T E S I S

APROXIMACION RACIONAL A SEMIGRUPOS DE OPERADORES LINEALES

por

ARTURO RIBAGORDA GARNACHO

Ingeniero Superior de Telecomunicación

por la

E.T.S.I. Telecomunicación de Madrid

Presentada en la

FACULTAD DE INFORMATICA

de la

UNIVERSIDAD POLITECNICA DE MADRID

para la obtención del

GRADO DE DOCTOR EN INFORMATICA

Madrid, Septiembre de 1982

T E S I S   D O C T O R A L

APROXIMACION RACIONAL A SEMIGRUPOS DE OPERADORES LINEALES

Autor: ARTURO RIBAGORDA GARNACHO

Director: D. CARLOS VEGA VICENTE .
Profesor Agregado de la
Facultad de Informática
de Madrid.

Codirector: D. RAFAEL PORTAENCASA BAEZA
Catedrático Numerario de la
E.T.S.I.T. de Madrid.

TRIBUNAL CALIFICADOR

Presidente: D. RAFAEL PORTAENCASA BAEZA

Vocales: D. ANTONIO INSUA NEGRAO

D. FERNANDO DE ARRIAGA GOMEZ

D. MARIO GARCIA GALLUDO

Vocal
Suplente: D. JULIO FERNANDEZ BIARGE

Secretario: Da. MARIA LUISA CUADRADO EBRERO

AGRADECIMIENTOS

Un trabajo como éste que se presenta, es imposible de realizar sin el apoyo de numerosos amigos que, unos con su colaboración y otros con su aliento, me han ayudado decisivamente en la conclusión del mismo. Para todos ellos va mi agradecimiento.

En particular, no podría dejar de citar a Pilar, mi mujer, que a tantas cosas ha sabido renunciar para que se pudiera realizar este trabajo.

Igualmente, mi profunda gratitud a Rafael Portaencasa, quien con su constante ejemplo de dedicación, tanto me ha motivado en ésta y en cuantas tareas he emprendido en los años que llevo a su lado.

A mi director de tesis, Carlos Vega, deseo agradecer el interés demostrado y sus expertos consejos en la minuciosa revisión que ha hecho de esta tesis.

Tampoco podría olvidar al profesor Ivo Marek de la Universidad Carolina de Praga a quien le debo el haberme introducido en el tema de esta tesis y de cuyas magistrales indicaciones tanto he aprendido.

Y para finalizar, quiero mencionar a Antonio Insua y a mis entrañables amigos de las Cátedras de Matemática Aplicada a la Telecomunicación de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Telecomunicación y de Matemáticas II de la Facultad de Informática, que tanto me han apoyado en mi trabajo

RESUMEN

En este trabajo presentamos una nueva clase de aproximaciones racionales a semigrupos de operadores, que dan lugar a métodos de aproximación estables. Los semigrupos de operadores que se pueden aproximar por estos esquemas son de clase C_0 y si, además, son acotados, se caracterizan por tener un generador infinitesimal A de la forma

$$A = \lambda_0 P + A_1$$

donde P es un operador proyección, λ_0 es un número real negativo y A_1 un operador cuyo espectro está contenido en el semiplano $\mathrm{Re}\, z < \lambda_0$ del plano complejo.

Basándose en la posibilidad de reducir un semigrupo no acotado a uno acotado, se extienden, posteriormente, nuestros resultados a operadores no acotados.

En el último capítulo, se dan ejemplos de la aplicación de nuestra teoría a la resolución de algunas ecuaciones de gran importancia en la Física, como son la ecuación de difusión y la del transporte.

A B S T R A C T

A new kind of rational approximations to operator semigroups stable approximation methods are presented in this paper. The operator semigroups that can be approximated through such schemes are of the C_0 class and moreover if they are bounded they are characterized for having an infinitesimal generator A as follows:

$$A = \lambda_0 P + A_1$$

where P is the projection operator, λ_0 is a negative real number and A_1 is an operator whose spectrum is inside the semiplane $\mathrm{Re}\ z < \lambda_0$ of the complex plane.

Based on the possibility of reducing a non - bounded semigroup, to a bounded semigroup, our result may be extended later to non - bounded operators.

The last chapter includes examples of the application of our theory to solve some extremely important equations in its applications, such as the diffusion and transport equations.

INDICE

INTRODUCCION

Desde la mitad de la década de los 60, se ha venido prestando, por parte de numerosos tratadistas, una atención creciente al estudio de las aproximaciones racionales a la función exponencial. En un principio, el estudio de estas aproximaciones estuvo motivado en el interés despertado en dichos años en la resolución numérica de los sistemas "stiff", cuya solución no podía ser calculada por los métodos numéricos ordinarios.

Sin embargo, en los últimos años, estas aproximaciones se han estudiado, como punto de partida, para la obtención de aproximaciones a semigrupos de operadores, que permitieran la obtención de métodos estables y convergentes con los que resolver el problema abstracto de Cauchy. En esta última línea se ha movido nuestra investigación.

El presente trabajo lo hemos dividido en cuatro capítulos que pasaremos a esbozar:

En el primero de ellos hemos recogido, y en ocasiones dado algún ejemplo, de los conceptos que con más frecuencia aparecerán en el resto del trabajo, además de establecer la nomenclatura que emplearemos. En algunas ocasiones hemos definido también ciertos conceptos como K-positividad, K-irreducibilidad, clases de semigrupos de operadores, transformada de Laplace-Stieltjes, que aunque no aparecen mas que en ocasiones muy concretas, por no ser conceptos usuales y no existir unanimidad entre los autores en sus definiciones e incluso en sus denominaciones (operador K-irreducible es denominado, por algunos, operador semi-no-soportado), pensamos que era de interés introducirlas en este capítulo.

En el capítulo segundo hemos realizado una síntesis del estado actual de las aproximaciones racionales a la función exponencial y de la estabilidad y convergencia de métodos numéricos, para la solución del problema abstracto de Cauchy, a que dan lugar dichas aproximaciones.

El motivo de dicha recopilación ha sido doble; por un lado, en lo que conocemos, no ha sido realizada por ningún autor y por otro, nos proporciona una introducción histórica a nuestra investigación y nos permite hacer hincapié en el punto de partida de nuestro estudio.

En el tercer capítulo hemos expuesto los principales resultados de nuestro trabajo, que se concretan en los lemas

1^o, 2^o, 3^o y los teoremas 1^o y 2^o. Para estos lemas y teoremas, hemos precisado dar dos definiciones en las que concretamos la clase de operadores (que hemos denominado $\mathcal{T}$) a los que se aplican nuestras aproximaciones y el tipo de las funciones racionales (que hemos denominado $\mathcal{M}$) que constituyen dichas aproximaciones. Para la demostración de dichos lemas y teoremas, así como para las conclusiones finales, hemos tomado de diversos autores, que se citan, el lema 4^o y el teorema 3^o, que por no ser, a diferencia de los anteriores, originales, no hemos creido oportuno transcribir.

Finalmente, en el capítulo cuarto, hemos dado algunos ejemplos de aplicación de nuestro estudio. Concretamente hemos desarrollado con amplitud, los sistemas "stiff", la ecuación de difusión y la del transporte, demostrando que la solución de todas ellas se puede aproximar numéricamente por los métodos desarrollados en el capítulo anterior.

CAPITULO 1

DEFINICIONES FUNDAMENTALES

1.1. Espacio lineal

Sea Λ un campo * escalar y X un conjunto sobre el que se han definido dos operaciones: una llamada suma y otra multiplicación escalar, tal que,

1) X es un grupo abeliano respecto de la suma .

2) Si $\alpha, \beta \in \Lambda$; x, y $\in$ X, entonces:

2.1) Existe un αx único, tal que $\alpha x \in X$;

2.2) $(\alpha + \beta)\, x = \alpha x + \beta x$;

2.3) $\alpha (x + y) = \alpha x + \beta y$;

----

* Entendemos por campo un cuerpo conmutativo.

2.4) $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$;

2.5) $1 \cdot x = x$.

A este conjunto X con las anteriores propiedades se le denomina espacio vectorial lineal, o simplemente espacio lineal, sobre el campo Λ y a sus elementos, vectores.

En particular, el campo escalar puede ser el conjunto de los números reales o el de los complejos, llamándose a X espacio lineal real o complejo respectivamente.

1.2. Operador lineal

Sean X e Y espacios lineales sobre el mismo campo escalar Λ y A una función de dominio $\mathfrak{D}(A)$ (subespacio lineal de X) y rango $\mathfrak{R}(A) \subset Y$. A es un operador lineal si,

1) $A(x_1 + x_2) = Ax_1 + Ax_2$,

2) $A(\alpha x) = \alpha(Ax)$,

$\alpha, \beta \in \Lambda$, $x_1, x_2 \in \mathfrak{D}(A)$.

Aunque un operador no es más que una función, escribiremos Ax en vez de A(x) cuando queramos indicar que actúa sobre el vector x.

Si Y coincide con el campo escalar Λ asociado a X, el operador lineal se denomina funcional. Usaremos el símbolo x^* para denotar un funcional genérico sobre X, y si $x_0 \in X$, el valor del funcional anterior en ese vector lo denotaremos por,

$$x^* (x_0)$$

y, otras veces, por

$$< x_0, x^* > .$$

1.3. Espacio normado

Es un espacio lineal en el que se ha definido un funcional

$$|| \cdot || : X \longrightarrow R^+ \cup \{0\},$$

denominado norma, tal que,

1) $|| x_1 + x_2 || \leq || x_1 || + || x_2 ||, \quad \forall x_1, x_2 \in X,$

2) $\| \alpha x \| = | \alpha | \; \| x \|$,

3) $\| x \| = 0 \Leftrightarrow x = 0$.

Dos normas $\|.\|_1$ y $\|.\|_2$ definidas en un mismo espacio lineal X , se denominan equivalentes si definen la misma topología en X, es decir, si existen dos números reales m y M, tal que,

$$m \| x \|_1 \leqq \| x \|_2 \leqq M \| x \|_1$$

$\forall x \in X$ y con m, M > 0.

1.4. Espacio de Banach

Es un espacio normado completo, es decir, un espacio normado en el que cada sucesión de Cauchy tiene un límite perteneciente a dicho espacio.

Los espacios de Banach los representaremos en adelante por $\mathcal{B}$.

1.5. Operadores lineales continuos y acotados

Sean X e Y espacios normados y A un operador de X en Y.

A es continuo en $x_0 \in X$, si

$$|| Ax - Ax_0 ||_Y \longrightarrow 0,$$

cuando

$$|| x - x_0 ||_X \longrightarrow 0,$$

donde hemos representado por $||\cdot||_Y$ y $||\cdot||_X$ las normas en los espacios Y y X respectivamente. Seguiremos, en adelante, utilizando esta notación excepto cuando el operador aplique X sobre X, caso en que suprimiremos los subíndices.

Se puede demostrar que, si el operador lineal A es continuo en $x_0 \in X$, es continuo $\forall\ x \in X$ ([32], pág. 54).

Un operador se llama acotado si existe y es finito

$$\sup_{||x||_X \leqq 1} || Ax ||_Y$$

y a este extremo superior se le denomina norma de A y representa por $||A||$. Así pues,

$$|| A || = \sup_{||x||_X \leqq 1} || Ax ||_Y$$

o, equivalentemente,

$$\| A \| = \sup_{\| x \|_X \neq 0} \frac{\| Ax \|_Y}{\| x \|_X} .$$

Se puede demostrar, que si A es lineal, A es acotado en $\mathfrak{D}(A) = X$, si y sólo si es continuo en $\mathfrak{D}(A)$ ([18], pág. 216).

De la definición resulta evidente que un operador acotado transforma conjuntos acotados en conjuntos acotados.

El conjunto de los operadores lineales acotados de X en Y lo representaremos por $\mathfrak{L}(X, Y)$ y si $X = Y$ por $\mathfrak{L}(X)$.

1.6. Operador lineal cerrado

En numerosas aplicaciones del Análisis es esencial considerar operadores lineales discontinuos (p. ej., los operadores diferenciales). Afortunadamente, muchos de estos operadores tienen una propiedad que compensa, en parte, la ausencia de continuidad. Esta propiedad es la de ser cerrados.

Sea A un operador lineal y $\{x_n\}$ una sucesión tal que,

1) $\{x_n\} \in \mathfrak{D}(A)$;

2) existe $\lim_{n \to \infty} x_n$;

3) existe $\lim_{n \to \infty} A\, x_n$.

Si con estas hipótesis se verifica,

1) $\lim_{n \to \infty} x_n = x \in \mathfrak{D}(A)$;

2) $\lim_{n \to \infty} Ax_n = Ax$,

el operador A se denomina cerrado.

Si A es cerrado y $\mathfrak{D}(A) = X$ entonces A es continuo ([32], pág. 213).

1.7. Algebras

Un conjunto X se denomina álgebra si es un espacio lineal, en el que a cada par x, y le corresponde un elemento de X, denotado (x y), con las siguientes propiedades,

1) $((x\ y)z) = (x(y\ z))$,

2) $(x(y + z)) = (x\ y) + (x\ z)$,

3) $((x + y)z) = (x\ z) + (y\ z)$,

4) $((\alpha\ x)\ (\beta\ y)) = \alpha\ \beta\ (x\ y)$,

donde $x,\ y \in X$; $\alpha\ ,\beta \in \Lambda$. El álgebra se denomina real o complejo según lo sea su campo escalar.

Si A y B son operadores lineales de X en X, definimos AB como el operador lineal tal que $(AB)x = A(Bx)$, $\forall x \in X$. Es claro que el conjunto de todos los operadores lineales de X en X constituye un álgebra,que,además,tiene elemento unidad: el operador I. Este operador lo definimos como,

$$I\ x = x \qquad \forall x \in X\ .$$

Se puede demostrar,además, que con la definición de norma de un operador ya dada,

$$||\ A\ B\ || \leqq ||\ A\ ||\ \ ||\ B\ ||$$

y

$$||\ I\ || = 1.$$

1.8. Proyecciones

Un operador lineal P, tal que, $\mathcal{D}(P) = X$ se denomina proyección o proyector (de X), si

$$P^2 = P.$$

Evidentemente todo $x \in X$ se puede representar como,

$$x = Px + (I - P)x,$$

siendo obviamente I-P también un operador proyección.

Respecto al valor de $||P||$ es evidente que:

$$|| P ||^2 \leqq || P^2 || = || P ||,$$

de donde,

$$|| P || \leqq 1 \qquad\qquad P \neq 0.$$

1.9. Espacio dual

Sea X un espacio normado y Λ su campo escalar asociado. El conjunto de todos los funcionales acotados (continuos) definidos en X se denomina espacio dual y se representa por X' y a sus elementos por x'. Es fácil demostrar que es un espacio lineal y puede transformarse en un espacio de Banach definiendo la norma por

$$\| x' \| = \sup_{\| x \| \leqq 1} | x' | .$$

1.10. Conos

Sea K un subconjunto de un espacio de Banach $\mathcal{B}$. K se denomina cono, [22] si,

1) $x, y \in K \Longrightarrow x + y \in K$; osea $K + K = K$;

2) $x \in K, \alpha > 0 \Longrightarrow \alpha x \in K$; es decir, $\alpha K \in K$;

3) $x \in K; - x \in K \Longrightarrow x = 0$, o también $K \cap (-K) = 0$.

Si,además,el cono satisface la siguiente propiedad,

4) $y \in X \Longrightarrow \exists y_1, y_2 \in K$ tal que $y = y_1 - y_2$ o, de otro modo,

$$K - K = K,$$

se denomina generador. Si cumple,

5) $\exists\ \delta > 0$ tal que $\forall\, x, y \in K$ se tiene

$$||x + y|| \geqq \delta \ \text{máx}(||x||, ||y||),$$

se denomina normal, y si verifica,

6) $\{x_n\} \in K$, $\lim\limits_{n \to \infty} ||x_n - x|| = 0 \Longrightarrow x \in K$, osea, $\bar{K} = K$,

se denomina cerrado.

Con el concepto de cono, se puede establecer un orden parcial en $\mathcal{B}$, tomando $x \leqq y$ siempre que $x, y \in \mathcal{B}$, $y - x \in K$.

Veamos algunos ejemplos de conos.

1) $K = \{ x \in R^n$ tal que $x = (x_1, x_2, \ldots x_n)$; $x_i \geq 0$; $i = 1, \ldots, n \}$.

Es evidentemente un cono generador, normal y cerrado.

2) $K = \{ (x, y, z),\ z \geqq \sqrt{x^2 + y^2} \}$.

Veamos que efectivamente es un cono

2a) $k_1 = (x_1, y_1, z_1) \in K \Longrightarrow z_1 \geqq \sqrt{x_1^2 + y_1^2}$,

$k_2 = (x_2, y_2, z_2) \in K \Longrightarrow z_2 \geqq \sqrt{x_2^2 + y_2^2}$,

$k_1 + k_2 = (x_1 + x_2, y_1 + y_2, z_1 + z_2)$,

$z_1 + z_2 \geqq \sqrt{x_1^2 + y_1^2} + \sqrt{x_2^2 + y_2^2}$.

Ahora bien, por la desigualdad de Minkowski [21]:

$$\left(\sum_{k=1}^{n} |a_k + b_k|^p\right)^{1/p} \leqq \left(\sum_{k=1}^{n} |a_k|^p\right)^{1/p} + \left(\sum_{k=1}^{n} |b_k|^p\right)^{1/p}$$

resulta,

$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} + \sqrt{x_2^2 + y_2^2} \geqq \sqrt{(x_1 + y_1)^2 + (x_2 + y_2)^2};$$

luego,

$$z_1 + z_2 \geqq \sqrt{(x_1 + y_1)^2 + (x_2 + y_2)^2} .$$

2b) $k = (x, y, z) \in K \Longrightarrow z \geqq \sqrt{x^2 + y^2}$

$\alpha z \geqq \sqrt{(\alpha x)^2 + (\alpha y)^2}$ $\qquad \alpha k = (\alpha x, \alpha y, \alpha z) \in K$

2c) Sean $k = (x, y, z) \in K$ ($\Longrightarrow z \geqq \sqrt{x^2 + y^2}$)

y $\quad -k = (-x, -y, -z) \in K \; (\Longrightarrow \quad -z \geqq \sqrt{x^2 + y^2}\;)$;

de donde,

$$z = 0 \qquad x = y = 0.$$

Así pues, K es efectivamente un cono.

2d) Sea $a \in K$, $a = (a_1, a_2, a_3)$. Podremos escribir:

$$\sqrt{a_1^{\,2} + a_2^{\,2}} \leqq a_3 + b$$

y así, tomando

$$k_1 = (a_1, a_2, a_3 + b) \in K,$$

$$k_2 = (0, 0, b) \in K,$$

tendremos

$$a = k_1 - k_2, \quad k_1 \in K; \; k_2 \in K.$$

2e) Sean $k_1 = (x_1, y_1, z_1) \in K$, $k_2 = (x_2, y_2, z_2) \in K$, se podría demostrar que, supuesto $\| k_1 \| > \| k_2 \|$

$$||k_1 + k_2|| \geqq \delta\, ||k_1||,$$

demostración que no transcribimos por ser compleja y no aportar nada significativo a nuestro trabajo.

2f) Sea $k_n = (x_n, y_n, z_n) \in K$ y supongamos que

$$(x_n, y_n, z_n) \underset{n \to \infty}{\longrightarrow} (x, y, z).$$

ya que,

$$z_n \geqq \sqrt{x_n^2 + y_n^2} \implies z \geqq \sqrt{x^2 + y^2},$$

se concluye,

$$(x, y, z) \in K$$

En resumen, el cono es generador, normal y cerrado. A este cono se le denomina, por razones obvias, en la literatura anglosajona "ice-cream" cono.

3) Otro ejemplo es el de las funciones de cuadrado integrable que son positivas casi en todas partes,

$$K = \{f \in L^2 (0, 1),\ f > 0 \ \text{ c.e.t.p}\} \subset L^2 (0, 1)$$

1.11. Cono dual

Sea $\mathcal{B}'$ el espacio dual del espacio de Banach $\mathcal{B}$ y K' el conjunto de todos los elementos de $\mathcal{B}'$ que son no negativos en K. Al conjunto,

$$K' = \{ x' \in \mathcal{B}' \quad \text{tal que} < x, x' > \geqq 0, \forall x \in K \}$$

lo llamaremos cono dual de K.

1.12. Operador K-positivo

Dado un cono K, un operador $A \in \mathfrak{L}[X]$ se denomina K positivo si $AK \subset K$.

De esta manera se puede establecer un orden parcial en $\mathfrak{L}[X]$, estableciendo que para $A, B \in \mathfrak{L}[X]$ es $A \geqq B$, si $(A-B)K \subset K$

1.13. Operador K-irreducible

Un operador $A \in \mathfrak{L}[X]$ se llama K-irreducible si $\forall x$ K$(x \neq 0)$, $x' \in K'$ $(x' \neq 0)$, donde K' es el cono dual de un cono $K \subset X$, existe un entero positivo $p = p(x, x')$ tal que

$$< A^p x, x' > > 0.$$

Como ejemplo podemos tomar el siguiente: Sea $K = R^{+3}$ y consideremos la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ \gamma & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

con $\alpha\beta\gamma = 1$, $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\gamma > 0$.

Vamos a demostrar que es R^{+3} irreducible.

En efecto,

$$A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha\beta \\ \beta\gamma & 0 & 0 \\ 0 & \alpha\gamma & 0 \end{bmatrix};$$

$$A^3 = I.$$

Consideremos ahora

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix},$$

$x_1 \geqq 0,\ x_2 \geqq 0,\ x_3 \geqq 0$ y sea

$$x' = (x_1',\ x_2',\ x_3'),$$

$$\langle Ax,\ x' \rangle + \langle A^2x,\ x' \rangle + \langle A^3\, x,\ x' \rangle =$$

$$= \left\langle \begin{bmatrix} \alpha x_2 + \alpha\beta x_3 + x_1 \\ \beta x_3 + \beta\gamma x_1 + x_2 \\ \gamma x_1 + \alpha\gamma x_2 + x_3 \end{bmatrix},\ (x_1',\ x_2',\ x_3') \right\rangle =$$

$$= x_1'\ (\alpha x_2 + \alpha\beta x_3 + x_1) + x_2'\ (\beta x_3 + \beta\gamma x_1 + x_2) +$$
$$+ x_3'\ (\gamma x_1 + \alpha\gamma x_2 + x_3) > 0.$$

1.14. Espacio de Hilbert

Es un espacio lineal complejo en el que a cada par de elementos x, y se le asocia un número complejo (x, y) llamado producto escalar, con las siguientes propiedades:

1) $(x + y,\ z) = (x,\ z) + (y,\ z)$ x, y vectores;

2) $(x, y) = \overline{(y, x)}$ $\qquad \overline{\alpha}$ complejo conjugado de α;

3) $(\alpha x, y) = \alpha (x, y)$ $\qquad \alpha$ escalar;

4) $(x, x) \geqq 0, \quad (x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0.$

Al espacio así definido se le denomina pre-Hilbert, denominándose espacio de Hilbert si, además, es completo. Representaremos el espacio de Hilbert por $\mathcal{H}$.

1.15. Operador adjunto

Sean X e Y espacios de Hilbert y X' e Y' sus espacios duales, representemos por A y A' operadores lineales acotados de X en Y y de Y' en X' respectivamente. Si A' satisface la ecuación,

$$(Ax, y) = (x, A'y) \qquad x \in X, \; y \in Y$$

a A' se le denomina operador adjunto de A.

Se puede demostrar que

$$|| A || = || A' ||.$$

1.16. Operadores definidos positivos

Un operador A se denomina definido positivo o simplemente positivo, si

$$(x, Ax) > 0 \qquad \forall\, x \neq 0, \quad x \in \mathfrak{D}(A)$$

y se llama semidefinido positivo o no negativo si,

$$(x, Ax) \geqq 0,$$

representándose respectivamente por,

$$A > 0 \text{ y } A \geqq 0.$$

1.17. Espectro y resolvente

Consideremos un espacio normado X y un operador lineal A tal que $\mathfrak{D}(A) \subset X$ y $\mathfrak{R}(A) \subset X$. Sea ahora $R(\lambda, A) = (\lambda I - A)$ (usualmente suprimiremos I y escribiremos simplemente $R(\lambda, A) = (\lambda - A)^{-1}$ donde λ es un escalar complejo . Si λ es tal que $\mathfrak{R}[R(\lambda, A)] = X$ y $(\lambda - A)^{-1}$ es acotado, diremos que λ pertenece al conjunto resolvente de A y escribiremos $\lambda \in \rho(A)$. Si $\lambda \notin \rho(A)$ diremos que pertenece al espectro de A que denotaremos por $\sigma(A)$.

Si $\lambda \in \rho(A)$, al operador $R(\lambda, A) = (\lambda - A)^{-1}$, lo denominaremos operador resolvente o simplemente resolvente.

Se puede demostrar que ρ (A) es un conjunto abierto por lo que σ (A) es cerrado ([32], pág. 273).

Supuesto que σ (A) es no vacio y acotado podemos definir

$$r(A) = \sup \{ \lambda \,/ \lambda \in \sigma(A) \}$$

y llamaremos a r(A) radio espectral de A.

El espectro σ(A) anteriormente definido lo podemos subdividir en tres conjuntos mutuamente excluyentes, llamados espectro puntual, espectro continuo y espectro residual, denotados respectivamente por $P\sigma(A)$; $C\sigma(A)$ y $R\sigma(A)$ y definidos así:

$P\sigma(A)$ si $R(\lambda, A)$ no existe;

$C\sigma(A)$ si $R(\lambda, A)$ existe pero no esta acotado y $\mathcal{R}(R(\lambda, A)) = X$,

$R\sigma(A)$ si $R(\lambda, A)$ existe (acotado o no) pero $\mathcal{R}(R(\lambda, A)) = X$.

Finalmente, enunciaremos el teorema de la transformación espectral, que posteriormente vamos a utilizar.

Si $f(\lambda)$ es una función de variable compleja, analítica en un dominio Δ que contiene el espectro de un operador A y tal que su complemento es compacto, se verifica

$$\sigma(f(A)) = f(\sigma(A)).$$

1.18. Semigrupo de operadores de un parámetro

Se define así al conjunto $T = [T(t), t > 0]$ de las transformaciones lineales acotadas, dependientes de un parámetro, de un espacio de Banach $\mathcal{B}$ en sí mismo, tal que,

$$T(t_1 + t_2) = T(t_1)\, T(t_2),$$

$\forall t_1, t_2 > 0$ donde el producto representa la ley usual de composición de transformaciones.

Algunos autores como Dunford-Schwartz ([10], pág. 613), Riesz-Nagy ([30], pág. 388) y sobre todo los tratadistas de Análisis Funcional Aplicado (Balakrishnan [2], pág. 163); Rithmeyer [28], pág. 351) definen T(0) = I. Sin embargo, nuestra definición está tomada del Hille-Phillips ([14], pág.

277-278), los cuales definen el semigrupo para $t > 0$; prolongando la definición en $t = 0$ para lograr continuidad en el origen, lo que se consigue la mayor parte de las veces tomando $T(0) = I$ y otras $T(0) = P$ (operador proyección).

El semigrupo $[T(t), t > 0]$ se dice que converge uniformemente al operador $T(t_0)$, o que es uniformemente continuo en t_0, si

$$\lim_{t \to t_0} \| T(t) - T(t_0) \| = 0 .$$

Se dice que converge fuertemente a $T(t_0)$ o que es fuertemente continuo en t_0, si

$$\lim_{t \to t_0} \| T(t)x - T(t_0)x \| = 0 \qquad \forall x \in \mathcal{B} .$$

Finalmente, se dice que converge débilmente a $T(t_0)$, o que es débilmente continuo en t_0, si

$$\lim_{t \to t_0} |x'[T(t)x] - x'[T(t_0)x]| = 0$$

$\forall x' \in \mathcal{B}'$ y $\forall x \in \mathcal{B}$.

Se denomina tipo de un semigrupo $[T(t),\ t > 0]$ fuertemente continuo al número real definido por,

$$\omega_0 = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \lg \| T(t) \|.$$

1.19. Semigrupo de clase C_0

Un semigrupo de operadores uniparamétrico $T = [T(t),\ t > 0]$ se dice que es de clase C_0 ([14] pág. 321) si es fuertemente continuo $\forall t > 0$ y, además,

$$\lim_{t \to 0} T(t)\, x = x.$$

Hay que destacar que para esta clase de semigrupos podemos prolongar la definición de semigrupo escribiendo,

$$T(0) = I.$$

Para los autores que definen un semigrupo incluyendo $t=0$, $T(0) = I$, un semigrupo es de clase C_0 si es fuertemente continuo en el origen, esta continuidad en el origen implica la continuidad $\forall t > 0$ ([2], pág. 163-164).

1.20. Generador infinitesimal de un semigrupo

Sea un semigrupo de operadores fuertemente continuo para $t > 0$. Se define el generador infinitesimal A del semigrupo como:

$$Ax = \lim_{t \to 0^+} \frac{T(t) - I}{t} x.$$

El conjunto de valores de x para los cuales existe el anterior límite se denotará por $\mathcal{D}(A)$ y evidentemente $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{B}$.

Es costumbre, que seguiremos, representar el semigrupo por T (t; A) cuando se quiera expresar explícitamente el generador del mismo. Por tanto, a partir de ahora, representaremos así los semigrupos de operadores.

1.21. Semigrupo de clase A

Un semigrupo de operadores uniparamétrico se denomina de clase A si

$$\lim_{\lambda \to \infty} R(\lambda, A)\, x = x \qquad \forall x \in \mathcal{B} .$$

Se puede demostrar ([14], pág. 322) que todo semigrupo de clase A es de clase C_0.

1.22. Teorema de Hille-Yosida

Una condición necesaria y suficiente para que un operador lineal cerrado A, genere un semigrupo $[T(t; A), t > 0]$ de clase C_0, tal que,

$$\| T(t; A) \| \leq M e^{\omega t} \qquad M, \omega \text{ constantes reales}$$

es que $\mathfrak{D}(A) = \mathfrak{B}$, y

$$\| [R(\lambda, A)]^n \| < \frac{M}{(\lambda + \omega)^n} \qquad n = 1, 2, \ldots$$

para $\lambda > -\omega$, y $\lambda \in \rho(A)$, ([10], pág. 624).

1.23. Transformada de Laplace - Stieltjes

Sea $\mathfrak{B}$ un espacio de Banach complejo y $a(\xi)$ una función de $[0, \infty]$ en $\mathfrak{B}$. Supongamos, además, que $a(\xi)$ sea de variación acotada fuerte sobre cada intervalo finito $[0, \omega]$.

Ya que una función de variación acotada fuerte tiene a lo sumo un número finito de discontinuidades de primera especie podemos normalizar a(ξ) escribiendo,

$$a(0) = 0$$

$$a(\xi) = 1/2\,[a(\xi - 0) + a(\xi + 0)] \qquad \text{para } \xi > 0.$$

La integral,

$$a(\xi, \eta) = \int_0^{\xi} e^{-\eta\tau}\, d\, a(\tau)$$

existe $\forall\eta$ finito y $\forall\tau$ finito y positivo. Si para un η particular existe $\lim_{\xi\to\infty} a(\xi, \eta)$, denotaremos el limite por,

$$f(\eta) = \int_0^{\infty} e^{-\eta\xi}\, d\, a(\xi)$$

y llamaremos a esta f(η) transformada de Laplace-Stieltjes de a(ξ). Si a(ξ) es absolutamente convergente y continua, entonces

$$a(\xi) = \int_0^{\xi} g(\tau)\, d\tau$$

y

$$f(\eta) = \int_0^{\infty} e^{-\eta\xi} g(\xi)\, d\xi$$

se denomina transformada de Laplace de $g(\xi)$.

La transformada de Laplace -Stieltjes constituye el nexo de uniôn entre el semigrupo $T(t; A)$ y la resolvente $R(\lambda, A)$. En efecto, se puede demostrar que para semigrupos de clase C_0 y bajo muy amplias condiciones ([14], cap. XI).

$$R(\lambda, A) = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t}\, T(t; A)\, dt$$

para todo $\lambda > \mathrm{Re}(\omega_0)$, y

$$T(t; A) = \lim \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\omega}^{\gamma + i\omega} e^{\lambda t}\, R(\lambda, A)\, d\lambda$$

donde $\gamma > \text{máx}\,(0, \omega_0)$.

Daremos a continuacôn algunas definiciones, que necesitaremos mâs adelante, para la resoluciôn numêrica del problema abstracto de Cauchy

1.24. Error de truncadura

Se denomina error de truncadura de un mêtodo, definido por un esquema R(hA), en el punto t+h a la siguiente expresión

$$||[T\ (h;\ A)) - R(h\ A)]\ T(t;\ A)\ u_0||,$$

es decir el error cometido en un cierto punto, supuesto que se aplica el método a un punto anterior conocido exactamente.

1.25. Orden del método

El método definido por el esquema R(hA) se dice de orden p si se verifica

$$||\ T\ (t + h;\ A)\ u_0 - R(hA)\ u\ (t)\ || = 0\ (h^{p+1}).$$

1.26. Consistencia

Un método se dice consistente si su orden es mayor o igual a la unidad [3].

Prácticamente, siempre se trabaja con métodos consistentes.

1.27. Estabilidad

Un esquema numérico R(hA) se denomina estable, si aplicado a un problema de Cauchy, una vez con la condición inicial u_0 y otra con la condición inicial u'_0, tal que

$$\| u_0 - u'_0 \| < \epsilon$$

las soluciones respectivas $R^n(hA)\, u_0$ y $R^n(hA)\, u'_0$ verifican que,

$$\| R^n(hA)\, u_0 - R^n(hA)\, u'_0 \| < M \epsilon ,$$

con M constante y t = nh.

Ya que,

$$\| R^n(hA)\, u_0 - R^n(hA)\, u'_0 \| < \|R^n(hA)\| \; \| u_0 - u'_0 \|,$$

la anterior definición se puede expresar diciendo que el esquema R(hA) es estable si ([29]), pag. 45),

$$\| R^n(hA) \| < M \qquad nh = t,$$

donde M puede depender de t.

1.28. Convergencia

Un método se denomina convergente ([29], pág. 44) si el error global en un punto cualquiera, es decir, la diferencia entre la solución exacta u (t) y la obtenida por aplicación del método v (t), tiende a cero al tender el paso también a cero. Es decir, se verifica,

$$\| u(t) - v(t) \| = \| T(t; A)\, u_0 - R^n(hA)\, u_0 \| \underset{h \to 0}{\longrightarrow} 0$$

con nh = t.

1.29. A-estabilidad

Un método numérico se denomina A-estable [9], si al aplicarlo a una ecuación

$$\frac{du}{dt} = \alpha u$$

$$u(0) = u_0$$

constante, $Re(\alpha) < 0$,se obtienen soluciones que tienden a cero al tender $n \longrightarrow \infty$, cuando el método se aplica con un paso constante h (nh = t).

1.30. A-aceptabilidad

Los métodos A-estables, permiten usar pasos de tamaño considerable más largos que los que son posible emplear en métodos que no tienen esta propiedad, una vez que la región transitoria ha pasado. El problema para desarrollar estos métodos, es encontrar aproximaciones racionales a la exponencial cuyo módulo este acotado por la unidad en el semiplano de la izquierda. Tales aproximaciones se denominarán A-aceptables. Es decir, una aproximación racional a la exponencial,

$$R_{m,n}(z) = \frac{\sum_{i=0}^{m} a_i z^i}{\sum_{i=0}^{n} b_i z^i}, \quad a_0 = b_0 = 1$$

se denomina A-aceptable si,

$$| R_{m,n}(z) | < 1 \quad , \text{ siempre que } Re(z) < 0.$$

También se define [31]:

a) A(α)-aceptabilidad:

La aproximación $R_{m,n}(z)$ a la exponencial se denomina A(α)-aceptable, $\alpha \in (0, \pi/2)$ si

$$| R_{m,n}(z)| < 1 \qquad \text{para} \qquad z \in S(\alpha),$$

con $S(\alpha) = \{ z \in C;\ Re(z) < 0,\ 0 \leq |arg(-z)| < \alpha \}$;

b) A(0)-aceptabilidad

La aproximación $R_{m,n}(z)$ se denomina A(0)-aceptable si,

$$| R_{m,n}(z) | < 1 \qquad \text{para} \quad z \text{ real y negativa;}$$

c) L-aceptabilidad

La aproximación $R_{m,n}(z)$ se denomina L-aceptable si es A-aceptable y además,

$$\underset{Re\, z \longrightarrow -\infty}{| R_{m,n}(z) | \longrightarrow 0}$$

cambiando A-aceptabilidad por A(α)-aceptabilidad o A(0)-aceptabilidad, se obtendrían L(α) y L(0)-aceptabilidad respectivamente.

1.31. Orden de la aproximación

La aproximación $R_{m,n}(z)$ a la exponencial e^z se denomina de orden s si cumple,

$$R_{m,n}(z) = e^z + O(|z|^{s+1}).$$

Finalmente, definiremos la aproximación racional de Padé, que constituye la base de la práctica totalidad de las aproximaciones racionales a los semigrupos de operadores.

1.32. Aproximación de Padé

Constituye la generalización de la aproximación polinomial de Taylor a las funciones racionales. Consideremos la siguiente función racional

$$R_{m,n}(x) = \frac{P_m(x)}{Q_n(x)}$$

y una función cualquiera f(x) que admita m + n derivadas en el origen. Se dice que $R_{m,n}(x)$ es la aproximación de Padé a f(x) si se cumple que

$$\frac{d^i}{dx^i} f(x) \Big|_{x=0} = \frac{d^i}{dx^i} R_{m,n}(x) \Big|_{x=0} ,$$

con i = 0, 1, ..., m + n.

Aunque a efectos prácticos se suele trabajar con esta otra definición equivalente: $R_{m,n}(x)$ es la aproximación de

Padé a f(x) si se verifica,

$$| f(x) - R_{m,n}(x) | \leqq M | x |^{\nu} \qquad -\Delta x \leqq x \leqq \Delta x$$

con ν lo más elevado posible. Normalmente ν = m+n+1 pero hay funciones (incluso analíticas) para las cuales ν < m+n+1, así como otras para las que ν > m+n+1 ([7], pág. 82) En cualquier caso $R_{m,n}(x)$ se denomina aproximación de Padé de orden [m, n] o elemento [m, n] de la tabla de Padé, que no es sino una matriz de infinitas filas y columnas, donde $R_{m,n}(x)$ ocupa la intersección de la m+1 columna y n+1 fila,

$$\begin{matrix} [0, 0] & [1, 0] & [2, 0] \dots \\ [0, 1] & [1, 1] & [2, 1] \dots \\ [0, 2] & [1, 2] & [2, 2] \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix}$$

La condición para que ν = m+n+1 es ([7] pág. 82) que el determinante de Hankel,

$$\begin{bmatrix} c_{m-n+1} & c_{m-n+2} \ \ldots & c_m \\ c_{m-n+2} & c_{m-n+3} \ \cdots & c_{m+1} \\ \cdot & & \\ \cdot & & \\ \cdot & & \\ c_m & c_{m+1} \ \ldots. & c_{m+n-1} \end{bmatrix}$$

($c_r = 0$, si $r < 0$) no se anule, siendo c_r los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor de $f(x)$

$$f(x) = c_o + c_1 + c_2\, x^2 + \ldots.$$

denominándose, si se verifica esto para todo m y n, a $f(x)$ normal ([7], pag. 82). Se puede mostrar que la función e^x es una función normal [12] .

CAPITULO 2

SISTESIS DE LOS CONOCIMIENTOS ACTUALES SOBRE LAS APROXIMACIONES RACIONALES A LOS SEMIGRUPOS DE OPERADORES

La busqueda de esquemas convergentes para la aproximación de la función exponencial, surge con la necesidad, planteada en numerosos problemas físicos, de resolver numéricamente el problema de Cauchy y la forma más moderna, y ciertamente más cómoda de ver esta cuestión es estudiando el problema abstracto de Cauchy: Representando por $\mathcal{B}$ un cierto espacio de Banach, se trata de encontrar una familia u(t) (t parámetro temporal) de elementos de $\mathcal{B}$, tal que ,

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt} u(t) = Au(t) \\ y \qquad & \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (1) \\ &u(o) = u_0 , \end{aligned}$$

donde A es un operador lineal que no depende del tiempo (pero puede depender de otros parámetros, por ejemplo de variables espaciales, como es el caso de diferentes problemas físicos), tal que $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{B}$ (normalmente denso) y $u_0 \in \mathcal{D}(A)$. Supondremos también que el problema está "bien planteado" en el sentido de Hadamard; es decir, la solución existe y es única para todo t y además depende de modo continuo de los datos iniciales [3].

Según se sabe ([14], cap. 23), la solución teórica de (1) es

$$u(t) = T\,(t;\,A)\,u_o,$$

donde $[T\,(t;\,A),\ t > o]$ es el semigrupo fuertemente continuo de operadores generado por el operador A.

Si este último operador es acotado, $T\,(t;A)$ coincide con $\exp\,(tA)$,

$$T(t;\,A) = e^{tA},$$

mientras que si A no es acotado, se puede expresar todavía como el límite de una exponencial ([14], cap. 10),

$$T(t;\,A)\,x = \lim_{\eta \longrightarrow o^+} e^{tA_\eta}x$$

donde,

$$A_\eta = \frac{T(\eta;\,A) - I}{\eta}\,.$$

Por lo que respecta a la solución numérica de (1) se procedía, en el pasado, a discretizar las variables espaciales y temporales, aplicando después las técnicas clásicas de Fourier. Sin embargo, en la década de los sesenta comenzó a emplearse por Varga [33] otra línea diferente de discretización, conocida como semidiscretización, consistente en discretizar primeramente las variables espaciales, dejando el tiempo como una variable continua, y analizar el sistema resultante de ecuaciones diferenciales por métodos matriciales, evitando el uso de las series de Fourier.

De este modo, si representamos por A_h la matriz obtenida discretizando el operador A, podemos aproximar (1) por el sistema,

$$\frac{du}{dt} = A_h\, u,$$

$$u(o) = u_o,$$

cuya solución es

$$u(t) = e^{A_h t}\, u_o,$$

así que para resolver (1), no tendremos más que aproximar la exponencial anterior.

Es interesante comparar el método anterior, con los resultados obtenidos por los métodos clásicos de Euler (explícito e implícito) y de Crank-Nicolson, consistentes en discretizar también la variable temporal. Representando por v(t) la aproximación a u(t), se tiene respectivamente,

$$\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} = A_h \cdot v(t),$$

$$\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} = A_h \; v(t + \Delta t),$$

$$\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} = A_h \frac{v(t + \Delta t) + v(t)}{2},$$

que resueltos en $v(t + \Delta t)$ dan lugar a las ecuaciones en diferencias,

$$v(t + \Delta t) = (I + \Delta t\, A_h)\; v(t),$$

$$v(t + \Delta t) = (I - \Delta t\, A_h)^{-1}\; v(t),$$

$$v(t + \Delta t) = (I - 1/2\; \Delta t\, A_h)\; (I + 1/2\; \Delta t\, A_h)^{-1}\; v(t)$$

cuyos segundos miembros no son, sino las aproximaciones a $e^{\Delta t\, A_h}$ siguientes $(z = \Delta t\, A_h)$

$$e^z = 1 + z + o(z),$$

$$e^z = \frac{1}{1 - z} + o(z),$$

$$e^z = \frac{2 + z}{2 - z} + o(z^2).$$

El problema así planteado (obtención de aproximaciones a la exponencial de orden tan elevado como sea posible) se complica considerablemente si la ecuación diferencial, es de tipo "stiff", como expondremos en el capítulo 4. En este caso, como sabemos, el método debe satisfacer además la condición adicional de la A-estabilidad (ver pág.33) [9], lo cual impone condiciones adicionales a las aproximaciones citadas.

2.1. Aproximaciones racionales

De entre todas las aproximaciones a la exponencial, las que han demostrado ser más ventajosas, en orden a la obtención de la A-estabilidad, han sido las aproximaciones racionales, y para estas la propiedad que traduce la A-estabilidad es la A-aceptabilidad (ver pág. 34), como resulta evidente de las definiciones de ambas. Además, es conveniente un rápido decrecimiento de estas aproximaciones al alejarnos de t = o, por lo que frecuentemente se exige a éstas que cumplan la condición suplementaria de la L-aceptabilidad.

En este trabajo las aproximaciones racionales se representarán por:

$$R_{m,n}(z) = \frac{P_m(z)}{Q_n(z)},$$

donde los grados de numerador y denominador son respectivamente m y n.

2.2. Aproximaciones de Padé

De entre todas las aproximaciones racionales a exp(z), las primeramente estudiadas fueron las de Padé (ver pág. 36), demostrándose enseguida, a partir del teorema del módulo máximo de las funciones analíticas, que todas las aproximaciones de la diagonal de la tabla de Padé son A-aceptables [4]. Un poco más tarde Ehle [11] demostró lo mismo para la primera y segunda subdiagonal de la tabla (es decir, aproximaciones de la forma ($R_{n,n-1}(z)$ y $R_{n,n-2}(z)$). Más aun, Ehle demostró que son L-aceptables. En este artículo se conjeturó, además, un importante resultado: la diagonal y las dos primeras subdiagonales eran las únicas funciones A-aceptables de la tabla de Padé.

En un artículo posterior, Nørsett [26], por medios totalmente distintos (teoría de los C-polinomios, que más adelante esbozaremos), demostró que la conjetura de Ehle era cierta para $R_{m,n}(z)$ con $n = m + 3$ y $n = m + 4$.

Finalmente, Iserles [15], usando de nuevo el teorema del módulo máximo, demostró la veracidad de la conjetura citada para $n > m + 3 > 3$ y para $n - m \not\equiv 2$ (mód. 4).

2.3. Aproximaciones restringidas

En la aproximación al operador exp(tA) por $R_{m,n}(hA)$, $kh = t$, nos vemos obligados a invertir el denominador de esta última, que es una función polinomial del operador A, lo cual suele ser muy costoso. Evidentemente, se obtendría una gran ventaja si $Q_n(z)$ tuviese solo ceros reales y mucha mayor si éstos fuesen uno solo. Se puede demostrar que en este último caso, incluso se preservan las propiedades del operador A; si, por ejemplo, éste fuese una matriz tridiagonal, también lo sería $Q_n(hA)$ con las grandes ventajas que esto reporta a la hora de su inversión. La idea anteriormente expuesta, fue desarrollada por Nørsett [25] para dar lugar a las llamadas aproximaciones de Padé restringidas $R_{m,n}(z,\alpha)$

$$R_{m,n}(z,\alpha) = \frac{P_m(z)}{(1 - z\alpha)^n}, \quad \alpha \text{ número real.}$$

Para un α cualquiera la aproximación es de orden n. Sin embargo, para cada n hay n valores de α que producen una aproximación de orden n+1. Estos valores son los recíprocos de las raices de $L'_{n+1}(z)$ donde $L_n(z)$ es el polinomio de Laguerre de orden n. Posteriormente Wanner, Hairer y Nørsett [36] demostraron, usando la teoria de "order-stars", que más adelante resumiremos, que los únicos valores de n para los cuales se puede escoger el parámetro α de modo que la aproximación sea A-aceptable y de orden n, son n = 1, 2, 3, 5.

2.4. Teoría de los C-polinomios.

Una de las teorías que prometen tener más futuro en el campo de las aproximaciones racionales, fue establecida por Nørsett en 1975 [26], dándole el nombre de teoría de los C-polinomios (C de coeficiente) y consistente en el establecimiento de una correspondencia entre la aproximación, de cualquier tipo, $R_{m,n}(z)$ de orden al menos m a la exponencial, y un cierto polinomio de grado n, el llamado C-polinomio. Así $R_{m,n}(z)$ se puede escribir como,

$$R_{m,n}(z)=\frac{\sum_{k=o}^{m} (-1)^k \, p_n^{(n-k)}(o) \, z^k}{\sum_{k=o}^{n} (-1)^k \, p_n^{(n-k)} \quad (1) \quad z^k} \qquad (m < n)$$

donde,

$$p_n^{(n)}(1) = 1; \quad p_n(1) = o \text{ y}$$

$$p_n(z) = \sum_{i=o}^{n} \gamma_i^{(n} z^i$$

y $p_n^{(i)}(z)$ es la i-ésima derivada de $p_n(z)$

Así por ejemplo, si

$$p_n(z) = \frac{n!}{(2n)!} L_n(2z-1) \qquad (2)$$

con $L_n(z)$ el polinomio de Legendre de grado n, y m=n, el conjunto de las aproximaciones obtenidas constituyen la diagonal de la tabla de Padé. Es decir (2) es el C-polinomio para estas aproximaciones.

Además, si denominamos $s \geqq m$ al orden de la aproximación, ésta es A-aceptable, si y solo si,

1) $R_{m,n}(z)$ es analítica en $\{z \in C/ \operatorname{Re}(z) < o\}$

2) $$2(-1)^n \sum_{i=\frac{s+2}{2}}^{n-1} \left\{ (-1)^i \int_o^1 p_n(t)\, p_n^{(2n-2i+1)}(t)\, dt \right\} x^{2i} + \left\{ |p_n(1)|^2 - |p_n(0)|^2 \right\} x^{2n} \geqq 0$$

donde la segunda condición establece simplemente que

$$|R_{m,n}(ix)| \leqq 1 \qquad \forall x \in R.$$

Con esta teoría se pueden desarrollar otros importantes aspectos de las aproximaciones racionales, como las aproximaciones de ajuste exponencial que veremos más adelante.

2.5. Order-stars

Junto con la anterior teoría constituye la más prometedora de aplicaciones futuras. Está basada en la gran importancia que tienen en las aproximaciones a la exponencial, la geometría de los conjuntos,

$$A = \{ z \in C : |R_{m,n}(z)| > |e^z| \}$$

y

$$D = C - A$$

el primero de los cuales recibe el nombre de order-stars [17]

Por ejemplo, $R_{m,n}(z)$ es A-aceptable, si y solo si, es analítica en $Re(z) < o$ y $A \cap iR = o$.

Otro ejemplo del gran campo de aplicación teórica de esta teoría es la demostración del siguiente teorema:

Si $R_{m,n}(z)$ es una aproximación de orden mayor o igual a $2n-2$ y tal que $|R_{m,n}(z)| < 1$ y si los coeficientes de $Q_n(z)$

tienen signos alternados, entonces $R_{m,n}(z)$ es A-aceptable (Crouzeix y Ruamps [8]).

2.6. Aproximaciones máximas

Otra vía en el estudio de las aproximaciones racionales, ha consistido en intentar que los puntos en los que exp(z) y $R_{m,n}(z)$ se cortan, se extiendan por todo el semiplano izquierdo, en vez de coincidir todos en el origen. El número de estos puntos de interpolación entre la exponencial y su aproximación está acotado por el siguiente teorema:

El número de ceros de la ecuación $R_{m,n}(z) = \exp(z)$ contados con su multiplicidad no puede exceder de $m + n + 1$ [16].

Por otra parte, se dice que la aproximación es máxima si el número de puntos de interpolación reales no positivos, contados con su multiplicidad, de $R_{m,n}(z)$ con exp(z) coincide con $m+n+1$.

El caso más estudiado, dentro de estas aproximaciones máximas es el de las aproximaciones ajustadas exponencialmente. Supongamos que $R_{m,n}(z)$ tiene ciertos parámetros libres $\beta_1, \beta_2, \ldots \beta_M$ que pueden fijarse de modo que,

$$R_{m,n}(z_i) = \exp(z_i) \qquad 1 < i < M < m + n + 1.$$

Se dice entonces [20], que la aproximación tiene M grados de ajuste exponencial. Si tuviese más de M parámetros libres (pero siempre menos de m + n + 1) podrían usarse para lograr un orden de convergencia más elevado en el origen.

Otro caso importante es el de las denominadas por Ehle [12], aproximaciones de Chebyshev de orden restringido. Este autor considera aproximaciones racionales a e^z que compartan las propiedades de las aproximaciones uniformes y de las aproximaciones Padé. Para ésto comienza definiendo la siguiente función racional (llamada por algunos autores [16], aproximación generalizada de Padé) dependiente de l ($l \leq m$) parámetros,

$$R_{m,n}^{(l)} = \frac{\left(1 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i\right) P_m(z) + \sum_{i=1}^{l} \alpha_i P_{m-i}(z)}{\left(1 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i\right) Q_n(z) + \sum_{i=1}^{l} \alpha_i Q_{n-i}(z)} = \frac{P_m^{(l)}(z)}{Q_n^{(l)}(z)}$$

donde

$$R_{m-i,n-i}(z) = \frac{P_{m-i}(z)}{Q_{n-i}(z)}$$

es la aproximación de Padé a e^z de orden $[m-i, n-i]$ y α_1, α_2 ... α_l constantes arbitrarias.

En estas condiciones se cumple que,

$$\frac{d^i}{dt^i} R_{m,n}^{(l)}(z) \Big|_{z=o} = \frac{d^i}{dt^i} e^z \Big|_{z=o} \qquad i = 0, 1, \dots m + n - l,$$

es decir, $R_{m,n}^{(l)}(z)$ se comporta como una aproximación de Padé en el origen.

Además, se verifica que existe un único conjunto de parámetros α_i $(1 < i < l)$ tal que,

$$R_{m,n}^{(l)}(z_i) = e^{z_i} \qquad (z_i \neq o) \qquad i = 1, 2, \dots, l$$

para z_i arbitrarios tal que $z_i \in (-\infty, o)$

donde $\alpha_i \in (0,1)$; $\sum_{i=1}^{l} \alpha_i \in (0,1)$.

Es decir, tenemos l grados de libertad para ajustar nuestra función a la exponencial, demostrándose, además, que $R_{m,n}^{(l)}(z)$ no puede ajustarse exponencialmente a más puntos distintos [16].

Finalmente, se demuestra [12], que para todo l se puede hallar un conjunto de l parámetros α_i,

$$\alpha_i \in (0,1), \quad \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \in (0,1)$$

tal que la correspondiente aproximación racional $R_{m,n}^{(l)}(z)$ cumple las condiciones necesarias y suficientes, para que sea una aproximación óptima en el sentido de Chebyshev; es decir exista un conjunto de puntos $0, z_1, z_2, \ldots, z_{l+1}$ y una constante μ tal que,

$$R_{m,n}^{(l)}(z_i) - e^{z_i} = (-1)^i \mu$$

En este caso, $R_{m,n}^{(l)}$ es la mejor aproximación racional en el sentido de Chebyshev (o aproximación óptima), pues se cumple que entre todas las funciones cuyo numerador y denominador sean de grados menor o igual a m y n respectivamente, es la que minimiza la expresión

$$\max_i |R_{m,n}^{(l)}(z_i) - e^z|.$$

2.7. Convergencia y estabilidad de las aproximaciones a la exponencial.

Como ya hemos visto a lo largo de este capítulo, al tratar de resolver el problema (1) por el método de discretización, nos vemos obligados a resolver una ecuación en diferencias de la forma

$$v(t+h) = R(hA)\ v(t),$$
$$v(0) = u_0,$$

siendo $R(z)$ una aproximación racional (en cuya notación hemos suprimido los subíndices, por no ser significativos en este apartado los grados del numerador y denominador), a e^z que supondremos A-aceptable.

Por otro lado, como el teorema de la equivalencia de Lax establece la equivalencia entre estabilidad y convergencia, supuesto que $|R(z) - e^z| = O(h^{n+1})$ con $n > 1$, nos referiremos indistintamente a uno y otro concepto, aunque operaremos más frecuentemente con el primero por ser más sencilla su formulación (pág 32).

Establecido esto, podemos pasar a revisar los resultados existentes en el momento actual, acerca de la convergencia y estabilidad, resultados que constituyen los antecendentes de nuestro trabajo.

El punto fundamental lo constituye la siguiente pregunta, ¿se pueden obtener esquemas estables y de alto grado de exactitud sin conocer la estructura del operador A?. La respuesta a esta cuestión es negativa. En efecto Kato demostró que para el operador

$$A = \frac{d}{dx} \; ; \; \mathfrak{D}(A) = L_1 \; (-\infty \, , \infty \,)$$

y representando por $R_{11}(z)$ la aproximación de Padé de orden [1,1] se verifica:

$$||R_{11}{}^{n}(hA)|| \geqq c.n^{1/2},$$

de donde evidentemente el método definido por $R_{11}(hA)$ no será estable.

Más adelante, en un conocido artículo [13], Kato y Herch conjeturaron que para un operador genérico A y una aproximación racional A-aceptable a e^z se cumple

$$||R^n \, (hA)|| = O(n^{1/2}),$$

comprobando esta conjetura para algunos operadores A particulares. Por ejemplo, demostraron que si A es el generador de un semigrupo fuertemente continuo de clase A (pág. 27) tal que,

$$||T\ (t;A)|| \leqq C_0\ e^{\omega t}\ ,$$

con C_0 y ω constantes y si $R(z)$ es A-aceptable con $|R(\infty)| < 1$ enconces

$$||R^n\ (hA)|| \leqq 1 + C_1\ n^{1/2}\ e^{tk\omega}\ , \qquad k \text{ constante.}$$

En un artículo posterior aunque publicado en el mismo número de S.I.A.M. [23], Brenner y Thomée utilizando el cálculo operacional de Hille-Phillips, demostraron la conjetura de Kato-Hersch, concretamente dedujeron que,

$$||R^n\ (hA)|| \leqq C\ n^{1/2}\ e^{\omega tk}\ , \qquad t = nh,$$

con k; C; ω constantes reales.

De este modo quedó probado que para A y R(z) generales no hay estabilidad. Habrá pués, que restringir el campo de las aproximaciones racionales, el de los operadores A o el de ambos.

Así, por ejemplo, Vitasek [35] demostró la estabilidad de cualquier esquema A-aceptable aplicado a operadores autoadjuntos (pág. 21), concretamente probó que para estos operadores

$$||R^n (hA)|| \leqq e^{Mt} , \qquad M \text{ constante real} ,$$

con A autoadjunto. Es decir, demostró que la A-estabilidad (e incluso la A(o)-estabilidad implicaba la estabilidad.

Asimismo, Kato y Herch [13] demostraron que para $R_{11}(z) = (2 + z)(2 - z)^{-1}$ y T(t; A) semigrupo de clase A

$$||R_{11} (hA)|| \leqq 1 + C\, n^{3/4}\, e^{2tm}.$$

Igualmente, dichos autores en el artículo citado, demostraron la estabilidad en el caso de semigrupos disipativos y holomorfos. Concretamente, si T(t; A) es disipativo y R(z) A-aceptable,

$$||R (hA)|| \leqq 1 ,$$

y si T(t; A) es holomorfo y R(z) A-aceptable y su grado (diferencia entre los grados del numerador y denominador) es negativo,

$$||R (hA)|| = O(h^{-\delta}) ,$$

cuando $h \to 0$ y $\delta > 0$ cualquiera.

CAPITULO 3

APROXIMACION RACIONAL A SEMIGRUPOS GENERADOS POR OPERADORES DE CLASE $\mathcal{T}$

El presente capítulo, en el que expondremos las líneas principales de nuestro trabajo, lo hemos dividido en tres teoremas y cuatro lemas. De ellos son rigurosamente originales los tres primeros lemas y los dos primeros teoremas. No ocurre lo mismo con el lema cuarto y el teorema tercero, por lo que hemos omitido sus demostraciones, haciendo solo referencia bibliográfica a las mismas.

Para el desarrollo de los anteriores lemas y teoremas, hemos precisado dar dos definiciones: en la primera, concretamos la clase de operadores a los que se aplica nuestra teoría y en la segunda, caracterizamos las funciones racionales, que pueden ser utilizadas como aproximaciones a los semigrupos generados por los operadores definidos anteriormente.

3.1. Lema 1

Sea Q un operador lineal acotado de un espacio de Banach $\mathcal{B}$ en sí mismo. Existe una norma equivalente $|[\cdot]|$ a la del espacio de Banach $||\cdot||$, dada por

$$|[x]| = \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k\, x||}{(r\,(Q) + \epsilon)^k} \qquad (1)$$

con $x \in \mathcal{B}$ y tal que,

$$|[Q]| < r(Q) + \epsilon$$

siendo ϵ un número real arbitrariamente pequeño y N un número natural función de ϵ .

Demostración:

Según se sabe,

$$\lim_{k \to \infty} ||Q^k||^{1/k} = r(Q)$$

siendo k un número natural y

$$r(Q) < ||Q^k||^{1/k}$$

Así pues, dado un $\epsilon > 0$, existe un número natural N, tal que $\forall k > N$,

$$||Q^k||^{1/k} < r(Q) + \epsilon \qquad (2)$$

Por otra parte, es fácil comprobar que $\forall x, y \in \mathcal{B}$

1) $|[x]| \geqq 0$; $|[x]| = 0 \Leftrightarrow x = 0$;

2) $|[\alpha x]| = |\alpha| \, |[x]|$ $\qquad \alpha$ escalar;

3) $|[x + y]| = \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k(x + y)||}{(r(Q) + \epsilon)^k} \leqq \sum^{N} \frac{||Q^k x|| + ||Q^k y||}{(r(Q) + \epsilon)^k} =$

$|[x]| + |[y]|$,

por lo que efectivamente la función $|[\cdot]|$ definida por (1) es una norma.

Veamos que es equivalente a $||\cdot||$. Si en (1) hacemos N=0,

$$|[x]|_{N=0} = ||x||$$

así que,

$$||x|| \leqq |[x]|$$

Además,

$$|[x]| = \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k x||}{(r(Q)+\epsilon)^k} \leqq \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k||}{(r(Q)+\epsilon)^k} ||x|| = \beta ||x||$$

siendo,

$$\beta = \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k||}{(r(Q)+\epsilon)^k} \geqq 1.$$

En resumen, como queríamos demostrar,

$$||x|| \leqq |[x]| \leqq \beta ||x||. \qquad (3)$$

Veamos ahora, con esta norma equivalente así definida, el valor de $|[Q]|$. Por definición:

$$|[Q]| = \sup_{x\neq 0} \frac{|[Qx]|}{|[x]|}$$

y de (1),

$$\frac{|[Qx]|}{|[x]|} = \frac{\displaystyle\sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^{k+1} x||}{(r(Q)+\epsilon)^k}}{\displaystyle\sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k x||}{(r(Q)+\epsilon)^k}} = \frac{1}{|[x]|}$$

$$\left\{ \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k x||}{(r(Q)+\epsilon)^k} + \frac{||Q^{N+1} x||}{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}} - ||x|| \right\} (r(Q)+\epsilon)$$

$$= r(Q) + \epsilon + \frac{r(Q)+\epsilon}{|[x]|} \left\{ \frac{||Q^{N+1} x||}{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}} - ||x|| \right\} \qquad (4)$$

deduciêndose a partir de (2) que la cantidad entre llaves es negativa. En efecto,

$$\frac{||Q^{N+1}x||}{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}} \leq \frac{||Q^{N+1}||\ ||x||}{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}} \leq \frac{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}}{(r(Q)+\epsilon)^{N+1}}\ ||x|| = ||x||$$

Asî pues volviendo a (4),

$$\frac{|[Qx]|}{|[x]|} < r(Q)+\epsilon$$

con lo que, en definitiva,

$$|[Q]| < r(Q)+\epsilon$$

Hay que destacar que el resultado de este lema, junto con la conocida desigualdad ([32], pâg. 394),

$$r(Q) \leq |[Q]|$$

nos permite escribir,

$$r(Q) \leq |[Q]| < r(Q)+\epsilon \quad .$$

Es decir, hemos demostrado la posibilidad de construir una norma, con la que acercarnos tanto cuanto queramos al radio espectral de un operador lineal acotado.

3.2. Teorema 1

Consideramos un espacio de Banach $\mathcal{B}$ y un operador lineal acotado A, que aplique $\mathcal{B}$ en sí mismo, de la forma,

$$A = \sum_{j=0}^{p} \lambda_j P_j + Q$$

donde

$$|\lambda j| = r(A) > r(Q)$$

y

$$P_i.P_j = P_j.P_i = \delta_{ij} P_j \quad (j,i = 1, 2, .., p);$$
$$P_j.Q = Q.P_j = 0 \qquad (j= 1, 2, ..., p).$$

Existe una norma equivalente $|||.|||$ con la norma original $||.||$ del espacio de Banach

$$|||x||| = \sum_{j=0}^{p} |[P_j x]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k x]|}{(r(Q) + \epsilon)^k} \qquad (5)$$

tal que,

$$|||A||| = r(A),$$

$x \in \mathcal{B}$, $\epsilon > 0$ arbitrario, N un número natural función de ϵ, y $|[\cdot]|$ la norma definida en el lema primero.

Demostración:

Por el lema primero, se sabe que dado un ϵ arbitario existe una norma $|[\cdot]|$, tal que,

$$|[Q]| < r(Q) + \epsilon \ .$$

Así pues, podemos elegir dicho ϵ de modo que,

$$|[Q]| < r(Q) + \epsilon < r(A) \qquad (6)$$

Teniendo en cuenta que $|[\cdot]|$ es una norma, es inmediato comprobar que $|||\cdot|||$ también lo es. En efecto,

1) $|||x||| \geqq 0, \quad |||x||| = 0 \Leftrightarrow x=0;$

2) $|||\alpha x||| = |\alpha| \ |||x|||$, α escalar;

3) $$|||x+y|| = \sum_{j=0}^{p} |[P_j(x+y)]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k\ (x+y)]|}{(r(Q)' + \epsilon\ )^k}$$

$$\leqq \sum_{j=0}^{p} |[P_j\ x]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k\ x]|}{(r(Q)+\epsilon\ )^k} + \sum_{j=0}^{p} |[P_j\ y]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[\ Q^k y\ ]|}{(r(Q)+\ \epsilon\ )^k}$$

$$= \ |||x||| + |||y|||.$$

Veamos ahora que es equivalente a $|[\cdot]|$,

$$|||x||| \leqq \left(\sum_{j=0}^{p} |[P_j]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[\ Q^k\ ]|}{(r(Q)+\epsilon\ )^k} \right) |[x]| = \nu\ |[x]|$$

donde $\nu>1$ pues $|[P_j]|\geq 1$, por ser P_j ($j=0, 1, \ldots, p$) proyectores (ver pág. 12).

Por otro lado,

$$|[x]| \leq \sum_{j=0}^{p} |[P_j x]| + |[x]| = \sum_{j=0}^{p} |[P_j x]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{||Q^k x||}{(r(Q)+\epsilon)^k} =$$

$= |||x|||.$

En resumen

$$|[x]| \leq |||x||| \leq \nu |[x]|.$$

con lo que $|||.|||$ es equivalente a $||\cdot||$ y por (3) a $||\cdot||$.

Para calcular $|||A|||$, consideremos en primer lugar,

$$x-Px \neq 0 \qquad (\sum_{j=0}^{p} P_j = P) \text{ , entonces,}$$

$$P_j Ax = P_j(\sum_{j=0}^{p} \lambda_j P_j + Q)\, x = \lambda_j P_j x$$

y tomando normas

$$||P_j A x|| = |\lambda_j| \; ||P_j x|| = r(A) \; ||P_j x|| \qquad (7)$$

Por otro lado,

$$Q^k A x = Q^k(\sum_{j=0}^{p} \lambda_j P_j + Q)\, x = Q^{k+1} x,$$

de donde,

$$||Q^k A x|| = ||Q^{k+1} x|| \leq ||Q|| \; ||Q^k x||.$$

Con estos resultados y de la definición de $|||.|||$ tenemos,

$$|||Ax||| = \sum_{j=0}^{p} |[P_j \, Ax]| + \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k \, A \, x]|}{(r(Q) + \epsilon)^k} \leq$$

$$r(A) \sum_{j=0}^{p} |[P_j \, x]| + |[Q]| \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k \, x]|}{(r(Q) + \epsilon)^k} \leq$$

$$r(A) \sum_{j=0}^{p} |[P_j \, x]| + r(A) \sum_{k=0}^{N} \frac{|[Q^k \, x]|}{(r(Q) + \epsilon)^k} \leq r(A) \; |||x|||$$

$$\frac{|||Ax|||}{|||x|||} \leq r(A).$$

En segundo lugar, si se verifica que $x - Px = 0$, se tendrá,

$$x\text{-}P \, x = 0 \Longrightarrow Q(I\text{-}P) \, x = Qx = 0 \Longrightarrow Q^{k+1} \, x = 0$$

con lo cual por (7),

$$|||Ax||| = \sum_{j=0}^{p} |[P_j \, Ax]| = r(A) \sum_{j=0}^{p} |[P_j \, x]| =$$

$= r(A) \;\; |||x|||.$

Así pues,

$$\frac{|||A \, x|||}{|||x|||} = r(A).$$

$$|||A||| = r(A) \qquad \text{c.q.d.}$$

3.3. Definición

Diremos que el operador lineal A pertenece a la clase Co (ω), si A es el generador infinitesimal de un semigrupo $[T(t; A), t>0]$ de clase Co tal que

$$||T(t; A)|| \leqq C\, e^{\omega t} \qquad C, \omega \text{ constantes reales}$$

Diremos que el operador lineal A pertenece a la clase $\mathfrak{T}$ si:

1) $A \in Co(\omega)$;

2) A genera el semigrupo $[T(t; A), t>0]$ de la forma

$$T(t; A) = P\, e^{\lambda o t} + S(t; A_1); \quad t>0, \lambda_0 \text{ real}, \tag{8}$$

con i) $P^2 = P$, $||P|| < \kappa < \infty$,

ii) $P\, S(t; A_1) = S(t; A_1)\, P = 0$,

y iii) $r[S(t; A_1)] < e^{\lambda_0 t}$.

Antes de seguir, veamos las propiedades de $S(t; A_1)$. De la definición de clase $\mathfrak{T}$, tendremos;

$$T(t_1;A)\ T(t_2;A) = (P\ e^{\lambda_0 t_1} + S(t_1;A_1))\ (P\ e^{\lambda_0 t_2} + S(t_2;A_1)) =$$

$$= P\ e^{\lambda_0(t_1+t_2)} + S(t_1;A_1)\ S(t_2;A_1)$$

$$T(t_1 + t_2;A) = P\ e^{\lambda_0(t_1+t_2)} + S(t_1 + t_2;A_1)$$

y por ser $[T(t;A),\ t>0]$ un semigrupo serán iguales los primeros miembros, y por tanto los segundos , con lo que $[S(t;A_1),\ t>o]$ es un semigrupo.

Por otro lado, al ser $[T(t;A),\ t>0]$ fuertemente continuo de clase Co, $[S(t;A_1),\ t>0]$ también lo será ([14], pág 389)

En resumen, $[S(t;A_1),\ t>0]$ es también un semigrupo fuertemente continuo de clase Co cuyo generador infinitesimal representaremos por A_1.

3.4. Lema 2

Si $A\in\mathfrak{T}$ y $[T(t;A),\ t>0]$ es acotado,

1) $A = \lambda_0 P + A_1$,

siendo A_1 el generador infinitesimal de $S(t;A_1)$;

2) λ_0 es negativo;

3) $\sigma(A_1) \subset \{z \in C$, tal que $\operatorname{Re}(z_0) < \lambda_0\}$.

Demostración

De la definición de clase $\mathcal{T}$, se tiene

$$T(t;A)\, x = P\, e^{\lambda_0 t}\, x + S(t;A_1)\, x \tag{9}$$

Restando (9) de la identidad

$$x = Px + x - Px,$$

dividiendo por t y tomando límites obtenemos

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{T(t;A) - I}{t}\, x = \lim_{t \to 0^+} P\, \frac{e^{\lambda_0 t} - 1}{t}\, x +$$

$$+ \lim_{t \to 0^+} \frac{S(t;A_1) - I}{t}\, x$$

de donde

$$A = \lambda_0 P + A_1,$$

con lo que hemos demostrado la primera proposición.

Es de notar que este resultado era previsible, puesto que el generador infinitesimal puede considerarse como la "derivada" en un cierto sentido del correspondiente semigrupo. Así pues, "derivando" (8) con respecto al tiempo se obtiene el resultado deseado

2) Tomando la norma de (8)

$$||T(t;A)|| \leq ||P|| \, e^{\lambda_0 t} + ||S(t;A_1)||$$

y como $T(t;A)$ es acotado, se deduce que λ_0 debe ser negativo.

3) De la definición de clase $\mathfrak{I}$ (condición iii))

$$r|S(t;A_1)| < e^{\lambda_0 t}$$

y con el lema 1º, se obtiene

$$|[\, S(t;A_1)\,]| < e^{\lambda_0 t}$$

y de la definición de tipo de un semigrupo se obtiene, representando por ω_0 el tipo $S(t;A_1)$,

$$\omega_0 = \limsup_{t \to \infty} \frac{1}{t} \ln |[S(t;A_1)]|,$$

con lo cual

$$\sigma(A_1) \subset \{z \in C, \text{ tal que } Re(z) < \lambda_0\}, \qquad \text{c.q.d.}$$

Finalmente, una característica a destacar es que

$$S(t;A_1)\ (I-P) = (I-P)\ S(t;A_1) = S(t;A_1),$$

como resulta evidente de ii).

Introduciremos a continuación una condición que denominaremos $\mathcal{M}$.

3.5. Definición

Sea un operador lineal A de la forma

$$A = \lambda_0 P + A_1$$

y una función racional $R_{m,n}(z)$.

Diremos que $R_{m,n}(z)$ satisface la condición $\mathcal{M}$ si es una aproximación A-aceptable a la exponencial y además verifica,

$$|R_{m,n}(\lambda_0)| > \sup \{ |R_{m,n}(\mu)|;\ Re\ \mu < \lambda_0 \} .$$

Que la clase definida por la condición $\mathcal{M}$ no es vacia es fácil de comprobar prácticamente, concretamente lo hemos hecho para las aproximaciones de Padé $R_{o,1}(z)$ y $R_{o,2}(z)$ y ya que las aproximaciones situadas por debajo de la diagonal principal de la tabla de Padé, toman el valor unidad en el eje imaginario y tienden a cero cuando $z \longrightarrow -\infty$, es fácil suponer que también satisfagan dicha condición. Sin embargo, no pueden cumplir dicha condición, pues toman el valor unidad tanto en el eje imaginario como en $-\infty$, las aproximaciones de la diagonal principal.

Veremos a continuación un lema fundamental para nuestro estudio, que establece la conservación de la condición $\mathfrak{T}$ cuando un operador de esta clase, se toma como argumento de una función racional, que verifique la condición $\mathcal{M}$.

3.6. Lema 3

Sea $A \in \mathfrak{T}$ y $R_{m,n}(z)$ una función racional que verifica la condición $\mathcal{M}$. Entonces

$$R_{m,n}(hA) \in \mathfrak{T} \qquad\qquad h > 0 .$$

Demostración:

Comencemos demostrando que,

$$R_{m,n}(hA) = P\, R_{m,n}(h\,\lambda_0) + R_{m,n}(hA_1)$$

en efecto, de (7),

$$T(t;A) = P\, e^{\lambda o t} + S(t;A_1)$$

tomando transformadas de Laplace

$$R(\lambda, A) = \frac{P}{\lambda - \lambda_o} + R(\lambda, A_1)$$

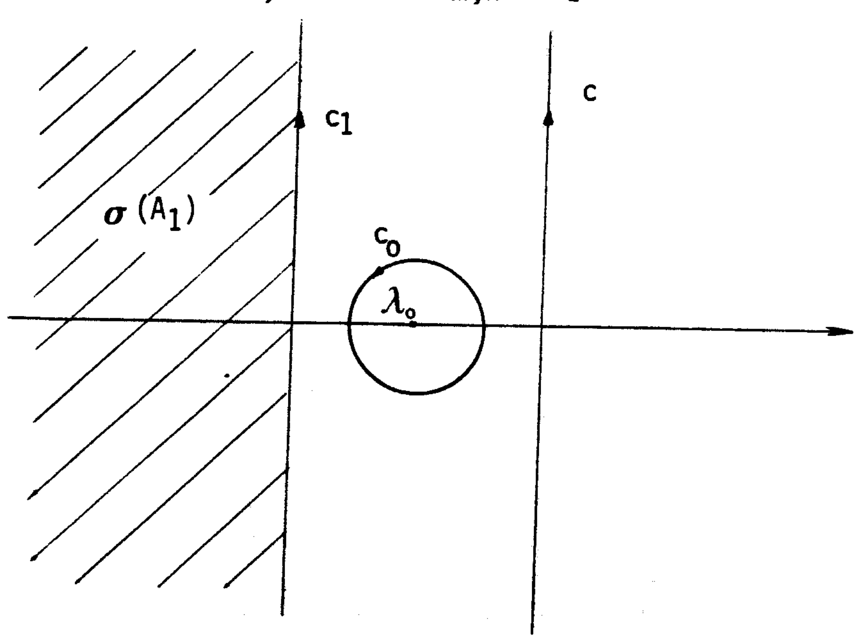
y de aquí (ver figura),

$$R_{m,n}(hA) = \frac{1}{2\pi i} \oint_c R_{m,n}(h\lambda)\, R(\lambda, A)\, d\lambda =$$

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c_o} R_{m,n}(h\lambda) \frac{P}{\lambda - \lambda_o}\, d\lambda +$$

$$+ \frac{1}{2\pi i} \oint_{c_1} R_{m,n}(h\lambda)\, R(\lambda, A_1)\, d\lambda =$$

$$= P\, R_{m,n}(h\lambda o) + R_{m,n}(h\, A_1), \qquad \text{c.q.d.}$$



Además, por el teorema de la transformación espectral (ver pág. 24) y la condición $\mathcal{M}$,

$$r[R_{m,n}(h\ A_1)] = \sup\{|R_{m,n}(\mu)| \text{ tal que } \mu\in\sigma(A_1)\} < R_{m,n}(h\lambda_0)$$

y finalmente no quedará más que demostrar:

$$P\ R_{m,n}(h\ A_1) = R_{m,n}(h\ A_1)\ P = 0.$$

En efecto, ya que,

$$P\ .\ R_{m,n}(h\ A_1) = \frac{1}{2\pi i}\oint R_{m,n}(h\mu)\ P\ R(\mu,A_1)\ d\mu\ ,$$

$$R_{m,n}(h\ A_1)\ .\ P = \frac{1}{2\pi i}\oint R_{m,n}(h\mu)\ R(\mu,A_1)\ P\ d\mu\ ,$$

bastará con demostrar,

$$P\ R(\mu,A_1) = R(\mu,A_1)\ P\ .$$

Ahora bien, según se sabe

$$R(\mu,A_1) = \int_0^{\infty} e^{-\mu t}\ S(t;A_1)\ dt$$

así pues,

$$P\,R(\mu,A_1) = \int_0^{\infty} e^{-\mu t}\,P\,S(t;A_1)\,dt$$

$$R(\mu,A_1)\,P = \int_0^{\infty} e^{-\mu t}\,S(t;A_1)P\,dt$$

y teniendo en cuenta la condición ii) de la definición de clase $\mathfrak{T}$, se llega al resultado deseado.

Para determinar estos lemas, necesarios para la demostración del teorema 2, vamos a enunciar el siguiente lema, cuya demostración no daremos pues, a diferencia de los anteriores, es ya conocido y puede consultarse, por ejemplo, en ([14], pág. 357).

3.7. Lema 4

Supuesto que $[T(t;A),\ t > o]$ sea un semigrupo continuo, $S(t;B) = e^{-\omega t}\,T(t;A)$ define también un semigrupo fuertemente continuo y

$$B = A - \omega I$$

donde B es el generador infinitesimal de $S(t;B)$ y A el de $T(t;A)$.

3.8. Teorema 2

Sea $A \in \mathfrak{T}$ y $R_{m,n}(z)$ una función racional que cumple la condición $\mathcal{M}$. Entonces:

$$||[R_{m,n}(h\ A)]^n|| \leqq M\ e^{\kappa t}$$

$n = 1, 2, \ldots, t = nh, t = \text{fijo}.$

Es decir, el esquema definido por $R_{m,n}(z)$ es estable.

Demostración:

Supongamos primero que $T(t;A)$ sea acotado. Según el lema tercero y el teorema primero, podemos hallar una norma $|||\cdot|||$ tal que

$$|||R_{m,n}(h\ A)||| = r\ [R_{m,n}(h\ A)] = R_{m,n}(h\lambda_0),$$

y así, por ser $R_{m,n}(z)$ A-aceptable y $\lambda_0 < 0$ (lema 2),

$$|||R_{m,n}(h\ A)||| < 1,$$

de modo que,

$$|||[R_{m,n}(h\ A)]^n|||< 1,$$

n = 1, 2, 3, ...,

y con otra norma equivalente cualquiera

$$||[R_{m,n}(h\ A)]^n|| < \beta, \quad \beta > 0$$

n = 1, 2, 3, ...

Lo cual demuestra la estabilidad del esquema definido por $R_{m,n}(z)$ para T(t;A) acotado.

Supongamos ahora que A es el generador infinitesimal de un semigrupo $[T(t;A),\ t > 0]$ no acotado

$$||T(t;A)|| \leqq Ce^{\omega t}, \quad \omega > 0$$

Definamos una nueva función,

$$f_h(z) = \frac{1}{h\omega}[R_{m,n}(z + h\omega) - R_{m,n}(z)]$$

despejando $R_{m,n}(z + h\omega)$ resulta,

$$R_{m,n}(z + h\omega) = R_{m,n}(z) + h\omega f_h(z)$$

y consiguientemente, podremos escribir

$$R_{m,n}(h\ A) = R_{m,n}(h\ B) + h\,\omega\, f_h(h\ B) \qquad (10)$$

donde evidentemente

$$B = A - \omega\, I$$

Un aspecto a destacar en la anterior expresión es que, asi como la función de operador $R_{m,n}(h\ B)$ podriamos definirla a partir de $R_{m,n}(z)$ del modo clásico,

$$R_{m,n}(h\ B) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C R_{m,n}(z)\ R(z,\ hB)\ dz,$$

(C contorno de $\sigma(A)$ con respecto de $R_{m,n}(z)$) pues $\sigma(B)$ es un subconjunto del dominio de analiticidad de $R_{m,n}(z)$, no ocurre lo mismo con $R_{m,n}(h\ A)$ respecto de $R_{m,n}(z + h\,\omega)$, ya que si denominamos Δ al dominio de analiticidad de este último

$$\Delta = \left\{ z \in C\ /\ Re(z) < -h\omega \right\}$$

y teniendo en cuenta que el tipo del operador A es $\omega>0$, se tiene

$$\sigma(A) \subset \{z \in C \ / \ Re(z) < \omega\},$$

por lo que

$$\sigma(A) \not\subset \Delta$$

y hemos de definir $R_{m,n}(h\ A)$ a partir del cálculo operacional de Hille-Phillips ([14] cap. XV o [10] cap. VIII), como

$$R_{m,n}(h\ A) = \int_0^\infty T(t;A)\ d\ a(t)$$

siendo $R_{m,n}(z + h\omega)$ la transformada de Laplace-Stieltjes (ver pág. 28) de la función $a(t)$,

$$R_{m,n}(z + h\omega) = \int_0^\infty e^{(z + h\ \omega)t}\ d\ a(t)$$

consecuentemente, también

$$R_{m,n}(h\ B) = \int_0^\infty T(t;B)\ d\ a(t),$$

$$f_h(h\ B) = \int_0^\infty T(t;B)\ d\ b(t),$$

con

$$R_{m,n}(z) = \int e^{zt}\, d\, a(t),$$

$$f_h(z) = \int e^{zt}\, d\, b(t).$$

Volviendo a (10) y tomando la norma .

$$|||R_{m,n}(h\ A)||| < |||R_{m,n}(h\ B)||| + h\omega|||f_h(h\ B)|||$$

como ahora B es el generador de un semigrupo acotado tendremos por la primera parte de este teorema

$$|||R_{m,n}(h\ B)||| < 1.$$

Veamos lo que sucede con $f_h(h\ B)$. Por ser $R_{m,n}(z)$ A-aceptable, se tendrá

$$R_{m,n}(z) = r_\infty + \frac{P_2(z)}{Q_2(z)}$$

con $|r_\infty| = 1$ ó 0 y grado $Q_2(z) >$ grado $P_2(z)$. Del mismo modo

$$R_{m,n}(z + h\omega) = r_\infty + \frac{P_1(z)}{Q_1(z)}$$

con $|r_\infty| = 1$ ó 0 y grado $Q_1(z) >$ grado $P_1(z)$.

Entonces

$$f_h(z) = \frac{1}{h\omega}|R_{m,n}(z + h\omega) - R_{m,n}(z)\ | =$$

$$= \quad r_\infty + \frac{P_1(z)}{Q_1(z)} - r_\infty + \frac{P_2(z)}{Q_2(z)} =$$

$$= \quad \frac{P_1(z)\ Q_2(z) - P_2(z)\ Q_1(z)\quad P_3(z)}{Q_1(z)\quad Q_2(z)} = \frac{P_3(z)}{Q_3(z)}.$$

Como B es el generador de un semigrupo acotado, tendremos, por la primera parte de este teorema

$$|||R_{m,n}(h\ B)||| < 1.$$

Para ver lo que sucede con la cota de f_h (h B) necesitamos una ciertas definiciones y nomenclatura que tomaremos de [5]. Representaremos por M el espacio de Banach de las medidas acotadas en R con norma,

$$||a(t)|| \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\ |a|(t)$$

y por $\hat{M}$ el álgebra de sus transformadas de Fourier,

$$\hat{a}(z) \qquad = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itz}\ d\ a(t),$$

con norma

$$||\hat{a}|| = ||a||$$

Además, denotaremos por $\tilde{M}$ el álgebra de las transformadas de Laplace $\tilde{a}$ de las medidas:

Si $\tilde{a} \in \tilde{M}$ con soporte comprendido en R^+,

$$\tilde{a}(z) = \int_0^\infty e^{zt} \ d\,a(t)\ .$$

Asimismo denotaremos por $f_{(c)}$ la restricción de f a Re z = c, así por ejemplo,

$$f_c(\xi) = f(i\xi + c).$$

Por otra parte, por ser $R_{m,n}(z)$, A-aceptable, se tendrá $f_h(0) \in L^2(R)$ y $f_h'(0) \in L^2(R)$ y así $f_h(0) \in \tilde{M}$ y $f_h \in \tilde{M}$ y por consiguiente,

$$||f_h(B)|| \leqq C,$$

de donde,

$$||R_{m,n}(h\,A)|| \leqq 1 + h\omega C.$$

Así pues,

$$||||R_{m,n}(h\,A)|^n||| \leqq (1 + h\omega C)^n < e^{\omega Ct}.$$

Finalmente, no debemos terminar este capítulo sin hacer algunas precisiones sobre el modo de operar prácticamente para resolver un problema de Cauchy bien planteado, así como estudiar,en este caso,la convergencia de la solución obtenida.

A efectos prácticos, no solo se procede a sustituir el semigrupo de operadores por su aproximación racional, sino que además el operador A se discretiza (habitualmente por diferencias finitas o elementos finitos) para obtener una matriz A_h, con lo cual la solución que obtenemos es de la forma,

$$v(t) = R^n (h A_h) u_0, \qquad n h = t,$$

en lugar de la solución teórica

$$u(t) = T(t;A) u_0,$$

con lo cual el error cometido será:

$$||u(t)|| - v(t)|| \tag{11}$$

Pero antes de seguir estudiando la anterior expresión, enunciaremos un nuevo teorema que vamos a necesitar inmediatamente y cuya demostración puede ser consultada en [22].

3.9. Teorema 3

Si $u \in \mathcal{D}(A^{s+2})$, $R(z)$ es A-aceptable y

$$|R(z) - e^z| = 0\,(|z|)^{s+1}.$$

se tiene

$$||R^n(h\,A)\,u_0 - T(t;A)\,u_0|| = 0(h^s).$$

Volviendo a (11) aplicando la desigualdad del triángulo se obtiene

$$||T(t;A)\,u_0 - R^n(h\,A_h)\,u_0|| \leqq ||T(t;A)\,u_0 - e^{tA_h}\,u_0|| +$$

$$+ ||e^{tA_h}\,u_0 - R^n\,(h\,A_h)\,u_0||.$$

Ahora bien, supuesto $||A - A_h|| = 0(h^{s+1})$ con $u_0 \in \mathcal{D}(A^1)$ se puede demostrar [13] que,

$$||e^{tA_h}\,u_0 - T(t;A)\,u_0|| = 0(h^s).$$

Como por otra parte, supuesto que se cumplen las hipótesis del teorema 3, tenemos,

$$||R^n(h\,A)\,u_0 - T(t;A)\,u_0|| = O(h^s),$$

resulta en definitiva

$$||u(t) - v(t)|| = O(h^s)$$

con $u_0 \in \mathfrak{D}(A^j)$; $j = \text{máx}\ (1, s+2)$.

Así pues, supuesto nuestro método convergente para un cierto operador A, también resultará convergente para el operador resultante de discretizar aquel A_h.

Pero tadavía hay otro resultado notable y es que para resolver el problema de Cauchy abstracto sustituyendo A por A_h mediante nuestro método habrá que comprobar si $A_h \in \mathfrak{T}$, lo cual será ahora mucho más fácil, por ser A_h una matriz y resultar bastante más sencillo el cálculo de su espectro.

CAPITULO 4

EJEMPLOS DE APLICACIONES

El presente capítulo lo vamos a dedicar a exponer diferentes tipos de ecuaciones de frecuente aparición en Análisis Numérico Aplicado, que pueden ser descritas por operadores de la denominada clase $\mathcal{T}$, y a los que por tanto son aplicables los métodos de resolución ya descritos. Comenzaremos por los sistemas llamados "stiff" cuyos mas notables ejemplos prácticos se hallan en la teoría de control e ingeniería química.

4.1. Sistemas "stiff"

Consideremos el sistema de ecuaciones diferenciales

$$y' = Ay + \Phi(x)$$

donde $\Phi(x)$ es un vector de m dimensiones y A una matriz m x m. La solución de este sistema es

$$y(x) = \sum_{k=1}^{m} c_k \; e^{\lambda_k x} \; z_k + \Psi(x)$$

donde λ_k son los autovalores de A; z_k los correspondientes autovectores; c_k constantes a determinar a partir de las condiciones iniciales y $\Psi(x)$ una solución particular del sistema. Supongamos ahora que $\mathrm{Re}\lambda_k < 0$ con $k = 1, 2, \ldots m$ y sean λ_μ y λ_ν dos autovalores tales que:

$$|\mathrm{Re}\lambda_\mu| \leqq |\mathrm{Re}\,\lambda_k| \leqq |\mathrm{Re}\,\lambda_\nu|.$$

Ahora, para llegar a obtener numéricamente la solución permanente $\Psi(x)$ debemos:

1) Tomar un intervalo de integración numérica tanto más grande cuanto más pequeño sea $|\mathrm{Re}\lambda_\mu|$.

2) Escoger un paso h de integración pequeño, pues el tamaño de h, debido a la estabilidad, está determinado por $r(A)$ que será igual a $|\mathrm{Re}\lambda_\nu|$.

En resumen, si $|\mathrm{Re}\lambda_\nu| \gg |\mathrm{Re}\lambda_\mu|$ debemos de trabajar en un intervalo grande aplicando un paso pequeño. Esta situación extremadamente desfavorable se denomina "stiffness". Así pues podremos definir [19] un sistema "stiff" del modo siguiente:

El sistema lineal

$$y' = Ay + \Phi(x) \quad ,$$

se denomina "stiff" si

1) $\operatorname{Re}\lambda_k < 0 \qquad \forall k,$

2) $\max\limits_{1 \leq k \leq m} |\operatorname{Re}\lambda_k| \gg \min\limits_{1 \leq k \leq m} |\operatorname{Re}\lambda_k|.$

A la razón

$$\frac{\text{máx } |\operatorname{Re}\lambda_k|}{\text{mín } |\operatorname{Re}\lambda_k|}$$

se le denomina radio de "stiffness".

Para sistemas $y' = f(x, y)$ no lineales, la "stiffness" está determinada por la estructura de los autovalores del jacobiano de $f(x, y)$, y así diremos que el anterior sistema es "stiff" en un intervalo I de x si $\forall x \in I$ los autovalores de $\frac{\partial f}{\partial y}$ satisfacen las condiciones 1) y 2) de nuestra definición.

A estos sistemas se les conoce también como "sistemas con gran constante de Lipschitz", pues, llamando L a esta constante, se tiene

$$L = \left\|\frac{\partial f}{\partial y}\right\| \geqq r\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \text{máx } |\lambda_k| \qquad (k = 1, \ldots, m)$$

y para estos sistemas hemos visto que

$$\text{máx } |\lambda_k| \gg 0$$

Un ejemplo sencillo, pero muy interesante, lo constituye la ecuación del calor

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t} \qquad 0 < x < 1, \ 0 < t < T$$

con la condición inicial

$$u(x, 0) = g(x)$$

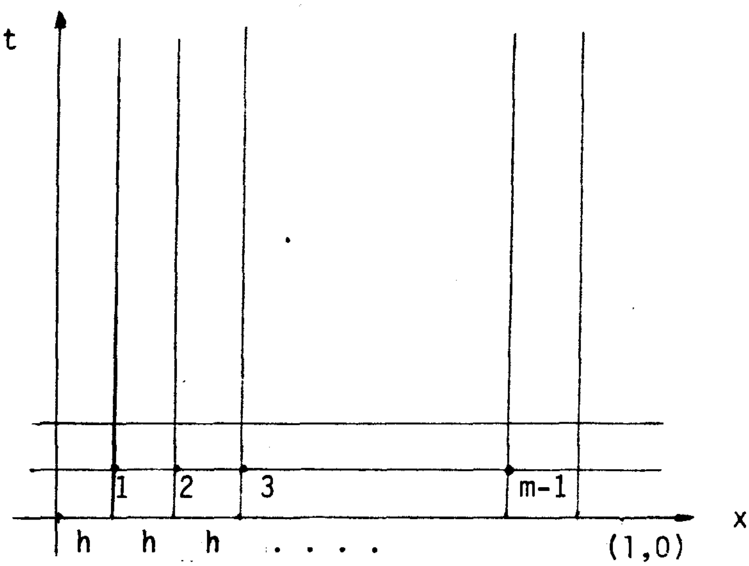
y las condiciones de contorno

$$u(0,t) = u(1,t) = 0.$$

Para resolver esta ecuación procederemos por el método de semidiscretización, que como dijimos anteriormente, consiste en discretizar primero las variables espaciales. Escribiendo $h = \frac{1}{m}$ y

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u(x - h, t) - 2u(x, t) + u(x + h, t)}{h^2}$$

se tendrá



$$u_1' = \frac{1}{h^2} (- 2u_1 + u_2)$$

$$u_2' = \frac{1}{h^2}(u_1 - 2u_2 + u_3)$$

$$u_3' = \frac{1}{h^2}(u_2 - 2u_3 + u_4)$$

.
.
.

$$u_{m-1}' = \frac{1}{h^2} (u_{m-2} - 2u_{m-1})$$

sistema de ecuaciones diferenciales que escrito en forma matricial quedará,

$$
\begin{bmatrix} u_1' \\ u_2' \\ u_3' \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{m-1}' \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & 0 \\ \cdot & & & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{m-1} \end{bmatrix}
$$

o, en la forma más compacta,

$$u'_h = A_h \, u_h \tag{1}$$

y solo quedará resolver este sistema. Ahora bien, los autovalores λ_k de la matriz A_h están dados por:

$$\lambda_k = -\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2 \frac{k\pi}{2m} \qquad k = 1, \ldots, m-1$$

y consecuentemente el sistema (1) es "stiff", pues, para h pequeño

$$\lambda_1 = -\frac{4}{h^2} \operatorname{sen}^2 \frac{\pi h}{2} \simeq -\pi^2,$$

mientras que,

$$\lambda_{m-1} \cong \frac{-4}{h^2}.$$

De la definición expuesta de sistemas "stiff", la aplicación de nuestros resultados a los mismos es obvia, ya que si A es la matriz de un sistema "stiff" sus autovalores son distintos, la matriz será diagonalizable y por tanto se podrá expresar de la forma

$$A = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \ P_k,$$

con

$$P_k^2 = P_k, \qquad k = 1, 2, \ldots, m,$$

$$P_k \cdot P_l = 0, \qquad k \neq l,$$

$$I = \sum_{k=1}^{m} P_k$$

que implica que A sea de clase $\mathfrak{T}$.

4.2. Ecuación de difusión

El siguiente tipo de ecuaciones que vamos a tratar por nuestro método son las ecuaciones de difusión , de máxima importancia en la Física. Tomaremos como ejemplo de estas ecuaciones, la siguiente ecuación en un espacio tridimensional,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}\,(D(x)\ \operatorname{grad}\ u(x,t)) + \sigma u(x,t) \qquad x \in G \quad (2a)$$

con las condiciones de contorno,

$$u(x,t) = 0; \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \qquad x \in \partial G \ (2b)$$

y la condición inicial $u(x,0) = u_0$,

donde $u(x,t)$ representa la concentración de materia en el punto x, en el momento t; $x = (x_1, x_2, x_3)$, $D(x)$ es una función positiva y parcialmente continua en G, y σ una constante negativa.

Nuestro operador será

$$A = \operatorname{div}\,(D(x)\ \operatorname{grad}) + \sigma$$

y su dominio de definición,

$$\mathfrak{D}(A) = \{u \in L^2,\ u' \in L^2,\ u'' \in L^2;\ u(x) = 0,\ \ x \in \partial G\}$$

Para demostrar que este operador pertenece a nuestra clase $\mathcal{S}$, necesitamos previamente estudiar sus propiedades, y para esto escribiremos el segundo miembro de (2a) de la forma más manejable,

$$Au = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial u}{\partial x_j}\right) + \sigma u$$

prescindiendo de expresar la dependencia de D y u con la variable.

$1^{\underline{a}}$ A es un operador autoadjunto (pág.21).

En efecto, sean u, v $\in \mathfrak{D}(A)$, formemos el producto escalar (A u, v)

$$(A\,u,\,v) = \int_G \left(\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial}{\partial x_j} u\right)\right) v \;\; dx + \sigma \int_G u\,v\,dx;$$

aplicando ahora la fórmula de Green ([6], vol I, pag. 280) a la primera integral del segundo miembro, tenemos

$$(Au,\,v) = - \sum_{j=1}^{3} \int_G \left(D \frac{\partial}{\partial x_j} u\right) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} v\right) \;\; dx +$$

$$+ \sum_{j=1}^{3} \int_{\partial G} (D \frac{\partial u}{\partial n} v - D \frac{\partial v}{\partial n} u) \, ds + \sigma \int_G u \, v \, dx,$$

donde la segunda de las integrales valdrá cero por las condiciones de contorno. Aplicando de nuevo la fórmula de Green, encontramos

$$(Au, v) = \sum_{j=1}^{3} \int_G u \frac{\partial}{\partial x_j} (D \frac{\partial}{\partial x_j} v) \, dx + \sigma \int_G u \, v \, dx =$$

$$= (u, Av).$$

$2^{\underline{a}}$ A es definido negativo (pág. 22).

Resulta inmediato del anterior desarrollo, pues teniendo en cuenta que $\sigma < 0$,

$$(Au, u) = - \sum_{j=1}^{3} \int_G D \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u \right)^2 dx + \sigma \int_G u^2 \, dx < 0.$$

$3^{\underline{a}}$ $\sigma(A) \subset (-\infty, 0)$.

Por ser A autoadjunto, su espectro pertenece al cuerpo de los reales. Además, si $\lambda \in \sigma(A)$, $0 \leqq \lambda \in R$, se tendrá,

$$(A \, u, u) = (\lambda \, u, u) = \lambda \, u^2 \geqq 0$$

en contradicción con la propiedad demostrada de ser A definido negativo.

Como corolario, se deduce que A^{-1} existe, pues, ya que $0 \notin \sigma(A)$, no existirá ningún $u \neq 0 \in \mathfrak{D}(A)$, tal que

$$Au = 0,$$

quedando probado ([32], pág. 14) la existencia del operador inverso.

4ª A^{-1} es continuo.

Bastará con demostrar que

$$||Au|| \geqq m||u||, \qquad \forall u \in \mathfrak{D}(A),$$

pues entonces ([32], pág. 55) existe y es continuo el operador A^{-1}, cumpliéndose, además,

$$||A^{-1}|| \leqq \frac{1}{m}.$$

Recordando la desigualdad de Schwartz tendremos,

$$||Au||\ ||u|| \geqq |(Au, u)| =$$

$$= \Big| - \sum_{j=1}^{3} \int_G \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial}{\partial x_j} u \right) u \, dx + \sigma \int_G u^2 \, dx \Big|$$

y, aplicando nuevamente la fórmula de Green, teniendo en cuenta las condiciones de contorno

$$||Au|| \ ||u|| \geq \Big| \sum_{j=1}^{3} \int_G \cdot D \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u \right)^2 dx + \sigma \int_G u^2 \, dx \Big|$$

Recordando ahora la desigualdad de Friederich: si $u \in L^2$, $u' \in L^2$, $\exists \, \kappa > 0$ tal que

$$\int_G |u'(x)|^2 \, dx \geq \kappa \int_G |u(x)|^2 \, dx$$

y aplicando el teorema del valor medio a la primera de las integrales

$$||Au|| \ ||u|| \geq D_0 \sum_{j=1}^{3} \int_G \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u \right)^2 dx + |\sigma| \int_G u^2 \, dx,$$

$D_0 = \min_G |D|$

tendremos definitivamente

$$||Au||\ ||u|| \geqq Do\,\kappa \sum_{j=1}^{3} \int_G u^2\, dx + |\sigma| \int_G u^2\, dx = m\, ||u||^2.$$

Así pues

$$||Au|| \geqq m||u|| \qquad \text{c.q.d.}$$

5ª A es cerrado (pág. 9).

Efectivamente, consideremos una sucesión $\{u_n\}$ tal que $u_n \in \mathfrak{D}(A)$, $\forall$ n. Sea $\{f_n\}$ otra sucesión tal que,

$$A\, u_n = f_n$$

por la existencia de A^{-1}, esto implica,

$$u_n = A^{-1}\, f_n$$

y como A^{-1} es también continuo

$$\lim_{n \to \infty} u_n = A^{-1} \lim_{n \to \infty} f_n .$$

Llamando $\lim_{n \to \infty} u_n = u$; $\lim_{n \to \infty} f_n = f$, tendremos,

$$u = A^{-1} f$$

de donde

$$u = \mathcal{R}(A^{-1}) = \mathfrak{D}(A). \tag{3}$$

Por otra parte, de

$$u = A^{-1} f$$

se obtiene,

$$f = A u$$

es decir,

$$\lim_{n \to \infty} f_n = A (\lim_{n \to \infty} u_n), \tag{4}$$

deduciéndose de (3) y (4) que A es cerrado.

También se podría demostrar que A es cerrado probando que el operador adjunto de uno dado es siempre cerrado. En efecto, sea A' el operador adjunto de A, y sean u_n y f tales que,

$$\{ u_n \} \in \mathcal{D}(A'),$$

$$u_n \underset{n \to \infty}{\longrightarrow} u,$$

$$A\; u_n \underset{n \to \infty}{\longrightarrow} f;$$

$\forall z \in \mathcal{D}(A)$ estas hipótesis implican

$$(z,\; u_n) \longrightarrow (z, u), \tag{5}$$

$$(z,\; A'\; u_n) \longrightarrow (z,\; f), \tag{6}$$

De la definición de operador adjunto:

$$(z,\; A\; u_n) = (Az,\; u_n)$$

A su vez, de (4) se obtiene,

$$(Az, u_n) \longrightarrow (Az, u) \qquad (7)$$

y de (6) y (7) se llega a,

$$(Az, u) = (z, f);$$

de donde,

$$f = A' u$$

y

$$u \in \mathfrak{D}(A') \qquad \text{c.q.d.}$$

6ª A es el generador infinitesimal de un semigrupo de clase C_0 (pág. 26).

Es fácil de comprobar a partir del teorema de Hille-Yosida. Como acabamos de demostrar que A es cerrado y evidentemente $\overline{\mathfrak{D}(A)} = \mathfrak{B}$, solo queda por probar que,

$$\|[R(\lambda, A)]^n\| \leq \frac{M}{(\lambda+\omega)^n}$$

para $\lambda > 0$; n= 1, 2, 3, ...

Según se sabe si A es autoadjunto,

$$||R(\mu, A)|| \leq \frac{1}{d(\mu, \sigma(A))}$$

([10], vol II, pág. 1.192) representando por $d(\mu, \sigma(A))$ la distancia de μ a $\sigma(A)$. Como $\sigma(A) \subset (-\infty, 0)$, si $\mu > 0$

$$d\ (\mu, \sigma(A)) \geqq \mu.$$

Así pues:

$$||R(\lambda, A)|| \leqq \frac{1}{\lambda} \qquad \text{c.q.d.}$$

En resumen, se verifica el teorema de Hille-Yosida (ver pág. 28) por lo que efectivamente A genera un semigrupo $T(t;A)$ y consecuentemente nuestra ecuación (2a), con la condición de contorno (2b), tiene solución que se puede expresar por

$$u(t) = T(t; A)\ u_0,$$

siendo $u_0 = u(0)$.

Vistas estas propiedades, podemos demostrar que el operador $A \in \mathfrak{T}$. Según la tercera de las propiedades del operador A, $\sigma(A) \subset (-\infty, 0)$ y, además, es conocido que el conjunto de sus autovalores son simples y constituyen conjunto numerable, siendo el sistema de sus autofunciones (que representamos por v_k) ortonormales y completo ([6], vol I, pág. 293).

Es decir;

$$0 > \lambda_0 > \lambda_1 > \cdots\cdots$$

y

$$\int_G v_k \cdot v_l \, dx = \delta_{ij} .$$

De lo anterior se deduce que si $u(x) \in \mathfrak{D}(A)$ y satisface (2a), puede expresarse como

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (u, v_k)\, v_k,$$

por lo cual,

$$A\, u = A \sum_{k=0}^{\infty} (u, v_k)\, v_k = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k\, (u, v_k) v_k$$

y podremos escribir

$$Au = \lambda_0 Pu + A_1 u,$$

donde

$$Pu = (u, v_0)\, v_0,$$

$$A_1 u = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (u, v_k)\, v_k,$$

expresiones que prueban que el operador P representa el operador proyección sobre v_0 mientras que A_1 representa la suma de las proyecciones sobre las restantes autofunciones v_k, k = 1, 2, ...

De lo anterior es inmediato que $A \in \mathfrak{T}$ y por tanto podremos aplicar nuestro método a este tipo general de ecuaciones.

4.3. Ecuación de transporte

El último ejemplo de ecuaciones a las que demostraremos que se pueden aplicar nuestro método lo constituye la ecuación de transporte. Como es sabido la forma más general de esta ecuación es:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\,\nabla\right) u\,(x,\,v) = -\,\upsilon\,\sigma(x,\,v)\,u\,+$$

$$\int_V \upsilon'\sigma_s\,(v',\,v,\,x)\,u\,(x,\,v')\,dv'$$

$$+\int_V \upsilon'\nu(v)\,\sigma_f\,(v')\chi(v',\,v)\,u\,(x,\,v')\,dv' + Q \qquad x \in G \quad (8a),$$

con las condiciones de contorno

$$u\,(x,\,v) = 0 \qquad x \in \partial G \quad (8b)$$

$$(u\,(x,\,v),\,n\,(x)) < o \qquad x \in \partial G \quad (8c)$$

donde [23], ([29], pág. 218, 222), donde x,v y v' son vectores que caracterizan la posición y las velocidades de la partícula; u (x, v) denota la densidad de partículas (normalmente neutrones de un reactor) y también depende del tiempo aunque por simplicidad no lo hemos denotado explicitamente, finalmente, υ , σ , σ_f, σ_s, ν , χ , Q, son magnitudes que representan parámetros físicos del sistema.

En las condiciones de contorno, n(x) representa la normal exterior a la superficie, por lo que es evidente, que la segunda de las condiciones, implica la no incidencia de partículas al sistema desde el exterior.

Habitualmente Q = 0 y así lo consideraremos. Por lo que respecta a la última de las integrales de (8a), vale cero si el medio no es multiplicativo, es decir es un moderador, aunque aquí la consideremos distinta de cero para mayor generalidad.

Como normalmente $u(x, v)$ es conocido en $t = 0$ las ecuaciones (8a), (8b) y (8c) constituye un problema de valores iniciales que se puede escribir simplificadamente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A\, u$$

$$u\,(o) = u_0$$

donde A es el operador de Boltzmann que descompondremos en la forma

$$A = L + S + F,$$

$$L = -\, v\, \nabla - \upsilon\, \sigma\,,$$

$$S = \int_V \upsilon'\, \sigma_s\,(v', v, x)\, dv',$$

$$F = \int_V \upsilon'\, \nu(v)\, \sigma_f\,(v')\, \chi(v', v)\, dv',$$

con $\mathfrak{D}(A) = \{u, u'' \in L^p (G)\}$

y

$p \in (1,\infty)$

Descomponiendo a su vez el operador de scattering S en la forma

$$S = S_e + S_{in},$$

donde S_{in} es compacto, Marek demuestra en el artículo citado [22] que si

$$r(R(a, A)) > r(R(a, L + S_e)), \qquad (9)$$

siendo

$$a \in \rho(A) \cap \rho(L + S_e),$$

se verifica:

1) A es el generador infinitesimal de un semigrupo de operadores T(t; A) de clase C_0.

2) Hay un $\hat{t} > 0$ tal que $r(T(\hat{t}; A))$ es un polo de $R(\mu,$

$T(\hat{t};A))$ con un número finito de autovalores asociados.

3) Existe un λ_0 tal que,

$$\lambda \in \sigma(A) \Longrightarrow \mathrm{Re}\,\lambda \leqq \mathrm{Re}\,\lambda_0 = \lambda_0$$

y existe un $\tilde{\lambda} \in \sigma(A)$ con $\mathrm{Re}\,\tilde{\lambda}_0 = \lambda_0$

4) El semigrupo $T(t; A)$ es K-positivo (ver pág. 18) para $t > 0$.

5) El semigrupo $T(t; A)$ es K-irreducible (ver pág. 18) para grandes valores de t.

Con estas conclusiones tomadas como hipótesis se puede demostrar finalmente [22] que:

1) $\sigma(A) \cap \{\lambda : \mathrm{Re}\,\lambda = \lambda_0\} = \{\lambda_0\}$,

2) $T(t; A) = e^{\lambda_0 t} P + S(t; A_1)$,

donde

$$P^2 = P,$$

$$P \, . \, S\,(t;\, A_1) = S(t;\, A_1) \, . \, P = 0$$

y

$$e^{\lambda_o t} > r|S(t;\, A_1)|,$$

es decir,

$$A \in \mathfrak{T} \, ,$$

con lo que queda demostrada la posibilidad de resolver estas importantes ecuaciones de la Física por nuestro método. Hay que hacer notar que la condición (9) apenas es restrictiva, pues es satisfecha por gran número de modelos prácticos de ecuaciones de transporte con que se representan los procesos de este tipo que tienen lugar, por ejemplo, en el interior de un reactor.

(1) AXELSSON, OWE: A class of A-stable methods, BIT 9 (1969), pag. 185-199.

(2) BALAKRISHNAN, A.V.: Applied functional Analysis, Springer-Verlag, New-York, 1976.

(3) BIRKHOFF, GARRETT: Well-set Cauchy problems and Co-semigroups, J. of Math. Anal. and Applic. 8 (1964), pag. 303-324.

(4) BIRKHOFF, GARRETT AND VARGA, RICHARD: Discretization errors for Cauchy problems, J. Math. Phisics 44 (1965), pag. 1-23.

(5) BRENNER, P. AND THOMME, V.: On rational approximations of semigroups, SIAM J. Num-Anal. vol. 16, N^{o} 4, (1979) pag. 683-694.

(6) COURANT, R., HILBERT, D., Methods of Mathematical Phisics, vol. I y II, Interscience, New-York, 1961.

(7) CHUI, CHARLES, K., Recent results on Padé approximants and related problems in aproximation theory II, Ed., Lorentz, Chui, Schumaker.

(8) CROUZEIX, M. AND RUAMPS, F.: On rational approximation to the exponential, RAIRO Anal. Num. 11 (1977) pag. 241-243.

(9) DAHLQUIST, GERMUND G.: A special stability problem for linear multistep methods, BIT 3 (1963) pag. 27-43.

(10) DUNFORD, N., SCHWARTZ, J.T.: Linear Operator, vol. I y II, Interscience, New-York, 1958 y 1963.

(11) EHLE, BYRON L.: A-stable methods and Padé approximations to the exponential, SIAM J. Math. Anal. vol. 4, Nº 4 (1973) pag. 671-680.

(12) EHLE, BYRON L.: On certain order constrained Chebyshev rational approximations, J. Approx. Theory 17 (1976) pag. 297-306.

(13) HERSH, Ř. AND KATO, T.: High - accuracy stable difference schemes for well-posed initial value problems, SIAM J. Num. Anal., vol. 16, Nº 4 (1979) pag. 670-682.

(14) HILLE, E., PHILLIPS, R., S.: Functional Analisys and Semigroupi, American Mathematical Society, Providence, 1957. Ed. revisada, 1974.

(15) ISERLES, ARIEH: On the A-acceptability of Padé approximations, SIAM, J. Math. Anal. vol. 10, N° 5, 1979, pag. 1002-1007.

(16) ISERLES, ARIEH: On the generalized Padé approximations to the exponential function, SIAM J. Num. Anal. vol. 16, N° 4, (1979), pag. 631-636.

(17) ISERLES, A. AND POWELL, M.J.D.: On the A-aceptability of rational approximations that interpolate the exponential function (To appear in I.M.A.J. Num. Anal.).

(18) KOLMOGOROV, A., FOMINE,S.: Elements de la theorie des fonctions et de L'Analyse Fonctionnelle, Mir, Moscú 1974.

(19) LAMBERT, J, D., Computational methods in ordinary differential equations, Wiley, New-York, 1973.

(20) LINIGIER, W AND WILLOUGHBY, R.A.: Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equation, SIAM J. Num. Anal. vol. 7, (1970), pag. 47-66

(21) HARDY, G.H., LITTLEWOOD, J.E., POLYA, G., Inequalities 2ª ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1952.

(22) MAREK, IVO: Fundamental decay mode and asymptotic behaviour of positive semigroups, Czechoslovak Math J., 30 (1980) pag. 579-590.

(23) MAREK, IVO: Frobenius theory of positive operators: comparison theorems and applications, SIAM J. Appl. Math. vol. 19, (1970) pag. 607-628.

(24) MEIS, T., MARCOWITZ, U., Numerical solution of partial differential equations, Springer-Verlag, New-York, 1981.

(25) NØRSETT, SYVERT P.: One-step methods of Hermite type for numerical integration of stiff systems, BIT 14, (1974), pag. 63-77.

(26) NØRSETT, SYVERT P.: C-polynomials for rational approximation to the exponential function, Num. Math. 25, (1975) pag. 39-56.

(27) PRAGER, M. TAUFER, J. AND VITASEK, E.: Overimplicit multistep methods, Aplikace Matematiky, 18 (1973) pag. 399-421.

(28) RICHMEYER, ROBERT, D.: Principles of Advanced Mathematical Physics, vol. I, Springer-Verlag, New-York, 19.

(29) RICHMEYER, R.D., MORTON, K.W.: Difference Methods for initial value problems, 2ª ed., Interscience, New-York, 1967.

(30) RIESZ, F., NAGY, B. SZ.: Lecons d'Analyse Fonctionnelle Gauthier-Villars, Budapest, 1975.

(31) SIEMIENIUCH, J.L.: Properties of certain rational approximations to e^{-z}, BIT 6 (1976) pag. 172-191.

(32) TAYLOR, A.E., LAY, D.C., Introduction to Functional Analysis, 2ª ed., Wiley, New-York, 1980.

(33) VARGA, RICHARD S.: On higher order stable implicit methods for solving parabolic partial differential equations, J. Math. Phisics 40 (1961) pag. 220-231.

(34) VITASEK, E. AND TAUFER, J.: Numerical Solution of evolution problems in Banach spaces, Topics in Num .Anal.

(35) VITASEK, EMIL: A-stability and Numerical solution of evolution problems, Istituto per le applicazione del calcolo "Mauro Picone". Publicazioni, Serie III, Nº 186 (1979).

(36) WANNER, G., HAIRER, E. AND NORSETT, S.P.: Order stars and stability theorems, BIT 18 (1978) pag. 475-478.