da simultáneamente las energías E_n (multiplicadas por \hbar^2) y los vectores propios Ψ_n .

Otra alternativa para resolver este problema, es emplear el método del disparo no lineal, en el que la energía E se toma como parámetro a variar de forma que $\psi(R) = 0$. La dificultad radica en encontrar buenos valores iniciales de la energía, de forma que el método de la secante converja rápidamente, y se encuentren todos los valores consecutivos de la energía. Se suelen tomar como valores iniciales los valores de la energía obtenidos para problemas sencillos con solución analítica (pozo cuadrado, oscilador armónico, etc.).

Unos de los problemas principales es que no se puede realizar una diagonalización del sistema de ecuaciones de la forma usual, pues es necesario emplear un gran número de puntos para obtener una precisión aceptable de los valores propios más bajos, y no podemos obtener todos los valores propios para grandes matrices, aparte del hecho de que tampoco nos interesan los valores propios altos. Interesa por lo tanto un método de obtener los m valores propios más bajos. Este método utiliza el concepto de sucesiones de Sturm. Una vez que conocemos un valor propio con precisión, podemos determinar la función de onda de manera sencilla. Como la función de onda está indeterminada salvo una constante, que se determina posteriormente mediante normalización, le damos un valor arbitrario a ψ_1 , y con este valor resolvemos el sistema para ψ_2, \dots, ψ_N . Posteriormente, determinamos la constante de normalización mediante la integral numérica de la función de ondas, requiriendo que $\int_{x_{min}}^{x_{max}} |\psi(x)|^2 dx = 1$. La integral se obtiene integrando numéricamente, por ejemplo, por el método de Simpson.

9.6.1. Determinación de valores propios de matrices tridiagonales

Tengamos una matriz tridiagonal de la forma

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} d_1 - \lambda & -e & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -e & d_2 - \lambda & -e & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -e & d_3 - \lambda & -e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & -e & d_{N-1} - \lambda & -e \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -e & d_N - \lambda \end{bmatrix}$$

El polinomio característico se puede obtener desarrollando en menores complementarios

$$\begin{aligned}
 P_N(\lambda) &= (d_N - \lambda)P_{N-1} - e^2 P_{N-2}(\lambda) \\
 P_{N-1}(\lambda) &= (d_{N-1} - \lambda)P_{N-2}(\lambda) - e^2 P_{N-3}(\lambda) \\
 &\vdots \\
 P_2(\lambda) &= (d_2 - \lambda)P_1(\lambda) - e^2 P_0(\lambda) \\
 P_1(\lambda) &= (d_1 - \lambda)P_0 \\
 P_0 &= 1
 \end{aligned}$$

El conjunto de funciones $P_i(\lambda)$, de $i = 1, \dots, N$ forma lo que se denomina una sucesión de Sturm.

Un conjunto de N funciones, $f_1(x), \dots, f_i(x), \dots, f_N(x)$, se dice que forma una sucesión de Sturm en un intervalo $[a, b]$, si se satisfacen las siguientes propiedades:

1. Cada $f_i(x)$ es continua en $[a, b]$.
2. El signo de la última función $f_n(x)$ es constante.
3. Si para un número x , $f_i(x) = 0$, entonces $f_{i-1}(x)$ y $f_{i+1}(x)$ son distintas de 0, y además tienen valores opuestos: $f_{i-1}(x) \cdot f_{i+1}(x) < 0$.
4. Si para un determinado valor x se cumple $f_0(x) = 0$, entonces para un valor de h suficientemente pequeño se cumple siempre

$$\frac{f_0(x-h)}{f_1(x-h)} < 0$$

y

$$\frac{f_0(x+h)}{f_1(x+h)} > 0$$

Las sucesiones de Sturm tienen la propiedad de que el número de ceros de $f_N(x)$ en $[a, b]$ es igual a la diferencia del número de cambios de signo de la sucesión en los extremos del intervalo. Si n_a y n_b son los número de cambios de signo desde un punto Λ hasta a y b , respectivamente, hay $|n_a - n_b|$ ceros en el intervalo $[a, b]$. Esta propiedad nos permite conocer cuantos valores propios hay en el intervalo.

Los polinomios P_n crecen muy deprisa con n , por lo que es conveniente escribir la relación de recurrencia anterior en términos de los cocientes $Q_n = P_n/P_{n-1}$:

$$\begin{aligned}
 Q_N(\lambda) &= (d_N - \lambda) - e^2/Q_{N-1}(\lambda) \\
 Q_{N-1}(\lambda) &= (d_{N-1} - \lambda) - e^2/Q_{N-2}(\lambda) \\
 &\vdots \\
 Q_2(\lambda) &= (d_2 - \lambda) - e^2/Q_1(\lambda) \\
 Q_1(\lambda) &= (d_1 - \lambda)
 \end{aligned}$$

A menudo sólo estamos interesados en un pequeño número de los valores propios más bajos (energías de los primeros estados ligados). Para ello es conveniente obtener una cota del intervalo en el que se encuentran los valores propios.

Si tenemos un valor propio λ

$$A\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$$

y tomamos normas, suponiendo $\|\mathbf{x}\| = 1$, teniendo en cuenta $\|A\mathbf{x}\| \leq \|A\| \cdot \|\mathbf{x}\|$, tenemos

$$\|A\mathbf{x}\| = |\lambda| \leq \|A\|$$

Estas relaciones son válidas para cualquier norma, y en particular para la norma L_1 , dada por el máximo de la suma de los valores absolutos de los elementos de una fila. Por lo tanto, la cota superior Λ de los valores propios es el máximo de $|e| + |d_1|$, $|e| + |d_N|$, $2|e| + d_i$, y todos los valores propios se encuentran en el intervalo $[-\Lambda, \Lambda]$. Si quiero encontrar los m primeros valores propios tengo que encontrar un punto L para el cual el número de cambios de signo de la sucesión de Sturm sea $|n(-\Lambda) - n(L)| = m$. Este punto se encuentra fácilmente por bisección. El intervalo $[-\Lambda, L]$ hay que dividirlo en subintervalos donde el número de cambios de signo varíe en una unidad. Esto se realiza también fácilmente por bisección. En cada uno de estos subintervalos hay que calcular una raíz de $P_N(\lambda)$, lo cual se podría realizar por un método de horquillado, como regla falsi o Müller, calculando $P_N(\lambda)$ mediante las relaciones de recurrencia anteriores. En la práctica, $P_N(\lambda)$ crece muy rápidamente, y para calcular la raíz se determina el punto donde $Q_N(\lambda)$ cambia de signo. Como esta función no es continua, pasando bruscamente de positivo a negativo, hay que utilizar el método de bisección, determinando el punto donde el número de cambios de signo aumenta en una unidad.

El método determina con precisión los valores propios más bajos. Cuando determinamos valores propios elevados, que sean una fracción apreciable del número de puntos en el que calculamos la función de ondas, aparecen valores propios con errores numéricos elevados e incluso signo incorrecto.

9.6.2. Integración de la función de ondas

Una vez determinado un valor propio λ , es trivial integrar la función de ondas correspondiente. Comenzando en x_0 , tenemos la relación de recurrencia hacia adelante

$$\psi_i^{int} = (d_{i-1} - \lambda) \psi_{i-1}^{int} - \psi_{i-2}^{int}$$

con $d_i = 2 + h^2 V(x_i)$, $\psi_0^{int} = 0$ y $\psi_1^{int} = 1$. Este último es un valor arbitrario, que tomamos porque necesitamos dos puntos de partida. Sólo influye en la normalización (provisional) de ψ . La normalización definitiva la hacemos igual a la unidad al final de los cálculos, multiplicando toda la función de ondas por el inverso de la raíz cuadrada de la norma. También podemos utilizar la relación de recurrencia hacia atrás,

$$\psi_i^{ext} = (d_{i+1} - \lambda) \psi_{i+1}^{ext} - \psi_{i+2}^{ext}$$

con $\psi_N^{ext} = 0$ y $\psi_{N-1}^{ext} = 1$. La función de ondas puede crecer muy rápidamente, produciendo el riesgo de overflows, por lo que se necesita tomar precauciones especiales: cuando la función de

ondas supera un valor máximo, 10^{20} , por ejemplo, se renormalizan todos los puntos por este valor, para evitar overflows.

En la práctica lo más adecuado es integrar la función de ondas hasta un valor intermedio del intervalo de integración, x_m , utilizando ambas relaciones de recurrencia desde cada uno de los extremos, y multiplicar la función de ondas posteriormente por una constante, de forma que ambos tramos de la función de ondas coincidan en este punto:

$$\psi_i^{ext} \longrightarrow \frac{\psi_m^{int}}{\psi_m^{ext}} \psi_i^{ext}$$

Adicionalmente, se calcula la constante de normalización, y se normaliza la función de ondas multiplicandola por el inverso de la raíz cuadrada de la norma. Para calcular la norma, integramos la función de ondas por el método de Simpson, por ejemplo:

$$N = \int_{x_{min}}^{x_{max}} |\psi(x)|^2 dx \simeq \frac{h}{3} (\psi_0^2 + 4\psi_1^2 + 2\psi_2^2 + 4\psi_3^2 + 2\psi_4^2 + \dots + 4\psi_{N-1}^2 + \psi_N^2)$$

y renormalizamos todos los valores calculados anteriormente

$$\psi_i \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_i$$

9.7. Métodos variacionales

Muchos problemas de Física con condiciones de contorno se pueden plantear alternatively como un problema variacional. Si tenemos un lagrangiano $L(y, y', x)$, las ecuaciones de Lagrange,

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial y} \right) = 0$$

con las condiciones de contorno $y(x_1) = y_1$ $y(x_2) = y_2$, son equivalentes al problema variacional

$$\delta I = \delta \int_{x_1}^{x_2} L(x, y, y') dx = 0$$

donde se considera la integral I del Lagrangiano para todas las funciones y que satisfacen las condiciones de contorno y δ significa variación dentro de este conjunto de funciones. Una aproximación alternativa al problema de contorno es considerar una familia suficientemente amplia de funciones, que satisfacen las condiciones de contorno y que dependen de un conjunto de parámetros c_1, c_2, \dots, c_n . Los parámetros valores de los parámetros c_k se eligen de forma que la integral tenga un extremo:

$$\frac{\partial I}{\partial c_k} = 0$$

lo que nos proporciona un conjunto de ecuaciones para los parámetros c_k . En muchos problemas, el Lagrangiano es cuadrático en y y y' , por lo que el sistema de ecuaciones anterior es lineal si y

es lineal en los parámetros c_k . Desarrollamos y_i como una combinación lineal de un conjunto de funciones base $f_k^i(x)$, por lo que $y_i'(x)$ queda como una combinación lineal de las derivadas $g_k^i(x)$

$$g_k^i(x) = \frac{d}{dx} f_k^i(x),$$

$$\begin{aligned} y_i &= \sum c_k^i f_k^i(x) \\ y_i' &= \sum c_k^i g_k^i(x) \\ L &= \sum_{il} a_{il}(x) y_i' y_l' + \sum_{il} b_{il}(x) y_i y_l + \sum_l d_l(x) y_l \\ &= \sum_{ilkm} c_k^i c_m^l a_{il}(x) g_k^i g_m^l + \sum_{ilkm} c_k^i c_m^l b_{il}(x) f_k^i f_m^l + \sum_{lm} c_m^l d_l(x) f_m^l \end{aligned}$$

Las funciones f_k se pueden tomar como splines cúbicos, B-splines, o un sistema adecuado de funciones base. La condición para que esta solución converja a la solución exacta es que y se pueda expresar como una serie convergente de las funciones f_k . Aparte del lagrangiano, la única información que necesitamos son las integrales

$$I_{km}^{(1)il} = \int_{x_1}^{x_2} a_{il}(x) g_k^i(x) g_m^l(x) dx, I_{km}^{(2)il} = \int_{x_1}^{x_2} b_{il}(x) f_k^i(x) f_m^l(x) dx, I_k^{(3)i} = \int_{x_1}^{x_2} d_i(x) f_k^i(x) dx$$

El sistema de ecuaciones que se obtiene de

$$\frac{\partial L}{\partial c_m^l} = 0$$

es

$$\sum_{ki} c_k^i \left(I_{km}^{(1)il} + I_{km}^{(2)il} \right) = -I_m^{(3)l}$$

que proporciona una ecuación para cada parámetro de cada función.

Vamos a considerar un ejemplo: La ecuación

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y = r(x)$$

representa un gran número de problemas físicos si seleccionamos adecuadamente $p(x)$, $q(x)$ y $f(x)$: flexiones de varillas cargadas de sección variable, osciladores armónicos forzados, etc. Esta ecuación deriva del Lagrangiano

$$L = p(x)y'^2 + q(x)y^2 - 2r(x)y$$

Tomemos las condiciones de contorno $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$. La integral

$$\int_a^b L(x, y, y') dx$$

debe ser mínima para la solución, tomada entre todas las funciones y que satisfacen las condiciones de contorno. Consideremos $y(0) = y(1) = 0$ como condiciones de contorno, que como veremos más adelante son suficientemente generales. Un conjunto adecuado de funciones base para describir el lagrangiano son las funciones diente de sierra, definidas en los subintervalos $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ como:

$$f_i(x) = \begin{cases} 0 & x < x_{i-1} \\ \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x_i < x \leq x_{i+1} \\ 0 & x > x_{i+1} \end{cases}$$

Las derivadas de estas funciones son extremadamente sencillas, aunque no continuas

$$g_i(x) = \begin{cases} 0 & x < x_{i-1} \\ \frac{1}{x_i-x_{i-1}} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{-1}{x_{i+1}-x_i} & x_i < x \leq x_{i+1} \\ 0 & x > x_{i+1} \end{cases}$$

Los productos cruzados de estas funciones son nulos salvo cuando corresponden al mismo subintervalo o a subintervalos vecinos inmediatos. Es decir:

$$f_k f_{k'} = g_k g_{k'} = 0$$

salvo para $k' = k, k-1, k+1$. Por lo tanto tenemos únicamente las integrales

$$\begin{aligned} I_{ii}^{(1)} &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) g_i^2(x) dx, \quad I_{ii-1}^{(1)} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) g_i g_{i-1}(x) dx, \quad I_{ii+1}^{(1)} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) g_i g_{i+1}(x) dx \\ I_{ii}^{(2)} &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) f_i^2(x) dx, \quad I_{ii-1}^{(2)} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) f_i f_{i-1}(x) dx, \quad I_{ii+1}^{(2)} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p(x) f_i f_{i+1}(x) dx \\ I_i^{(3)} &= - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} r(x) f_i(x) dx \end{aligned}$$

Estas integrales se pueden evaluar numéricamente, por el método de Simpson por ejemplo. Se obtiene un sistema de ecuaciones tridiagonal

$$c_{k-1} \left(I_{kk-1}^{(1)} + I_{kk-1}^{(2)} \right) + c_k \left(I_{kk}^{(1)} + I_{kk}^{(2)} \right) + c_{k+1} \left(I_{kk+1}^{(1)} + I_{kk+1}^{(2)} \right) = -I_k^{(3)}$$

que se resuelve por el método de eliminación de Gauss.

Ejemplo: Tiro parabólico

9.7.1. Redefinición de condiciones de contorno mediante cambio de variables

Aunque la aplicación del método variacional al problema

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y = r(x)$$

con las condiciones de contorno $y(0) = y(1) = 0$ puede parecer un caso demasiado particular, este no es el caso. De hecho, mediante el cambio de variables

$$z(y, x) = y(x) - \beta x - \alpha(1 - x)$$

se transforman las condiciones de contorno $y(0) = \alpha$ e $y(1) = \beta$ en $z(0) = 0$ y $z(1) = 1$. Adicionalmente, un intervalo $[a, b]$ se transforma en $[0, 1]$ mediante el cambio de variables

$$t = \frac{x - a}{b - a}$$

Por lo tanto, el cambio a la variable z

$$z(t) = y(t) - \beta t - \alpha(1 - t)$$

pasa de las condiciones $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$ a las condiciones $z(0) = 0$ y $z(1) = 1$, y la ecuación diferencial

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y = r(x)$$

pasa a

$$\begin{aligned} & -\frac{d}{dt} \left(p(t(b-a) + a) \frac{dy}{dt} \frac{1}{(b-a)^2} \right) + q(t(b-a) + a)y = r(t(b-a) + a) \\ & -\frac{d}{dt} \left(p(t(b-a) + a) \left(\frac{dz}{dt} + \beta - \alpha \right) \frac{1}{(b-a)^2} \right) + q(t(b-a) + a)y = r(t(b-a) + a) \\ & -\frac{d}{dt} \left(p(t(b-a) + a) \frac{dz}{dt} \frac{1}{(b-a)^2} \right) + q(t(b-a) + a)(z(t) + \beta t + \alpha(1 - t)) = \\ & \quad r(t(b-a) + a) + \frac{\beta - \alpha}{(b-a)^2} p'(t(b-a) + a) \\ & -\frac{d}{dt} \left(P(t) \frac{dz}{dt} \right) + Q(t)z = R(t) \end{aligned}$$

con

$$P(t) = p(t(b-a) + a)$$

$$Q(t) = q(t(b-a) + a)(b-a)^2$$

$$\begin{aligned} R(t) = & (b-a)^2 r(t(b-a) + a) + (\beta - \alpha) p'(t(b-a) + a) + \\ & q(t(b-a) + a)(\beta t + \alpha(1 - t))(b-a)^2 \end{aligned}$$

9.8. Interpolación por splines cúbicos

La interpolación polinomial tiene el inconveniente de que el polinomio interpolador puede oscilar fuertemente entre los puntos interpolados. Para muchas aplicaciones prácticas, interesa un algoritmo que proporcione una función interpoladora que se comporte suavemente. El modelo más sencillo es una interpolación lineal a tramos, constituida por rectas que unen los puntos interpolados. Sin embargo, este tipo de aproximación tiene una derivada discontinua en los puntos de interpolación. Para muchas aplicaciones prácticas, en las que se incluyen la resolución de ecuaciones diferenciales en las que intervienen funciones medidas experimentalmente, interesa una función aproximadora que tenga derivadas continuas hasta un orden dado, aparte de ser continua. El método de splines se basa en encontrar funciones que cumplan estas características. Se define un *spline de orden m* en una serie de $n + 1$ puntos de interpolación $\{(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)\}$ como un conjunto de n funciones $S_k(x)$ (frecuentemente polinomios de orden m) definidas en el intervalo $[x_k, x_{k+1}]$, que satisfacen

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

Como veremos más abajo, hay que introducir en general condiciones de contorno adicionales en los extremos x_0 y x_n para que las funciones $S_k(x)$ estén unívocamente definidas. Los splines más utilizados son los cúbicos, debido a que son los más sencillos con derivada segunda continua, y por lo tanto son adecuados para aproximar funciones que intervienen en ecuaciones diferenciales de segundo orden. Si escribimos

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3$$

las dos primeras derivadas vienen dadas por

$$\begin{aligned} S'_k(x) &= b_k + 2c_k(x - x_k) + 3d_k(x - x_k)^2 \\ S''_k(x) &= 2c_k + 6d_k(x - x_k) \end{aligned}$$

La condición de que los splines pasen por los puntos de interpolación da $S_k(x_k) = a_k = y_k$, que nos dice que los coeficientes a_k son los valores de la función interpolada en los nodos. El significado de los otros coeficientes es obviamente $S'_k(x_k) = b_k$, $S''_k(x_k) = 2c_k$ y $S'''_k(x_k) = 6d_k$. Tenemos que las ecuaciones de continuidad de las funciones $S_k(x)$ y sus derivadas primera y segunda en los $n - 1$ puntos de interpolación intermedios x_{k+1} , $k = 0, \dots, n - 2$ (las condiciones de continuidad no se aplican a los extremos) dan

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= a_k + b_k(x_{k+1} - x_k) + c_k(x_{k+1} - x_k)^2 + d_k(x_{k+1} - x_k)^3 \\ b_{k+1} &= b_k + 2c_k(x_{k+1} - x_k) + 3d_k(x_{k+1} - x_k)^2 \\ 2c_{k+1} &= 2c_k + 6d_k(x_{k+1} - x_k) \end{aligned}$$

que constituyen un sistema de $3(n-1)$ ecuaciones para determinar los $3n$ coeficientes b_k, c_k y d_k . Una condición adicional es que el último spline pase por el último punto: $S_{n-1}(x_n) = y_n$. Necesitaremos por lo tanto dos condiciones adicionales para poder determinar todos los coeficientes. Daremos más adelante estas condiciones. Para simplificar la notación, introducimos la definición $h_k = x_{k+1} - x_k$. Podemos escribir las ecuaciones de continuidad anteriores como

$$\begin{aligned}\frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} &= b_k + c_k h_k + d_k h_k^2 \\ b_{k+1} - b_k &= 2c_k h_k + 3d_k h_k^2 \\ c_{k+1} - c_k &= 3d_k h_k\end{aligned}\tag{9.2}$$

De las posibles formas de resolver el sistema de ecuaciones anterior, la más cómoda es despejar los coeficientes d_k y b_k de forma que obtengamos un sistema de ecuaciones para los coeficientes c_k . Si despejamos

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}$$

en la última ecuación y lo introducimos en la segunda ecuación, obtenemos

$$b_{k+1} - b_k = 2c_k h_k + 3 \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^2 = (c_k + c_{k+1})h_k\tag{9.3}$$

Necesitamos otra expresión independiente de $b_{k+1} - b_k$ para obtener una ecuación para los c_k . En la primera de las ecuaciones 9.2 podemos despejar b_k :

$$b_k = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - c_k h_k - d_k h_k^2 = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - c_k h_k - \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} h_k^2 = \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{2}{3} c_k h_k - \frac{1}{3} c_{k+1} h_k$$

y cambiando k por $k+1$ obtenemos

$$b_{k+1} = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{2}{3} c_{k+1} h_{k+1} - \frac{1}{3} c_{k+2} h_{k+1}$$

Restando estas dos ecuaciones queda

$$b_{k+1} - b_k = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} - \frac{1}{3} c_{k+2} h_{k+1} + \frac{1}{3} c_{k+1} h_k - \frac{2}{3} c_{k+1} h_{k+1} + \frac{2}{3} c_k h_k\tag{9.4}$$

Igualando esta expresión con la ecuación 9.3, obtenemos finalmente una relación entre los c_k :

$$\frac{1}{3} c_{k+2} h_{k+1} + \frac{2}{3} c_{k+1} (h_k + h_{k+1}) + \frac{1}{3} c_k h_k = \frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k}$$

Estas ecuaciones forman un sistema tridiagonal. Si definimos

$$v_{k+1} = 3 \left(\frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} \right)$$

tenemos que el sistema tridiagonal queda como

$$c_{k+2} h_{k+1} + 2c_{k+1} (h_k + h_{k+1}) + c_k h_k = v_{k+1}$$

cuya forma matricial es:

$$\begin{bmatrix} h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_3 & 2(h_3+h_4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-3} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{n-3} \\ v_{n-2} \end{bmatrix} \quad (9.5)$$

que es un sistema de $n-2$ ecuaciones para n incógnitas. Necesitamos dos ecuaciones adicionales para determinar los c_k . Estas dos ecuaciones se proporcionan mediante dos condiciones en cierta forma arbitrarias, pero de las que depende la calidad del ajuste. Las dos formas más usuales de proporcionar estas condiciones adicionales son:

1. La condición denominada *splines naturales*, que impone derivada nula en los extremos:
 $S''_0(x_0) = S''_{n-1}(x_n) = 0$.
2. La condición de *splines sujetos* (clamped), que fija la derivada en los extremos $S'_0(x_0) = f'(x_0)$ y $S'_{n-1}(x_n) = f'(x_n)$.

La condición de splines naturales implica $c_0 = c_n = 0$. El coeficiente c_n no pertenece a ninguno de los splines en $[x_0, x_n]$, sino a un spline arbitrario que comienza en el extremo x_n , pero la introducción de $S_n(x)$ permite extender las ecuaciones para los coeficientes c_k con una ecuación adicional

$$h_{n-2}c_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})c_{n-1} = v_{n-1}$$

La condición $c_0 = 0$ nos permite eliminar la primera columna de la matriz del sistema 9.5. Con estas dos modificaciones, el sistema de ecuaciones queda de la forma:

$$\begin{bmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_3 & 2(h_3+h_4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{n-3} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \end{bmatrix}$$

que es un sistema de $n-1$ ecuaciones con $n-1$ incógnitas. Este sistema se puede resolver fácilmente por eliminación de Gauss. Cada paso de eliminación se aplica solamente a la fila inmediatamente inferior, ya que los elementos inferiores de la columna son nulos. El factor de eliminación de la segunda fila es

$$f_2 = -\frac{h_1}{2(h_0+h_1)}$$

Después de la eliminación, la subdiagonal inferior se anula. El término en la diagonal toma un nuevo valor u_2 dado por

$$u_2 = 2(h_1+h_2) - \frac{h_1^2}{2(h_0+h_1)}$$

Los elementos u_k de la diagonal a partir de la segunda fila, después de la reducción, vienen dados por

$$u_{k+1} = 2(h_k + h_{k+1}) + h_k f_{k+1} = 2(h_k + h_{k+1}) - \frac{h_k^2}{u_k}$$

$$f_{k+1} = -\frac{h_k}{u_k}$$

y los términos independientes quedan como,

$$v'_{k+1} = v_{k+1} - \frac{h_k v_k}{u_k}$$

El sistema de ecuaciones, después de la reducción de Gauss, toma la forma:

$$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_2 & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_3 & h_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & u_{n-2} & h_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_{n-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ \vdots \\ v'_{n-2} \\ v'_{n-1} \end{bmatrix}$$

Este sistema se resuelve fácilmente por sustitución hacia atrás,

$$\begin{aligned} c_{n-1} &= \frac{v'_{n-1}}{u_{n-1}} \\ c_k &= \frac{v'_k - h_k c_{k+1}}{u_k} \end{aligned}$$

con lo que determinamos todos los coeficientes c_k . A partir de los c_k , determinamos los coeficientes d_k mediante la relación

$$d_k = \frac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}$$

Los coeficientes b_k se obtienen de la relación de recurrencia

$$b_{k+1} = b_k + (c_k + c_{k+1})h_k$$

con el valor inicial de b_0 determinado por la ecuación de continuidad de S_0 y S_1 en el primer nodo x_1 :

$$b_0 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - d_0 h_0^2 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - \frac{c_1}{3} h_0$$

donde hemos tenido en cuenta que $c_0 = 0$.

En el caso de splines sujetos, damos como datos adicionales los valores de f'_0 y f'_n (o estimaciones de los mismos). Tenemos por lo tanto $S'_0(x_0) = b_0 = f'_0$ y $S_{n-1}(x_n) = b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n$. La ecuación de continuidad en x_1 da

$$c_0h_0 + d_0h_0^2 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0$$

La anterior expresión, introduciendo d_0 en función de c_0 y c_1 , queda como

$$c_0h_0 + \frac{c_1 - c_0}{3h_0}h_0^2 = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0$$

$$(2c_0 + c_1)h_0 = 3\left(\frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0\right)$$

Análogamente, en el punto x_n imponemos la condición de que la derivada de $S_{n-1}(x)$ valga $f'_n(x_n)$:

$$b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n$$

De la condición de que el spline S_{n-1} pase por el extremo x_n obtenemos

$$b_{n-1} + c_{n-1}h_{n-1} + d_{n-1}h_{n-1}^2 = \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}}$$

Restando ambas ecuaciones eliminamos b_{n-1} con lo que obtenemos la relación,

$$c_{n-1}h_{n-1} + 2d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}}$$

Poniendo d_{n-1} en función de los c_k ,

$$d_{n-1} = \frac{c_n - c_{n-1}}{3h_{n-1}}$$

obtenemos finalmente la ecuación adicional para c_n buscada:

$$(c_{n-1} + 2c_n)h_{n-1} = 3\left(f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}}\right)$$

Añadiendo al sistema de ecuaciones que determina los c_k las dos ecuaciones adicionales en los extremos inicial y final, tenemos que los c_k vienen dados por la solución de un sistema de $n+1$ ecuaciones con $n+1$ incógnitas:

$$\begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{bmatrix}$$

con

$$v_0 = 3 \left(\frac{a_1 - a_0}{h_0} - f'_0 \right)$$

$$v_n = 3 \left(f'_n - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} \right)$$

Para los otros valores de k , v_k viene dado por la misma expresión que en el caso de splines naturales:

$$v_k = 3 \left(\frac{a_{k+2} - a_{k+1}}{h_{k+1}} - \frac{a_{k+1} - a_k}{h_k} \right)$$

Por lo tanto, en el caso de splines sujetos obtenemos un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas, que se resuelve como en el caso de splines naturales. La primera etapa de eliminación de Gauss da el sistema reducido

$$\begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & u_2 & h_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & u_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_0 \\ v'_1 \\ v'_2 \\ \vdots \\ v'_{n-1} \\ v'_n \end{bmatrix}$$

con

$$u_1 = 2h_1 - \frac{3}{2}h_0$$

$$u_k = 2(h_{k-1} + h_k) - \frac{h_{k-1}^2}{u_{k-1}} \quad k = 1, \dots, n-1$$

$$u_n = 2h_{n-1} - \frac{h_{n-1}^2}{u_{n-1}}$$

$$v'_k = v_k - \frac{h_{k-1}v_{k-1}}{u_{k-1}}, \quad k > 0$$

Este sistema se resuelve por sustitución hacia atrás:

$$c_n = \frac{v'_n}{u_n}$$

$$c_k = \frac{v'_k - h_k c_{k+1}}{u_k}$$

con $v'_0 = v_0$ y $u_0 = 2h_0$. Los coeficientes b_k y d_k se determinan como en el caso de splines naturales.

9.8.1. B-splines

Los B-splines (bell shaped splines) o splines acampanados, son una versión de los splines cúbicos que se anulan en los extremos. Proporcionan un conjunto base para desarrollar el lagrangiano con derivadas continuas. Se requiere que satisfagan en los extremos tanto la condición de splines sujetos como la de los libres

$$\begin{aligned} B'(x_0) &= B'(x_4) = 0 \\ B''(x_0) &= B''(x_4) = 0 \end{aligned}$$

Como consecuencia no se pueden imponer los valores en todos los nodos, ya que habría demasiadas ecuaciones por lo que sólo se imponen los valores en tres puntos

$$\begin{aligned} B(x_0) &= B(x_4) = 0 \\ B(x_2) &= 1 \end{aligned}$$

Se toma $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_0 = 0$, $x_1 = 1$, $x_2 = 2$ sin pérdida de generalidad, puesto que se puede pasar a estos puntos mediante un cambio de variables. El polinomio resultante es

$$B(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -2 \\ \frac{1}{4}(2+x)^3 & -2 \leq x \leq -1 \\ \frac{1}{4}[(2+x)^3 - 4(1+x)^3] & -1 \leq x \leq 0 \\ \frac{1}{4}[(2-x)^3 - 4(1-x)^3] & 0 \leq x \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2-x)^3 & 1 \leq x \leq 2 \\ 0 & x > 2 \end{cases}$$

Para un valor x_i de la malla entre $i = 2$ e $i = N - 2$, se toma $B_i(x) = B\left(\frac{x}{h} - i\right)$. Estas funciones son continuas y no nulas entre $x = (i-2)h$ y $x = (i+2)h$. En los puntos $i = 0, 1, N-1$ y N hay que redefinir los B_i de forma que se anulen y sean continuos en $i = 0$ y N . Teniendo en cuenta que $B(x) = \frac{1}{4}$, en $x = 1$ y $x = -1$, una definición adecuada es

$$B^1(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -2 \\ \frac{1}{4}(2+x)^3 & -2 \leq x \leq -1 \\ \frac{1}{4}[(2+x)^3 - 4(1+x)^3] & -1 \leq x \leq 0 \\ \frac{1}{4}[(2-x)^3 - 4(1-x)^3] & 0 \leq x \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2-x)^3 & 1 \leq x \leq 2 \\ 0 & x > 2 \end{cases}$$

y

$$B^1(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -2 \\ \frac{1}{4}(2+x)^3 & -2 \leq x \leq -1 \\ \frac{1}{4} \left[(2+x)^3 - 4(1+x)^3 \right] & -1 \leq x \leq 0 \\ \frac{1}{4} \left[(2-x)^3 - 4(1-x)^3 \right] & 0 \leq x \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2-x)^3 & 1 \leq x \leq 2 \\ 0 & x > 2 \end{cases}$$

9.9. Método variacional empleando B-splines

Otro conjunto adecuado de funciones base, son los splines cúbicos, que tienen la ventaja de tener derivadas continuas. En este caso, las funciones $p(x)$ y $q(x)$ se aproximan también por splines cúbicos, y las integrales se realizan fácilmente, ya que son integrales de polinomios.