



CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN
MATEMÁTICAS, A.C.

UN MÉTODO ESPECTRAL PARA EL PROBLEMA
DE STURM-LIOUVILLE FRACCIONARIO.

TESIS

para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

con especialidad en

MATEMÁTICAS APLICADAS

PRESENTA:

Francisco Javier Martínez Deferia

Directores de Tesis:

Miguel Ángel Moreles Vázquez

Joaquín Peña Acevedo

Agosto de 2015

Guanajuato, Gto. México

Agradecimientos

A mi esposa Marisela Beltrán y a mi hermoso bebé Ryan Kaled, por ser mi apoyo y fortaleza para lograr este sueño que se hace realidad.

A mis padres Francisco Javier Martínez e Hilaria Deferia, que respetaron mis decisiones y apoyaron durante esta travesía, y me proporcionaron amor y confianza, a pesar de la distancia.

A mi hermana Xochitl Martínez por animarme en cada momento y saber que puedo contar con su apoyo.

A mis asesores, el Dr. Miguel Angel Moreles y el Dr. Joaquín Peña por ser apoyo y mi guía durante esta tesis, y sobre todo por haber confiado en que podía terminar esta etapa.

A mis compañeros de maestría, pero sobre todo a mis amigos que me acompañaron durante esta etapa, por su amistad y confianza en todo momento: Hugo Carrillo, Hugo Peña, Armando Albornoz y Wagner Badilla.

A CIMAT y CONACYT, el primero por haberme dado las instalaciones para poder realizar un mejor desempeño y a todo el personal por su gran amabilidad, el segundo por darme el apoyo económico para mi manutención.

Introducción

El cálculo fraccionario es una teoría que generaliza las nociones de diferenciación e integración entera, a una diferenciación e integración de orden fraccionario. En las últimas décadas ecuaciones diferenciales que involucran operadores diferenciales fraccionarios, han mostrado ser modelos más apropiados en muchos sistemas de ciencia e ingeniería (ver [Vázquez and Velasco \(2011\)](#)), de principal interés es el problema de Sturm-Liouville Fraccionario.

En esta tesis se trabaja con la Ecuación de Schrödinger Fraccionaria (ESF) que es propuesta por [Laskin \(2002\)](#) el cuál es un problema particular del tipo de Sturm-Liouville Fraccionario. Este problema ha sido abordado por distintos autores, tales son [Guerrero and Moreles \(2014\)](#), [Kwaśnicki \(2012\)](#), [Laskin \(2002\)](#) entre otros.

Un antecedente es el análisis de [Zayernouri and Karniadakis \(2013\)](#) donde consideran derivadas fraccionarias en el sentido de Riemann-Liouville y Caputo, resuelven el Problema de Sturm-Liouville Fraccionario (PSLF) y desarrollan el análisis espectral. También hacen una generalización de los polinomios de Jacobi al caso fraccionario, introduciendo los polifracctonomios de Jacobi. Estos polifracctonomios sirven de base para desarrollar Métodos Espectrales Fraccionarios.

Por otra parte, los Métodos Espectrales (ME) buscan soluciones aproximadas a una ecuación o sistema de ecuaciones diferenciales a través una combinación lineal de funciones ortogonales, existen varios tipos de ME, los más conocidos son: Método de Colocación (MC), Tau y Galerkin.

En esta tesis, se propone y desarrolla **un Método Espectral** basado en un MC, para resolver numéricamente la ESF. Consideramos la ESF con la derivada fraccionaria en el sentido de Riesz, la natural en mecánica cuántica fraccionaria.

En la teoría Sturm-Liouville, son de interés los problemas inversos espectrales. El más clásico es la determinación del potencial a partir del espectro del operador. En el

caso fraccionario, determinar el orden de la derivada del conocimiento del espectro es un problema inmediato. Además de proponer un método de estimación, es de interés aportar elementos sobre la bondad de la aproximación. Una técnica en esta línea es la estimación bayesiana, la cual desarrollamos. La implementación usa de manera exhaustiva el método espectral propuesto de solución del problema de valores propios.

El contenido de la tesis es como sigue.

En el primer capítulo se presenta una breve introducción a la teoría de **Sturm-Liouville**, se muestra que los polinomios ortogonales son solución, además de ser la base de los **Métodos Espectrales** los cuales son descritos.

En el segundo capítulo se presenta el **Problema de Sturm-Liouville Fraccionario** como también un **Método Espectral Fraccionario**. Se resuelve numéricamente un problema de Sturm-Liouville que surge de manera natural en mecánica cuántica fraccionaria la cual es la ESF.

En el tercer capítulo, se expone y resuelve un problema inverso de Sturm-Liouville fraccionario asociado a la ESF. En este caso, solo se hace la estimación del parámetro α , donde para su solución recurrimos a la teoría de Bayesiana.

Finalmente, en el último capítulo damos a conocer las conclusiones acerca de nuestro método espectral, como también el trabajo a futuro.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos	ii
Introducción	iii
ÍNDICE GENERAL	v
1 Métodos Espectrales de Colocación	1
1.1 El Problema de Sturm-Liouville	1
1.1.1 Conceptos básicos	1
1.1.2 Problema de Sturm-Liouville	3
1.2 Polinomios Ortogonales y Sturm-Liouville en $(-1, 1)$	5
1.2.1 Polinomios de Legendre	7
1.2.2 Polinomios de Chebyshev	7
1.3 Método Espectral	8
1.3.1 Matriz de diferenciación espectral	9
1.4 Aplicación al Oscilador Cuántico	10
2 El Problema de Sturm-Liouville Fraccionario	13
2.1 Sturm-Liouville Fraccionario	13
2.1.1 Sturm-Liouville Fraccionario de tipo I y II.	14
2.1.2 Método Espectral Fraccionario	16
2.2 Mecánica Cuántica Fraccionaria	18
2.3 Un Método Espectral	23

2.4	Cuadratura y Colocación	24
2.4.1	Cuadratura	25
2.4.2	Nodos de Colocación	26
2.5	Diferenciación Espectral y la Ecuación de Advección	26
2.5.1	Diferenciación Espectral Numérica	27
2.5.2	La Ecuación de Advección Fraccionaria.	31
2.6	Solución Numérica al Problema de Eigenvalores	33
2.6.1	Potencial infinito	33
2.6.2	Oscilador Armónico Fraccionario	34
2.6.3	Oscilador Anarmónico Fraccionario	36
3	Un Problema Inverso de Sturm - Liouville Fraccionario	41
3.1	Preliminares	41
3.1.1	Construcción de la función de Verosimilitud	44
3.1.2	Métodos MCMC	46
3.2	Un Problema Inverso	47
3.3	Solución numérica del Problema Inverso	49
3.3.1	Potencial Infinito	49
3.3.2	Oscilador Armónico Fraccionario	54
3.3.3	Oscilador Anarmónico Fraccionario	56
4	Conclusiones y Trabajo a Futuro	59
	BIBLIOGRAFÍA	61

CAPITULO 1

Métodos Espectrales de Colocación

En este capítulo se presenta una breve introducción a la teoría de **Sturm-Liouville**, como también a los **Métodos Espectrales**, ambos enfoques se consideran en el caso clásico. Estos conceptos son de gran utilidad para el desarrollo de la tesis.

1.1 El Problema de Sturm-Liouville

Esta sección es descriptiva, los detalles técnicos se pueden consultar en [Teschl \(2012\)](#) y [Canuto et al. \(2006\)](#).

1.1.1 Conceptos básicos

Antes de iniciar con la teoría de Sturm-Liouville clásico damos a conocer unos resultados acerca de *Operadores compactos simétricos*.

Definición 1.1

Sea \mathcal{H} un espacio vectorial, un mapeo $\langle \cdot, \cdot \rangle: \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ se llama una **forma sesquilineal** si es **conjugado lineal** en el primer argumento y **lineal** en el segundo, es decir,

$$\begin{aligned}\langle af + bg, h \rangle &= \bar{a}\langle f, h \rangle + \bar{b}\langle g, h \rangle, \\ \langle h, af + bg \rangle &= a\langle h, f \rangle + b\langle h, g \rangle, \quad a, b \in \mathbb{C}.\end{aligned}$$

Además, si satisface

$$\begin{aligned}\langle f, f \rangle &> 0 \quad , \quad f \neq 0, \\ \langle f, g \rangle &= \overline{\langle g, f \rangle},\end{aligned}$$

se llama **producto interior**, y $\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$ es la norma inducida por el producto interior.

Definición 1.2

El par $(\mathcal{H}_0, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ se llama el **espacio de producto interior**. Si \mathcal{H}_0 es completo con respecto a la norma inducida, entonces es un **espacio de Hilbert**.

Definición 1.3

Un **operador lineal** es un mapeo lineal

$$A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}_0$$

donde $\mathcal{D}(A)$ es un subespacio de \mathcal{H}_0 , el cual se llama **dominio** de A .

Definición 1.4

Un operador lineal A se dice **simétrico**, si su dominio es denso y si

$$\langle g, Af \rangle = \langle Ag, f \rangle, \quad f, g \in \mathcal{D}(A) \tag{1.1}$$

Definición 1.5

Un número $\lambda \in \mathbb{C}$ se llama **eigenvalor** de A si hay un vector no cero $u \in \mathcal{D}(A)$ tal que $Au = \lambda u$, donde u se llama el **eigenvector** asociado a λ .

Además, un eigenvalor λ se llama **simple**, si tiene un solo eigenvector u linealmente independiente.

Teorema 1.1

Sea A un operador simétrico, entonces todos los eigenvalores son reales y los eigenvec-tores correspondientes a diferentes eigenvalores son ortogonales.

Definición 1.6

Un operador lineal A definido en $\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}_0$ se llama **compacto**, si para toda sucesión acotada $\{f_n\}$, la sucesión $\{Af_n\}$ tiene una subsucesión convergente.

Teorema 1.2

Todo operador compacto simétrico A tiene un eigenvalor λ_0 que satisface $|\lambda_0| = \|A\|$.

Teorema 1.3 (Teorema espectral para operadores compactos simétricos)

Sea \mathcal{H}_0 un espacio con producto interior y $A : \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_0$ es un operador compacto simétrico, entonces existe una sucesión de eigenvalores reales λ_j que convergen a cero. Los correspondientes eigenvectores normalizados u_j forman un conjunto ortonormal y para cada $f \in \text{Ran}(A) = \{Ag | g \in \mathcal{H}_0\}$ puede escribirse como

$$f = \sum_{j=0}^{\infty} \langle u_j, f \rangle u_j$$

Más aún, si $\text{Ran}(A)$ es denso, entonces los eigenvectores forman una base ortonormal.

1.1.2 Problema de Sturm-Liouville

Consideremos la ecuación diferencial

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d\Psi}{dx} \right) + v(x)\Psi = Ew(x)\Psi, \quad E \in \mathbb{C}, \quad (1.2)$$

donde $w, v \in C^0([a, b], \mathbb{R})$, $p \in C^1([a, b], \mathbb{R})$, $p(x), w(x) > 0 \quad \forall x \in (a, b)$.

Aquí se dice que $v(x)$ es una función potencial y $w(x)$ es una función de peso, además suponemos que p no se anula en $[a, b]$. Este tipo de problema, se le conoce como **problema de Sturm-Liouville**.

Denotamos $C([a, b], \mathbb{C})$ como \mathcal{H}_0 y utilizamos el producto interior

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)^* g(x) w(x) dx. \quad (1.3)$$

Definimos el **Operador de Sturm-Liouville** en \mathcal{H}_0 como

$$\mathcal{L} = -\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} \right) + v(x) \quad (1.4)$$

Observemos que hay funciones en \mathcal{H}_0 que no son diferenciables, por ende no se puede aplicar a cualquier función arbitraria. Para corregir esto elegimos un dominio adecuado, que definimos por

$$\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \{f \in C^2([a, b], \mathbb{C}) \mid BC_a(f) = BC_b(f) = 0\}, \quad (1.5)$$

donde

$$\begin{aligned} BC_a(f) &= \cos(\alpha)f(a) - \operatorname{sen}(\alpha)p(a)f'(a), \\ BC_b(f) &= \cos(\beta)f(b) - \operatorname{sen}(\beta)p(b)f'(b). \end{aligned}$$

Esta elección asegura que (1.5) es un subespacio lineal de \mathcal{H}_0 .

Haciendo uso de (1.4) se tiene que (1.2) se puede reescribir como

$$\mathcal{L}\Psi = Ew(x)\Psi. \quad (1.6)$$

Si (1.6) tiene soluciones no triviales, E se llama un **eigenvalor** para el problema de Sturm-Liouville, y las correspondientes soluciones no triviales son **eigenfunciones**, por ende, (1.6) es un problema de **eigenvalores y eigenfunciones**.

Por otra parte, aplicando la teoría de operadores simétricos compactos, se puede mostrar que el operador \mathcal{L} es simétrico, pero no es compacto. Sin embargo, su inverso es compacto y simétrico, con esto se puede demostrar el siguiente teorema.

Teorema 1.4

El problema de Sturm-Liouville tiene un número contable de eigenvalores discretos y simples E_n , y las correspondientes eigenfunciones normalizadas y_n se pueden elegir real-valoradas y forman una base ortonormal para \mathcal{H}_0 , es decir, para cada $f \in \mathcal{H}_0$ se reescribe como

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle y_n, f \rangle y_n$$

Más aún, para $f \in \mathcal{D}(\mathcal{L})$ la serie es uniformemente convergente.

Para problemas particulares de Sturm-Liouville, su solución está dada por los polinomios ortogonales, el cuál es descrito brevemente a continuación.

1.2 Polinomios Ortogonales y Sturm-Liouville en $(-1, 1)$

La importancia de los problemas de Sturm-Liouville para los métodos espectrales radica en el hecho que la aproximación espectral de la solución de una ecuación diferencial es usualmente considerado como una expansión finita de eigenfunciones de un problema de Sturm-Liouville.

Los problemas Sturm-Liouville de interés en los métodos espectrales son aquellos para los cuales la expansión de una función infinitamente suave en función de sus eigenfunciones garantiza la precisión espectral.

Consideremos el problema de la expansión de una función en términos de un sistema de polinomios ortogonales. Denotemos por \mathbb{P}_N es espacio de todos los polinomios de grado a lo más N . Supongamos que $\{p_k\}_{k=0,1,\dots}$ es un sistema de polinomios algebraicos que son mutuamente ortogonales en $(-1, 1)$ con respecto a la función de peso w , es decir,

$$\int_{-1}^1 p_k(x)p_m(x)w(x) dx = 0, \quad m \neq k. \quad (1.7)$$

El teorema clásico de Weierstrass implica que un sistema es completo en el espacio $L_w^2(-1, 1)$, que es el espacio de funciones v tal que la norma

$$\|v\|_w = \left(\int_{-1}^1 |v(x)|^2 w(x) dx \right)^{1/2} \quad (1.8)$$

es finita. El producto interior asociado es

$$(u, v)_w = \int_{-1}^1 u(x)v(x)w(x) dx. \quad (1.9)$$

La serie formal de una función $u \in L_w^2(-1, 1)$ en términos del sistema $\{p_k\}$ es

$$Su = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k p_k$$

donde los coeficientes de la expansión \hat{u}_k están definidos como

$$\hat{u}_k = \frac{1}{\|p_k\|_w^2} \int_{-1}^1 u(x) p_k(x) w(x) dx. \quad (1.10)$$

La ecuación (1.10) representa la *transformación polinomial de u*.

Para un entero $N > 0$, la serie truncada de u de orden N es el polinomio

$$P_N u = \sum_{k=0}^N \hat{u}_k p_k. \quad (1.11)$$

$\mathbb{P}_N u$ es la proyección ortogonal de u sobre \mathbb{P}_N con el producto interior (1.9). La completez del sistema $\{p_k\}$ es equivalente a la propiedad que, para todo $u \in L_w^2(-1, 1)$,

$$\|u - \mathbb{P}_N u\|_w \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty.$$

Cuadraturas Gaussianas.

Una aplicación de polinomios ortogonales es la aproximación de integrales de la forma

$$\int_{-1}^1 f(x) w(x) dx, \quad f \in C^0([-1, 1]), w(x) > 0.$$

por cuadraturas Gaussianas

$$\sum_{i=1}^m f(x_i) w_i$$

donde x_i, w_i son los nodos y pesos Gaussianos respectivamente.

Los nodos Gaussianos están asociados con la función peso $w(x)$, dependiendo de dicha elección los nodos pueden ser aproximados de las siguientes formas más comunes (ver [Canuto et al. \(2006\)](#)):

- $w(x) = 1$, se tienen los nodos *Gauss Legendre*, *Gauss-Radau Legendre* y *Gauss-Lobatto Legendre* (GLL).
- $w(x) = (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}}$, se tiene los nodos *Gauss Chebyshev*, *Gauss-Radau Chebyshev* y *Gauss-Lobatto Chebyshev*.

1.2.1 Polinomios de Legendre

Los polinomios de Legendre $L_k(x)$, $k = 0, 1, \dots$ son las eigenfunciones del problema singular de Sturm-Liouville

$$((1 - x^2)L'_k(x))' + k(k + 1)L_k(x) = 0 \tag{1.12}$$

que es (1.2) con $p(x) = 1 - x^2$, $v(x) = 0$ y $w(x) = 1$.

La expansión de cualquier $u \in L^2(-1, 1)$ en términos de L_k es

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k L_k(x), \quad \hat{u}_k = (k + \frac{1}{2}) \int_{-1}^1 u(x) L_k(x) dx. \tag{1.13}$$

Ahora consideramos la serie discreta de Legendre. Debido a que no se conocen formas explícitas para los nodos de cuadratura, tales puntos tienen que ser calculados numéricamente como ceros de los polinomios apropiados. Los pesos pueden ser expresados en forma cerrada en términos de los nodos, una forma es

Gauss-Lobatto-Legendre (GLL)

$$x_0 = -1, x_n = 1, x_j (j = 1, \dots, n - 1) \text{ ceros de } L'_n$$

$$w_j = \frac{2}{n(n + 1)[L_n(x_j)]^2}, \quad j = 0, \dots, n.$$

1.2.2 Polinomios de Chebyshev

Los polinomios de Chebyshev del primer tipo, $T_k(x)$, $k = 0, 1, \dots$ son las eigenfunciones del problema singular de Sturm-Liouville

$$(\sqrt{1 - x^2}T'_k(x))' + \frac{k^2}{\sqrt{1 - x^2}}T_k(x) = 0 \tag{1.14}$$

que es (1.2) con $p(x) = \sqrt{1-x^2}$, $v(x) = 0$ y $w(x) = (1-x^2)^{-1/2}$.

La expansión Chebyshev de una función $u \in L_w^2(-1, 1)$ es

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k T_k(x), \quad \hat{u}_k = \frac{2}{\pi c_k} \int_{-1}^1 u(x) T_k(x) w(x) dx, \quad (1.15)$$

donde $c_0 = 2$ y $c_k = 1$ para $k \geq 1$.

Para este caso, tanto los puntos de cuadratura como los pesos son dados de diferentes formas, una de particular interés es

Gauss-Lobatto-Chebyshev (GLC)

$$x_j = \cos\left(\frac{\pi j}{n}\right)$$

$$w_j = \begin{cases} \frac{\pi}{2n} & j = 0 \\ \frac{\pi}{n} & j = 1, \dots, n-1 \end{cases}$$

1.3 Método Espectral

En los métodos espectrales se buscan soluciones aproximadas $\Psi(x)$ a una ecuación o un sistema de ecuaciones diferenciales en términos de series (truncadas) de funciones ortogonales ϕ_k que forman una base ortogonal, la cual es representada como

$$\Psi(x) = \sum_{j=0}^n a_j \phi_j(x) \quad (1.16)$$

donde las incógnitas son los coeficientes a_j .

La forma de calcular estos coeficientes dan lugar a diferentes métodos espectrales, los más conocidos son los **Métodos de colocación**, **Galerkin** y **Tau** (ver [Canuto et al. \(2006\)](#)).

En nuestro caso nos interesa el **Método de colocación**, en donde queremos aprox-

imar la solución $\Psi(x)$ como

$$\Psi(x) = \sum_{j=0}^n \Psi(x_j) l_j(x) \quad (1.17)$$

donde $\phi_j(x) = l_j(x)$ son los polinomios de Lagrange y el conjunto $\{x_j\}$ son los nodos de colocación, en nuestro caso solo consideramos los siguientes

1. **Gauss-Lobatto-Legendre** (GLL)

$$\begin{aligned} x_0 = -1, x_n = 1, x_j (j = 1, \dots, n-1) & \text{ceros de } L'_n \\ w_j &= \frac{2}{n(n+1)[L_n(x_j)]^2}, \quad j = 0, \dots, n. \end{aligned} \quad (1.18)$$

2. **Gauss-Lobatto-Chebyshev** (GLC)

$$\begin{aligned} x_j &= \cos\left(\frac{\pi j}{n}\right) \\ w_j &= \begin{cases} \frac{\pi}{2n} & j = 0 \\ \frac{\pi}{n} & j = 1, \dots, n-1 \end{cases} \end{aligned} \quad (1.19)$$

1.3.1 Matriz de diferenciación espectral

Un problema en análisis numérico es la aproximación de la derivada de una función $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$, una alternativa consiste en aproximar la primera derivada de la función f con la primera derivada del **polinomio interpolante de Lagrange** definido por

$$p(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x) \quad (1.20)$$

evaluado en un conjunto de nodos $\{x_j\}_{j=0}^n$, los cuales no necesariamente tienen que estar uniformemente distribuidos.

Particularmente para $[a, b] = [-1, 1]$, considerando el polinomio interpolante de Lagrange en los nodos GLL o GLC, se define **la derivada pseudo-spectral** de $f \in C^0([-1, 1])$ como

$$D_n f(x) = p(x)', \quad n \geq 1. \quad (1.21)$$

De (1.20) obtenemos

$$(D_n f)(x_i) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l'_j(x_i), \quad i = 0, \dots, n. \quad (1.22)$$

Así que la derivada pseudo-espectral en los nodos de interpolación puede ser calculada conociendo solo los valores nodales de f y de l'_j . Considerando $D_{ij} = l'_j(x_i)$, entonces reescribimos (1.22) como

$$D_n f(x_i) = \sum_{j=0}^n f(x_j) D_{ij}, \quad i = 0, \dots, n \quad (1.23)$$

Definimos la **matriz de diferenciación espectral** $D = [D_{ij}] \in M_{n+1, n+1}(\mathbb{R})$ con entradas D_{ij} .

La relación (1.23) muestra que $\mathbf{f}' = D\mathbf{f}$, y en consecuencia $\mathbf{f}'' = D^2\mathbf{f}$

1.4 Aplicación al Oscilador Cuántico

Ahora bien, nos interesa resolver el problema cuando $p(x) = 1$, $v(x) = x^2$ y $w(x) = 1$, es decir, queremos resolver

$$\begin{aligned} -\Psi''(x) + x^2\Psi(x) &= \lambda\Psi(x), \quad x \in [-1, 1] \\ \Psi(-1) = \Psi(1) &= 0 \end{aligned} \quad (1.24)$$

Este problema primeramente lo resolvemos haciendo uso de **Diferencias Finitas** (DF) usando una discretización fina y cuya solución consideraremos como nuestra verdad. Posteriormente aplicamos el **Método de Colocación** (MC) dado por (1.17). Aquí $\{x_j\}$ son los nodos **Gauss-Lobatto-Legendre** (GLL), los cuales están dados por

$$\begin{aligned} x_0 = -1, x_n = 1, x_j (j = 1, \dots, n-1) \\ w_j = \frac{2}{n(n+1)} \frac{1}{(L_n(x_j))^2} \end{aligned}$$

donde, x_j son los ceros de L'_n y w_j son los pesos respectivos.

En nuestro caso, aplicando las condiciones de frontera a (1.17) se tiene que

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^{n-1} \Psi(x_j) l_j(x). \quad (1.25)$$

Evaluando (1.24) en los nodos y aproximando las derivadas con las derivadas pseudo espectrales se obtiene un sistema lineal dado por

$$A\vec{\Psi} = \lambda\vec{\Psi}, \quad A \in M_{n-1, n-1}(\mathbb{R}), \quad \vec{\Psi} \in \mathbb{R}^{n-1} \quad (1.26)$$

aquí $A = -D^2 + \text{diag}(\vec{x})$ y D es la matriz de diferenciación espectral con respecto a los nodos GLL.

En la Figura (1.1) se muestra la aproximación numérica para la eigenfunción Ψ_7 obtenida con DF y MC respectivamente, k indica el número de nodos de GLL.

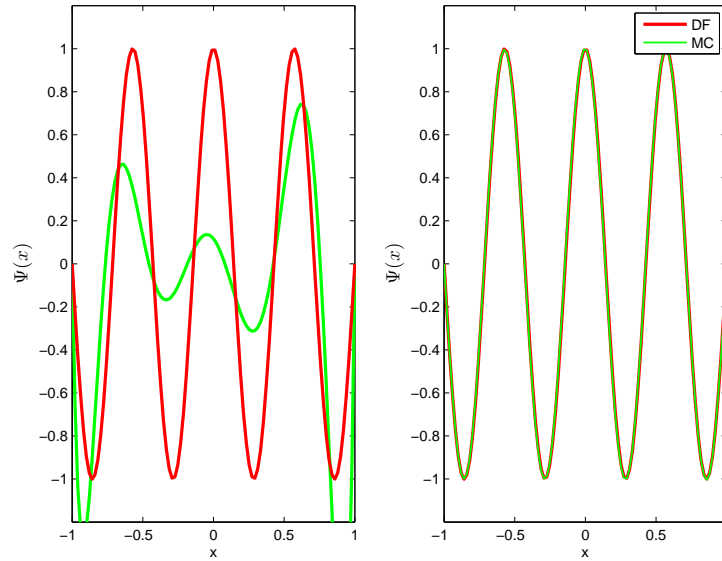


Figura 1.1: Comparación de las soluciones numéricas para Ψ_7 obtenidas con DF y MC, para $k = 8$ (izquierda) y $k = 16$ (derecha).

En la Tabla (1.1) se muestra los resultados obtenidos para distintas eigenfunciones.

No. Eigenfunción	DF	MC (No. nodos k)	Errel (DF-MC)
1	100	4	0.046269077720
3	100	8	0.040818197852
7	100	16	0.017774717849

Tabla 1.1: Comparación entre DF-MC para distintas eigenfunciones.

De la Tabla (1.1), observamos que el MC nos proporciona una buena aproximación numérica para las distintas eigenfunciones Ψ_{n-1} haciendo uso de pocos nodos del tipo GLL, por este hecho, podemos concluir que el MC es una buena propuesta para resolver numéricamente problemas del tipo Sturm-Liouville Regular.

CAPITULO 2

El Problema de Sturm-Liouville Fraccionario

En este capítulo se presenta el **problema de Sturm- Liouville Fraccionario** como también un **Método Espectral Fraccionario**. Este tipo de problemas ha sido abordado por diversos autores. Además damos a conocer un problema de Sturm-Liouville que surge de manera natural en mecánica cuántica fraccionaria con derivada en el sentido de Riesz.

2.1 Sturm-Liouville Fraccionario

Damos unas definiciones preliminares del cálculo fraccionario [Podlubny \(1999\)](#). Las integrales de **Riemann-Liouville** derecha e izquierda de orden μ , con $\mu \in (0, 1)$ están definidas como

$$({}^{RL}\mathcal{I}_{x_L}^\mu f) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} \int_{x_L}^x \frac{f(s)}{(x-s)^{1-\mu}} ds, \quad x > x_L \quad (2.1)$$

$$({}^{RL}\mathcal{I}_{x_R}^\mu f) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} \int_x^{x_R} \frac{f(s)}{(s-x)^{1-\mu}} ds, \quad x < x_R \quad (2.2)$$

donde Γ representa la función Gamma de Euler. Las correspondientes derivadas fraccionarias de orden μ están basadas en (2.1) y (2.2), definidas por

$$\begin{aligned}
({}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu f)(x) &= \frac{d}{dx}({}^{RL}\mathcal{I}_x^{1-\mu} f)(x) & (2.3) \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dx} \int_{x_L}^x \frac{f(s)}{(x-s)^\mu} ds, \quad x > x_L
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
({}^{RL}\mathcal{D}_{x_R}^\mu f)(x) &= \frac{-d}{dx}({}^{RL}\mathcal{I}_{x_R}^{1-\mu} f)(x) & (2.4) \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{-d}{dx} \int_x^{x_R} \frac{f(s)}{(s-x)^\mu} ds, \quad x < x_R
\end{aligned}$$

Además, se tienen las derivadas izquierda-derecha de **Caputo** de orden $\mu \in (0, 1)$, dadas por

$$\begin{aligned}
({}^C\mathcal{D}_x^\mu f)(x) &= \left({}^{RL}\mathcal{I}_x^{1-\mu} \frac{df}{dx} \right) (x) & (2.5) \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_{x_L}^x \frac{f'(s)}{(x-s)^\mu} ds, \quad x > x_L
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
({}^C\mathcal{D}_{x_R}^\mu f)(x) &= \left({}^{RL}\mathcal{I}_{x_R}^{1-\mu} \frac{-df}{dx} \right) (x) & (2.6) \\
&= \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_x^{x_R} \frac{-f'(s)}{(x-s)^\mu} ds, \quad x > x_L
\end{aligned}$$

Las derivadas del tipo de Riemann-Liouville y Caputo están relacionadas a través de

$$({}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu f)(x) = \frac{f(x_L)}{\Gamma(1-\mu)(x-x_L)^\mu} + ({}^C\mathcal{D}_x^\mu f)(x) \quad (2.7)$$

$$({}^{RL}\mathcal{D}_{x_R}^\mu f)(x) = \frac{f(x_R)}{\Gamma(1-\mu)(x_R-x)^\mu} + ({}^C\mathcal{D}_{x_R}^\mu f)(x) \quad (2.8)$$

2.1.1 Sturm-Liouville Fraccionario de tipo I y II.

En [Zayernouri and Karniadakis \(2013\)](#) se resuelve el problema de Sturm-Liouville Fraccionario (SLF) dado por

$${}^{RL}\mathcal{D}^\mu [p_i(x) {}^C\mathcal{D}^\mu \Psi_\lambda^{(i)}(x)] + q_i(x) \Psi_\lambda^{(i)}(x) + \lambda w_i(x) \Psi_\lambda^{(i)}(x) = 0 \quad (2.9)$$

$$x \in [x_L, x_R], \quad \mu \in (0, 1)$$

Con condiciones de frontera

$$\begin{aligned} a_1 \Psi_\lambda^{(i)}(x_L) + a_2 {}^{RL}\mathcal{I}^{1-\mu} [p_i(x) {}^C\mathcal{D}^\mu \Psi_\lambda^{(i)}(x)]|_{x=x_L} &= 0, \\ b_1 \Psi_\lambda^{(i)}(x_R) + b_2 {}^{RL}\mathcal{I}^{1-\mu} [p_i(x) {}^C\mathcal{D}^\mu \Psi_\lambda^{(i)}(x)]|_{x=x_R} &= 0, \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde $a_1^2 + a_2^2 \neq 0, b_1^2 + b_2^2 \neq 0, p_i(x) \neq 0, w_i(x) > 0$ es la función de peso, $q_i(x)$ es la función potencial, también son funciones continuas real valuadas en $[x_L, x_R]$.

1. Para $i = 1$ se tiene SLF de tipo I con

$${}^{RL}\mathcal{D}^\mu \equiv {}^{RL}\mathcal{D}_{x_R}^\mu, \quad {}^C\mathcal{D}^\mu \equiv {}^C\mathcal{D}_{x_L}^\mu, \quad {}^{RL}\mathcal{I}^{1-\mu} \equiv {}^{RL}\mathcal{I}_{x_R}^{1-\mu}$$

2. Para $i = 2$ se tiene SLF de tipo II con

$${}^{RL}\mathcal{D}^\mu \equiv {}^{RL}\mathcal{D}_{x_L}^\mu, \quad {}^C\mathcal{D}^\mu \equiv {}^C\mathcal{D}_{x_R}^\mu, \quad {}^{RL}\mathcal{I}^{1-\mu} \equiv {}^{RL}\mathcal{I}_{x_L}^{1-\mu}$$

Considerando (2.9) junto con (2.10) cuando $q_i = 0, p_i = \mathcal{K}$ constante, donde se tiene el **operador fraccional de Sturm-Liouville** $\mathcal{L}_i^\mu := {}^{RL}\mathcal{D}^\mu [\mathcal{K} {}^C\mathcal{D}^\mu]$, $i = 1, 2$, cuyas soluciones están dadas por

$$\Psi_n^{(1)}(x) = (1+x)^\mu P_{n-1}^{-\mu, \mu}(x), \quad (2.11)$$

$$\Psi_n^{(2)}(x) = (1-x)^\mu P_{n-1}^{\mu, -\mu}(x), \quad (2.12)$$

y

$$\lambda_n^1 = \lambda_n^2 = -\frac{\mathcal{K}\Gamma(n+\mu)}{\Gamma(n-\mu)}, \quad \forall n \geq 1. \quad (2.13)$$

donde $P_{n-1}^{-\mu, \mu}(x)$ es el polinomio de Jacobi. Por otra parte, (2.11) y (2.12) son llamados **polifracctonomios de Jacobi** de orden $n + \mu$.

En las figuras (2.1), (2.2) mostramos los polifracctonomios de Jacobi $\Psi_8^{(1)}$ y $\Psi_8^{(2)}$ para diferentes valores de μ en el intervalo $(-1, 1)$.

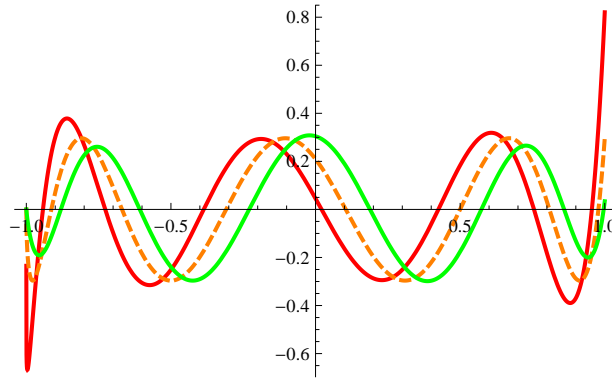


Figura 2.1: Polifracctonomio de Jacobi $\Psi_8^{(1)}$, para $\mu = 0.1$ (línea sólida-rojo), $\mu = 0.5$ (línea punteada) y $\mu = 0.9$ (línea sólida-verde).

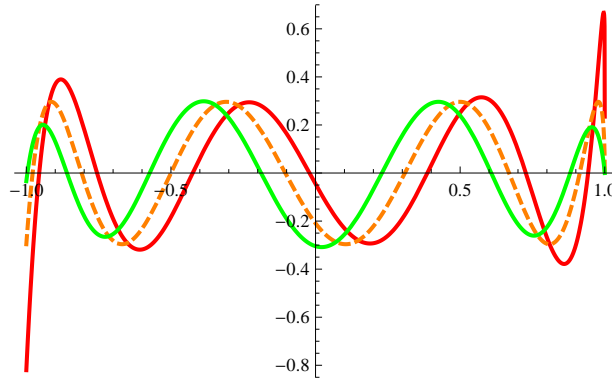


Figura 2.2: Polifracctonomio de Jacobi $\Psi_8^{(2)}$, para $\mu = 0.1$ (línea sólida-rojo), $\mu = 0.5$ (línea punteada) y $\mu = 0.9$ (línea sólida-verde).

2.1.2 Método Espectral Fraccionario

En [Zayernouri and Karniadakis \(2014\)](#), se propone un Método de Espectral basado en un Método de Colocación el cual está definido por :

$$\Psi_N(x) = \sum_{j=1}^N \Psi(x_j) h_j^\mu(x) \tag{2.14}$$

donde $h_j^\mu(x)$ es el **Interpolante fraccionario de Lagrange** y está definido como

$$h_j^\mu(x) = \left(\frac{x - x_1}{x_j - x_1} \right)^\mu \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \left(\frac{x - x_k}{x_j - x_k} \right), \quad 2 \leq j \leq N, \quad \mu \in (0, 1). \tag{2.15}$$

En la Figuras 2.3 y 2.4 , se muestra algunos polinomios interpolantes fraccionarios de Lagrange en el intervalo $[-1, 1]$, con $N = 5$ y los puntos $\mathbf{x} = [-0.7, -0.5, 0, 0.5, 0.7]$.

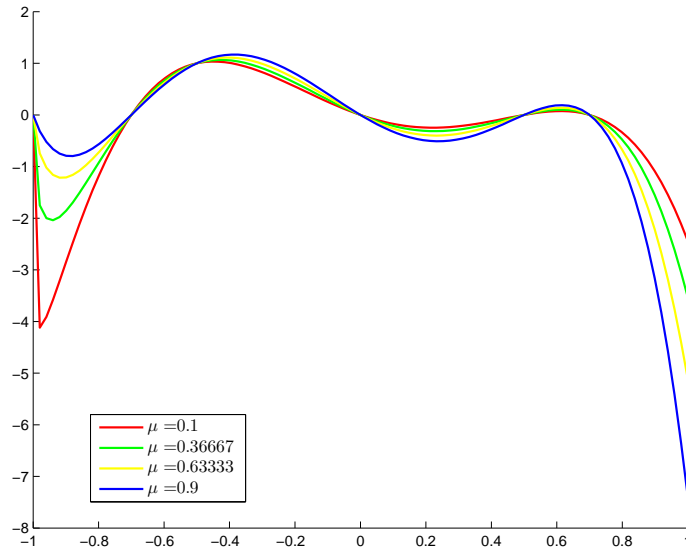


Figura 2.3: *Interpolantes Fraccionario de Lagrange* $h_2^\mu(x)$ para distintos valores de μ .

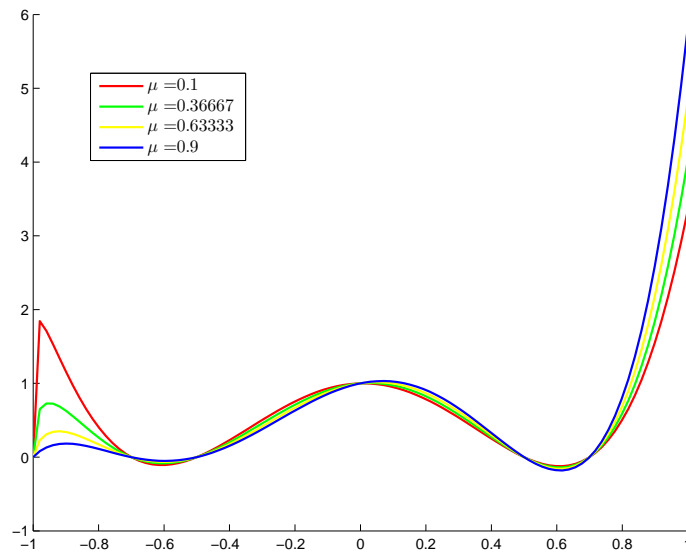


Figura 2.4: *Interpolantes Fraccionario de Lagrange* $h_3^\mu(x)$ para distintos valores de μ .

2.2 Mecánica Cuántica Fraccionaria

Los resultados siguientes y las pruebas respectivas se pueden encontrar en [Helgason \(1999\)](#).

Definición 2.1 (Transformada de Fourier)

$$\hat{f}(k) \equiv \mathcal{F}(f)(k) = \int_{\mathbb{R}^d} \exp(-ik \cdot x) f(x) dx,$$

con inversa

$$\mathcal{F}^{-1}(F)(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp(ik \cdot x) F(k) dk.$$

Para $s \geq 0$ el espacio de Sobolev $H^s(\mathbb{R}^d) \equiv H^s$ se define como

$$H^s = \{f \in L^2 : \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^s |\hat{f}(k)|^2 dk < +\infty\}.$$

Sea \mathcal{S} y \mathcal{S}' los espacios de funciones y distribuciones *temperadas* respectivamente. Para el caso $s < 0$, el espacio de Sobolev se define como

$$H^s = \{f \in \mathcal{S}' : \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^s |\hat{f}(k)|^2 dk < +\infty\}.$$

Por medio de la Transformada de Fourier, el **operador Laplaciano Fraccionario** $(-\Delta)^s$ está definido para $f \in H^s$ dado por

$$(-\Delta)^s f = \mathcal{F}^{-1} [|k|^{2s} \mathcal{F}(f)].$$

Para el caso \mathbb{R} ($d = 1$) damos la siguiente definición:

Definición 2.2 (Potencial de Riesz)

$$I^\gamma(f)(x) = \frac{1}{H_1(\gamma)} \int_{\mathbb{R}} f(s) |x - s|^{\gamma-1} ds \quad (2.16)$$

con

$$H_1(\gamma) = 2^\gamma \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{\gamma}{2})}{\Gamma(\frac{1-\gamma}{2})}, \quad \gamma - 1 \notin 2\mathbb{Z}^+$$

Proposición 2.1 (Laplaciano Fraccionario)

Si $f \in S(\mathbb{R})$ entonces $\gamma \mapsto (I^\gamma f)(x)$ se extiende a una función holomorfa en el conjunto $\mathbb{C}_d = \{\gamma \in \mathbb{C} : \gamma - 1 \notin 2\mathbb{Z}^+\}$. También

$$I^0 f = \lim_{\alpha \rightarrow 0} I^\alpha f = f \quad (2.17)$$

y además

$$I^\gamma \Delta f = \Delta I^\gamma f = -I^{\gamma-2} f. \quad (2.18)$$

En términos del Potencial de Riesz, el Laplaciano Fraccionario es expresado de la forma

$$(-\Delta)^s f = I^{-2s} f. \quad (2.19)$$

Sea $\Omega = (-r, r)$. Consideremos la **Función Potencial** $V(x)$ infinito en $\bar{\Omega}^c$ y suficientemente suave en Ω .

El **Problema de Eigenvalores** de interés es propuesto por [Laskin \(2002\)](#) el cuál surge de manera natural en mecánica cuántica fraccionaria, definido por,

$$\begin{aligned} (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) &= E\Psi(x), & x \in (-r, r), \\ \Psi(-r) &= \Psi(r) = 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde Ψ es la función de onda, E el nivel de energía.

Consideramos dos casos:

$$\alpha = \mu, \quad \mu \in (0, 1) \quad (2.21)$$

$$\alpha = 1 + \mu, \quad \alpha \in (1, 2), \mu \in (0, 1) \quad (2.22)$$

Como se vio anteriormente, se tienen dos casos para el problema de eigenvalores (2.20). A continuación mostramos unos resultados previos que nos serán de utilidad para demostrar nuestros resultados obtenidos.

De Press et al. (2007) se tiene el siguiente lema.

Lema 2.1

Si el integrando diverge como $(x - a)^{-\gamma}$ con $\gamma \in (0, 1)$ cerca $x=a$, entonces

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{1 - \gamma} \int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a)dt. \quad (2.23)$$

Si el integrando diverge como $(b - x)^{-\gamma}$ con $\gamma \in (0, 1)$ cerca $x=b$, entonces

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{1 - \gamma} \int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f(b - t^{\frac{1}{1-\gamma}})dt. \quad (2.24)$$

Se obtienen los siguientes resultados

Proposición 2.2

Sea $\mu \in (0, 1)$ donde $(x - s)^{-\mu}$ diverge cerca de $s = x$, entonces

$${}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x) = \frac{1}{\Gamma(1 - \mu)} \left(\Psi(-r)(x + r)^{-\mu} + \frac{1}{1 - \mu} \int_0^{(x+r)^{1-\mu}} \Psi'(x - t^{\frac{1}{1-\mu}})dt \right). \quad (2.25)$$

Proposición 2.3

Sea $\mu \in (0, 1)$ donde $(s - x)^{-\mu}$ diverge cerca de $s = x$, entonces

$${}_x^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) = \frac{1}{\Gamma(1 - \mu)} \left(\Psi(r)(r - x)^{-\mu} - \frac{1}{1 - \mu} \int_0^{(r-x)^{1-\mu}} \Psi'(t^{\frac{1}{1-\mu}} + x)dt \right). \quad (2.26)$$

Resolvemos el problema (2.20) en la forma equivalente según el siguiente resultado:

Teorema 2.1

1. Si $\alpha \in (0, 1)$, entonces (2.20) es equivalente a

$$a_\mu \left[{}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x) + {}_x^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) \right] + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad x \in (-r, r) \quad (2.27)$$

$$\Psi(-r) = \Psi(r) = 0,$$

$$\text{donde } a_\mu = \frac{(\mu - 1)\Gamma(1 - \mu)}{H_1(2 - \mu)}, \quad H_1(2 - \mu) = 2^{2-\mu} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{2-\mu}{2})}{\Gamma(\frac{\mu-1}{2})}$$

2. Si $\alpha \in (1, 2)$, entonces (2.20) es equivalente a

$$a_\mu \left[\frac{d}{dx} {}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) - \frac{d}{dx} {}_x^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) \right] + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad x \in (-r, r) \quad (2.28)$$

$$\Psi(-r) = \Psi(r) = 0,$$

$$\text{donde } a_\mu = \frac{\Gamma(1 - \mu)}{H_1(1 - \mu)}, \quad H_1(1 - \mu) = 2^{1-\mu} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{1-\mu}{2})}{\Gamma(\frac{\mu}{2})}.$$

Dem.

Solo probaremos el caso para $\alpha \in (0, 1)$ (el caso $\alpha \in (1, 2)$ es análogo).

Solo nos enfocamos en analizar $(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}\Psi(x)$.

$$(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}\Psi(x) = I^{-\mu}\Psi(x) \quad \text{Por (2.19)}$$

$$= -\Delta I^{2-\mu}\Psi(x) \quad \text{Por (2.18)}$$

$$= -\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} I^{2-\mu}\Psi(x) \right)$$

Aplicando (2.16) a la expresión anterior

$$-\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} I^{2-\mu}\Psi(x) \right) = -\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{H_1(2 - \mu)} \int \Psi(s) |x - s|^{1-\mu} ds \right] \right)$$

Pero, $\int \Psi(s)|x-s|^{1-\mu}ds = \int_{-r}^x \Psi(s)(x-s)^{1-\mu}ds + \int_x^r \Psi(s)(s-x)^{1-\mu}ds$, en consecuencia

$$\begin{aligned}
 (-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}\Psi(x) &= -\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{H_1(2-\mu)} \overbrace{\frac{d}{dx} \int_{-r}^x \Psi(s)(x-s)^{1-\mu}ds}^{a_1} \right) \\
 &\quad -\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{H_1(2-\mu)} \overbrace{\frac{d}{dx} \int_x^r \Psi(s)(s-x)^{1-\mu}ds}^{a_2} \right) \quad (2.29)
 \end{aligned}$$

Sin embargo, a_1 y a_2 tienen la forma

$$\begin{aligned}
 a_1 &= (1-\mu) \int_{-r}^x (x-s)^{-\mu}\Psi(s)ds \\
 a_2 &= -(1-\mu) \int_x^r (s-x)^{-\mu}\Psi(s)ds
 \end{aligned}$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en (2.29) obtenemos

$$\begin{aligned}
 (-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}\Psi(x) &= \frac{d}{dx} \left(\frac{(1-\mu)}{H_1(2-\mu)} \int_x^r \frac{\Psi(s)}{(s-x)^\mu}ds \right) \\
 &\quad - \frac{d}{dx} \left(\frac{(1-\mu)}{H_1(2-\mu)} \int_{-r}^x \frac{\Psi(s)}{(x-s)^\mu}ds \right)
 \end{aligned}$$

Multiplicando y dividiendo por $\Gamma(1-\mu)$ el lado derecho de la expresión, y haciendo

$$a_\mu = \frac{\Gamma(1-\mu)(\mu-1)}{H_1(2-\mu)}$$

$$= a_\mu \left(\frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dx} \int_{-r}^x \frac{\Psi(s)}{(x-s)^\mu}ds - \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \frac{d}{dx} \int_x^r \frac{\Psi(s)}{(s-x)^\mu}ds \right)$$

De (2.3) y (2.4) obtenemos finalmente

$$(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}\Psi(x) = a_\mu \left({}^{RL}\mathcal{D}_{-r}^\mu\Psi(x) + {}^{RL}\mathcal{D}_r^\mu\Psi(x) \right) \quad (2.30)$$

□

2.3 Un Método Espectral

El Teorema 2.1, nos proporciona una forma de como resolver la ecuación de Schrödinger fraccionaria restringido a un dominio acotado con la derivada en el sentido de Riesz. Para resolver este nuevo problema, desarrollamos un Método Espectral Fraccionario basado en un Método de Colocación.

Caso $\alpha \in (0, 1)$

Resolvemos (2.27) haciendo uso del método de colocación dado por (2.14). Al aplicar las condiciones de frontera se tiene

$$\Psi_N(x) = \sum_{j=2}^{N-1} \Psi(x_j) h_j^\mu(x) \quad (2.31)$$

donde $h_j^\mu(x)$ es el interpolante fraccionario de Lagrange definido por (2.15).

Consideremos $-r = x_1 < x_2 < \dots < x_N = r$ como los nodos de colocación, entonces al sustituir (2.31) en (2.27) y evaluando en estos nodos obtenemos

$$\begin{aligned} a_\mu \left[\sum_{j=2}^{N-1} {}^x RL \mathcal{D}_r^\mu h_j^\mu(x) \Psi(x_j) \right]_{x_i} + \\ a_\mu \left[\sum_{j=2}^{N-1} {}^{-r} RL \mathcal{D}_x^\mu h_j^\mu(x) \Psi(x_j) \right]_{x_i} + \\ \sum_{j=2}^{N-1} V(x_i) h_j^\mu(x_i) \Psi(x_j) = E \sum_{j=2}^{N-1} h_j^\mu(x_i) \Psi(x_j) \end{aligned} \quad (2.32)$$

para $i = 2, \dots, N-1$.

Sea

$$\begin{aligned} A^\mu &= (A_{ij}), & A_{ij} &= {}^{-r} RL \mathcal{D}_x^\mu h_j^\mu(x)|_{x_i} \\ B^\mu &= (B_{ij}), & B_{ij} &= {}^x RL \mathcal{D}_r^\mu h_j^\mu(x)|_{x_i} \\ C^\mu &= (C_{ij}), & C_{ij} &= \text{diag}(V(x_i) h_i^\mu(x_i)) = \text{diag}(V(x_i)) \end{aligned}$$

Entonces (2.32) se convierte en

$$a_\mu \left(A^\mu \vec{\Psi} + B^\mu \vec{\Psi} \right) + C^\mu \vec{\Psi} = E \vec{\Psi} \quad (2.33)$$

Sea $F^\mu = a_\mu(A^\mu + B^\mu) + C^\mu$.

Por tanto se tiene el problema de Eigenvalores y Eigenfunciones a resolver

$$F^\mu \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}, \quad (2.34)$$

donde F^μ es una matriz de tamaño $(N - 2) \times (N - 2)$.

Caso $\alpha \in (1, 2)$

Prosiguiendo de forma análoga como en el caso anterior, se tiene que (2.28) puede ser transformado en el problema de Eigenvalores y Eigenfunciones siguiente

$$F^\mu \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}, \quad (2.35)$$

donde $F^\mu = a_\mu(B^\mu - A^\mu) + C^\mu$ matriz de tamaño $(N - 2) \times (N - 2)$, con

$$\begin{aligned} A^\mu &= (A_{ij}), & A_{ij} &= \frac{d}{dx} {}^{RL}\mathcal{D}_x^{\mu-r} h_j^\mu(x)|_{x_i} \\ B^\mu &= (B_{ij}), & B_{ij} &= \frac{d}{dx} {}^{RL}\mathcal{D}_r^\mu h_j^\mu(x)|_{x_i} \\ C^\mu &= (C_{ij}), & C_{ij} &= \text{diag}(V(x_i)h_i^\mu(x_i)) = \text{diag}(V(x_i)) \end{aligned}$$

En ambos casos, ${}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x)$ y ${}^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x)$ están dados por (2.25) y (2.26) respectivamente.

Hasta este punto, solo se ha dado la forma teórica de como resolver nuestro problema, sin embargo dar una forma analítica es sumamente complicado, ahora bien lo que prosigue es como hacerlo numéricamente lo cuál se explica en la siguiente sección.

2.4 Cuadratura y Colocación

En esta sección, damos las pautas de como aproximar numéricamente las diversas expresiones que se han encontrado y con esto dar una solución numérica al problema de

eigenvalores (2.34) y (2.35).

2.4.1 Cuadratura

Observemos que para aproximar numéricamente (2.34) y (2.35) es necesario aproximar (2.25) y (2.26).

Consideremos

$${}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left(\Psi(-r)(x+r)^{-\mu} + \frac{1}{1-\mu} \underbrace{\int_0^{(x+r)^{1-\mu}} \Psi'(x-t^{\frac{1}{1-\mu}}) dt}_{b_1} \right).$$

y

$${}_x^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left(\Psi(r)(r-x)^{-\mu} - \frac{1}{1-\mu} \underbrace{\int_0^{(r-x)^{1-\mu}} \Psi'(t^{\frac{1}{1-\mu}} + x) dt}_{b_2} \right).$$

Observemos que solo es necesario saber como aproximar b_1 y b_2 . Lo cuál detallamos a continuación:

- Aproximamos $\Psi'(x-t^{\frac{1}{1-\mu}})$ y $\Psi'(t^{\frac{1}{1-\mu}}+x)$ con diferencias centradas.
- Para aproximar las integrales b_1 y b_2 hacemos uso de la cuadratura de Gauss, para esto hacemos uso de la función predeterminada de MATLAB R2014a *gaussquad*(n, a, b) que integra de a a b con n puntos de Gauss que es exacto para polinomios de grado $n-1$ o menos.

Para poder tener una buena aproximación de la integral dada por b_1 y b_2 depende donde se encuentre el valor α , al realizar varias pruebas numéricas se obtuvo lo siguiente:

- Si $\alpha \in (0, 1)$ se tiene una buena aproximación de las integrales b_1, b_2 con $n \geq 72$.
- Si $\alpha \in (1, 2)$ se tiene una buena aproximación de las integrales b_1, b_2 con $n \geq 44$.

2.4.2 Nodos de Colocación

Los nodos de colocación implementados son los Nodos Gauss-Lobato-Legendre, como en el caso de cuadratura también depende del valor de α . De nuestra exploración numérica se obtuvo lo siguiente: Para $\alpha \in (0, 1)$ se tiene buena aproximación con $N \geq 18$ nodos y para el caso $\alpha \in (1, 2)$ con $N \geq 34$ nodos.

Observación: Hasta el momento no hay una manera sistemática de elegir los nodos, no hay resultados teóricos que la indiquen. Se procede de manera comparativa para dicha elección. Dicha comparación se hizo entre los nodos Equidistantes, Chebyshev y GLL, donde los nodos GLL son los que mejor se ajustan para resolver nuestro problema.

2.5 Diferenciación Espectral y la Ecuación de Advección

Antes de continuar en resolver nuestro problema de Eigenvalores y Eigenfunciones, primero hacemos unas aplicaciones, las cuales incluyen derivadas fraccionarias de funciones de las que se conocen solución analítica, como también resolvemos la ecuación de advección para el caso fraccionario. Para esto implementamos de forma numérica (2.25) y (2.26) con las especificaciones hechas en la sección anterior. Para la solución de la ecuación de Advección usamos otro tipo de nodos de colocación.

2.5.1 Diferenciación Espectral Numérica

Monomio de la forma $f(x) = (x + r)^m$

Para este caso, podemos dar explícitamente ${}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu(x + r)^m$, la cual está dado por¹

$${}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu(x + r)^m = \frac{\Gamma(m + 1)}{\Gamma(m - \mu + 1)}(x + r)^{m-\mu}. \quad (2.36)$$

En consecuencia

$$\frac{d}{dx} {}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu(x + r)^m = \frac{(m - \mu)\Gamma(m + 1)}{\Gamma(m - \mu + 1)}(x + r)^{m-\mu-1}, \quad (2.37)$$

donde $x \in [-r, r]$ y $m > -1$.

En las Figuras (2.5), (2.7) mostramos los resultados numéricos, haciendo uso de $r = 2$, $m = 5.3$, como también los errores relativos entre la solución analítica y la aproximación numérica (ver Fig.(2.6) y (2.8)) para ambos casos respectivamente.

¹Se usa

$$\int_a^b (x - a)^p (b - x)^q dx = \frac{\Gamma(p + 1)\Gamma(q + 1)}{\Gamma(p + q + 2)}(b - a)^{p+q+1}, \quad b > a, p > -1, q > -1$$

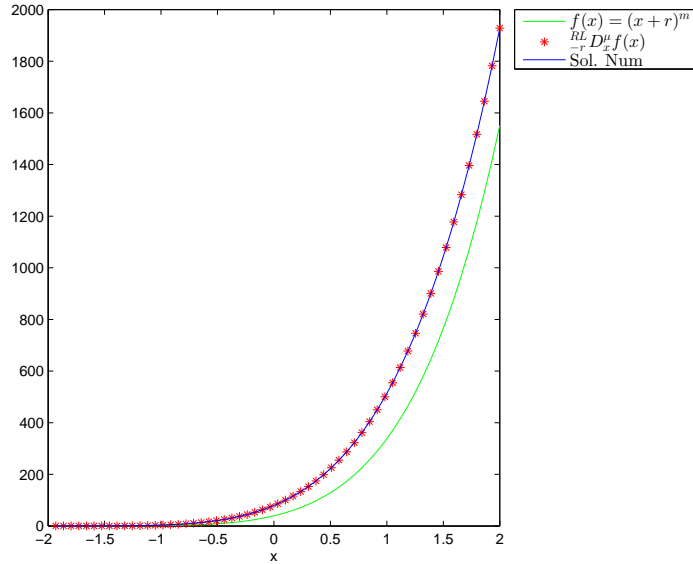


Figura 2.5: Aproximación a la Derivada de Riemann-Liouville Izquierda para $f(x)$ con $m = 5.3$ y $\mu = 0.5$

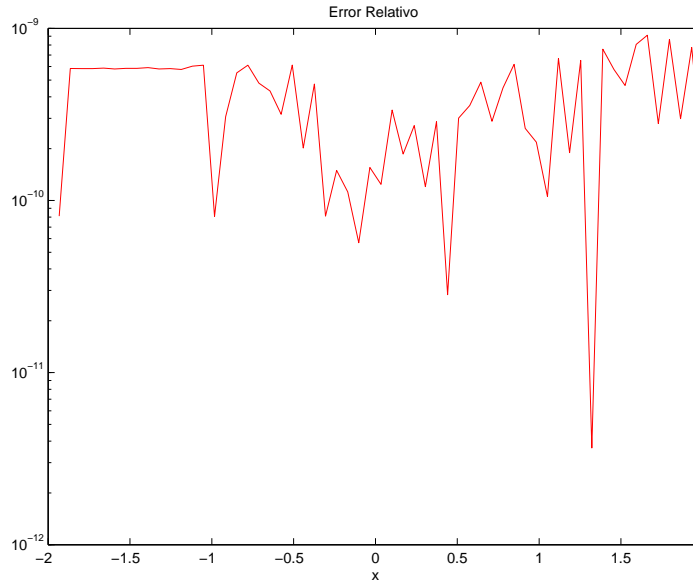


Figura 2.6: Error Relativo entre la Solución Numérica vs la DRLI analítica.

Monomio de la forma $f(x) = (r - x)^m$

Para este caso, obtenemos que

$${}_x^{RL} \mathcal{D}_r^\mu (r - x)^m = \frac{\Gamma(m + 1)}{\Gamma(m - \mu + 1)} (r - x)^{m-\mu} \tag{2.38}$$

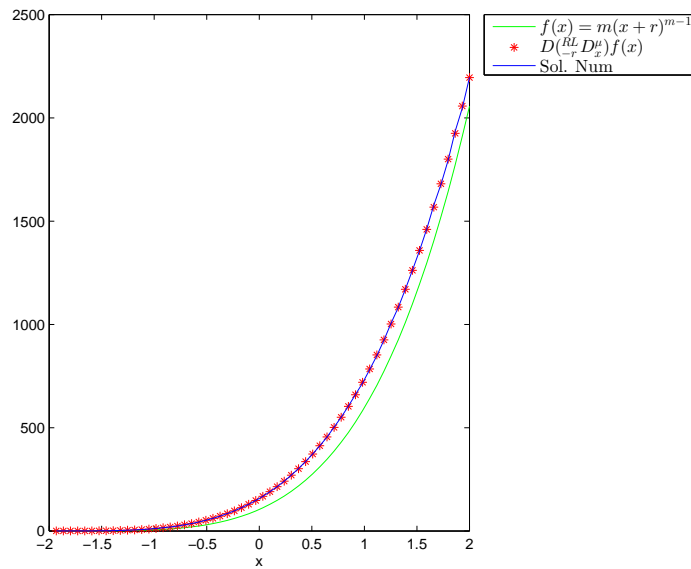


Figura 2.7: Aproximación a la Derivada de Riemann-Liouville Izquierda para $\frac{d}{dx}f(x)$ con $m = 5.3$ y $\mu = 0.5$

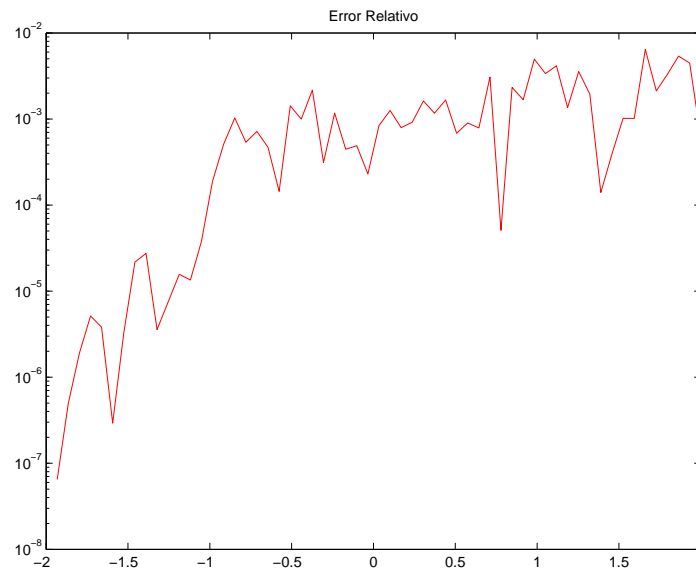


Figura 2.8: Error Relativo entre la Solución Numérica vs la DRLI analítica.

De forma análoga, como en el caso anterior mostramos los resultados numéricos como también el error relativo ver Fig. (2.9), (2.10)

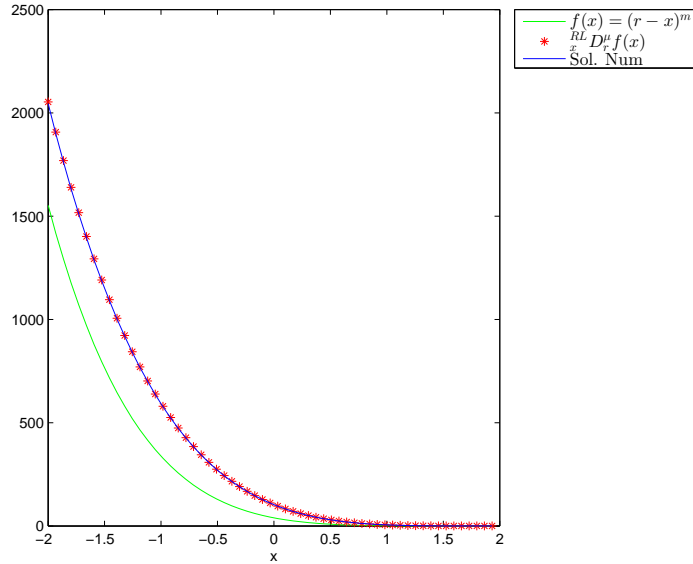


Figura 2.9: Aproximación a la Derivada de Riemann-Liouville Derecha para $f(x)$ con $m = 5.3$ y $\mu = 0.5$

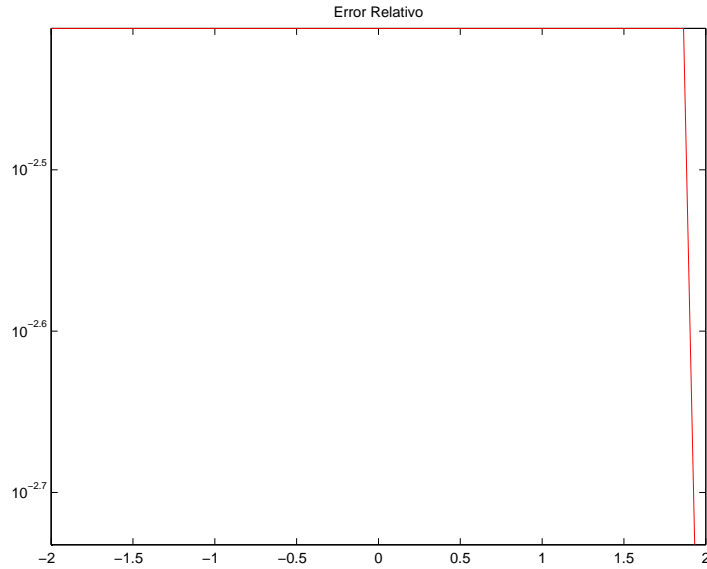


Figura 2.10: Error Relativo entre la Solución Numérica vs la DRLD analítica.

Polifracctonomio de Jacobi $f_n^\mu(x) = (1+x)^\mu P_{n-1}^{-\mu, \mu}(x)$

De [Zayernouri and Karniadakis \(2014\)](#) se tiene que la Derivada de Riemann-Liouville Izquierda es de la forma

$${}_{-1}^{RL} \mathcal{D}_x^\mu f_n^\mu(x) = \frac{\Gamma(n+\mu)}{\Gamma(n)} P_{n-1}(x) \tag{2.39}$$

donde $P_{n-1}(x)$ es el polinomio de Legendre de grado $n-1$.

En este caso consideramos $n = 4$ y $\mu = 0.5$, En la Fig. (2.11),(2.12) mostramos la aproximación numérica y el error relativo respectivamente.

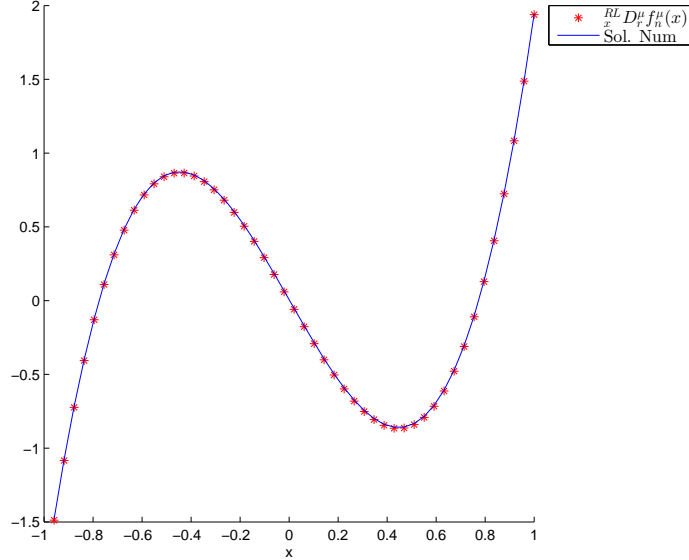


Figura 2.11: Aproximación a la Derivada de Riemann-Liouville Izquierda para $f_n^\mu(x)$ para $n = 4$ y $\mu = 0.5$

2.5.2 La Ecuación de Advección Fraccionaria.

De [Zayernouri and Karniadakis \(2014\)](#) consideramos la forma más simple de una Ecuación Diferencial Ordinaria de orden Fraccionario en estado estacionario, que es la ecuación de advección en el espacio fraccionario de orden $\mu \in (0, 1)$ definida por

$$\begin{aligned} {}_{-r}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x) &= f(x), \quad x \in [-r, r] \\ \Psi(-r) &= 0, \quad \mu \in (0, 1) \end{aligned} \tag{2.40}$$

Si consideramos $f(x) = \frac{\Gamma(7 + \frac{9}{17})}{\Gamma(7 + \frac{9}{17} - \mu)}(r + x)^{6 + \frac{9}{17} - \mu}$, entonces la solución analítica a (2.40) esta dada por $\Psi(x) = (r + x)^{6 + \frac{9}{17}}$.

En las Figuras (2.13), y (2.14) se muestran los resultados numéricos.

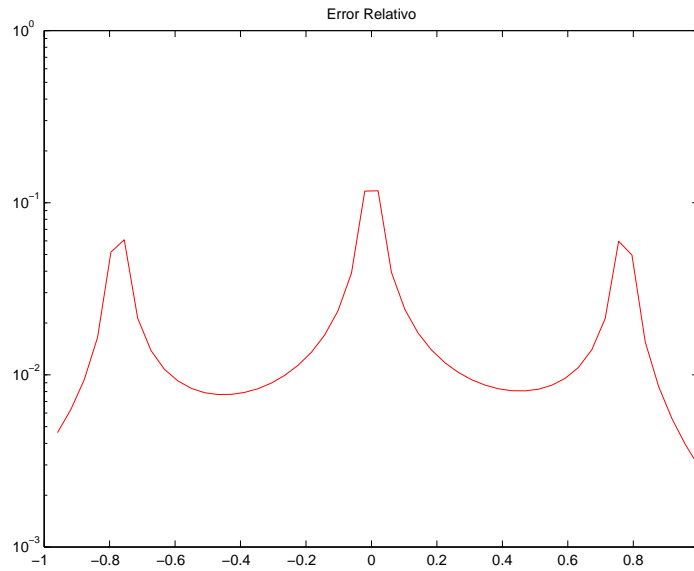


Figura 2.12: Error Relativo entre la Solución Numérica vs la DRLI analítica.

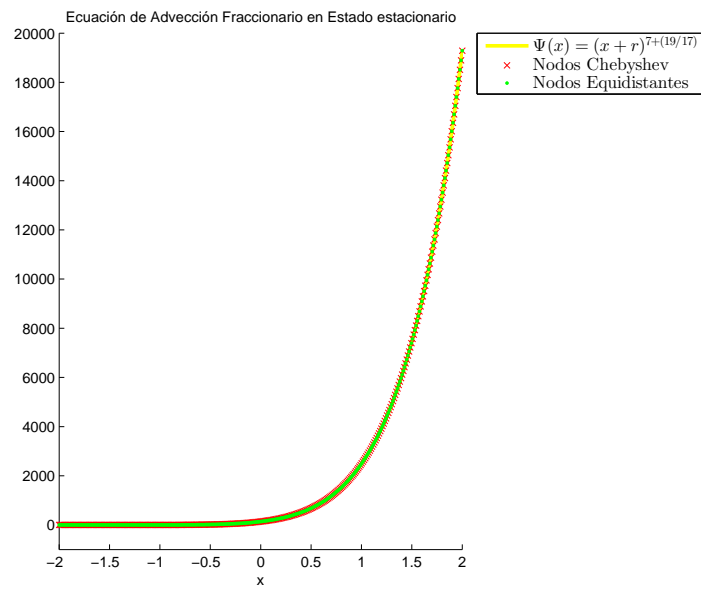


Figura 2.13: Aproximación numérica a la Ecuación de Advección Fraccionaria (2.40) vs la solución analítica $\Psi(x)$ para $\mu = 0.5$

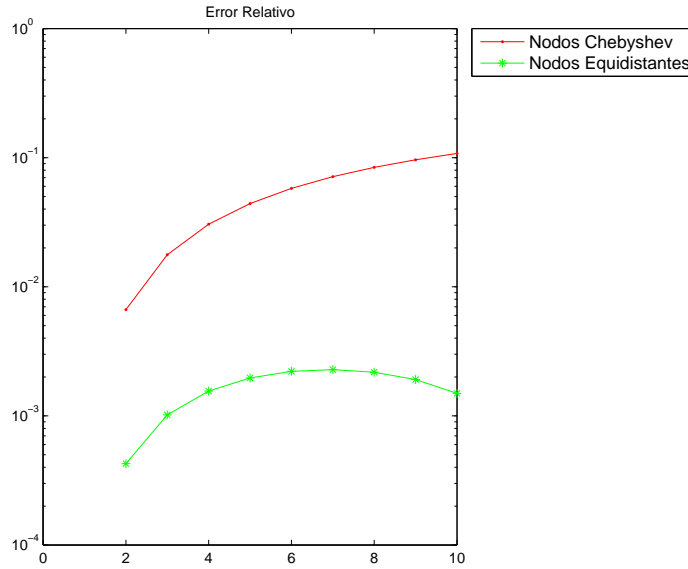


Figura 2.14: Error Relativo entre la Solución Numérica vs la solución analítica para la Ecuación de Advención Fraccionaria.

2.6 Solución Numérica al Problema de Eigenvalores

En esta sección resolvemos nuestros problemas de eigenvalores (2.34) y (2.35), para tres tipos diferentes de potenciales.

2.6.1 Potencial infinito

Sea $I = [-r, r]$. En este caso

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , x \in I \\ \infty & , \text{ en otro caso} \end{cases} \quad (2.41)$$

Resolvemos el problema de Eigenvalores y Eigenfunciones dado por (2.34) y (2.35) con $r = 1$ haciendo uso de los nodos GLL.

Aproximamos los primeros 10 eigenvalores. En la Tabla (2.1) mostramos los resultados obtenidos con el método propuesto. Estos valores se encuentran entre las cotas reportadas en Kwaśnicki (2012).

Algunas eigenfunciones correspondientes se muestran en la Fig.(2.15).

α	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
0.01	0.9967	1.0088	1.0138	1.0173	1.020	1.022	1.024	1.025	1.026	1.027
0.1	0.9732	1.0926	1.1479	1.1874	1.217	1.242	1.263	1.281	1.297	1.311
0.2	0.9585	1.1976	1.3203	1.4117	1.483	1.543	1.595	1.641	1.683	1.721
0.5	0.9722	1.6046	2.0328	2.3916	2.700	2.978	3.232	3.467	3.687	3.898
1.5	1.5974	5.0620	9.6027	15.0301	21.205	28.056	35.514	43.538	52.088	61.136
1.8	2.0490	7.5057	15.8059	26.7339	40.132	55.887	73.921	94.155	116.542	141.014
1.9	2.2455	8.5935	18.7258	32.4915	49.727	70.606	94.502	122.054	152.588	186.473
1.99	2.4428	9.7324	21.8269	38.7027	60.369	86.844	117.956	153.764	194.352	239.904

Tabla 2.1: Potencial infinito

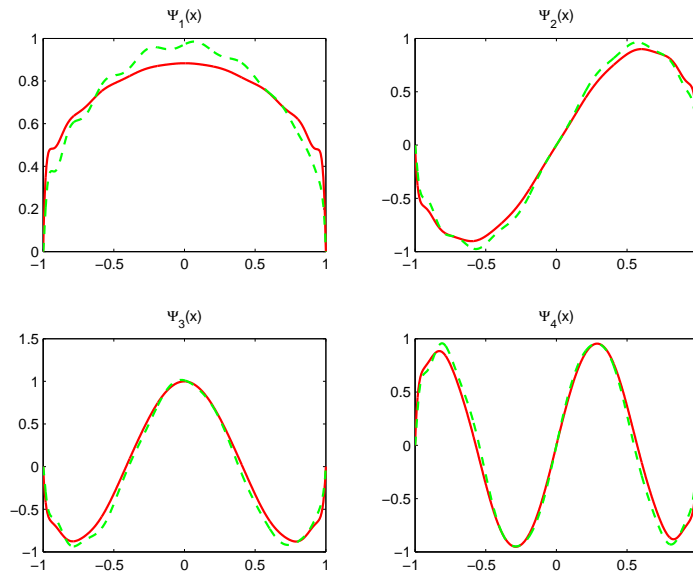


Figura 2.15: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el potencial infinito. $\alpha = 0.01$ (línea sólida), $\alpha = 0.5$ (línea punteada).

2.6.2 Oscilador Armónico Fraccionario

Sea $V(x) = x^2$ el potencial cuadrático con $x \in [-r, r]$.

Haciendo uso de este potencial, resolvemos (2.34) y (2.35) con $r = 5.5$ haciendo uso de los nodos GLL.

Aproximamos los primeros 10 eigenvalores. En la Tabla (2.2) mostramos los resultados obtenidos con el método propuesto.

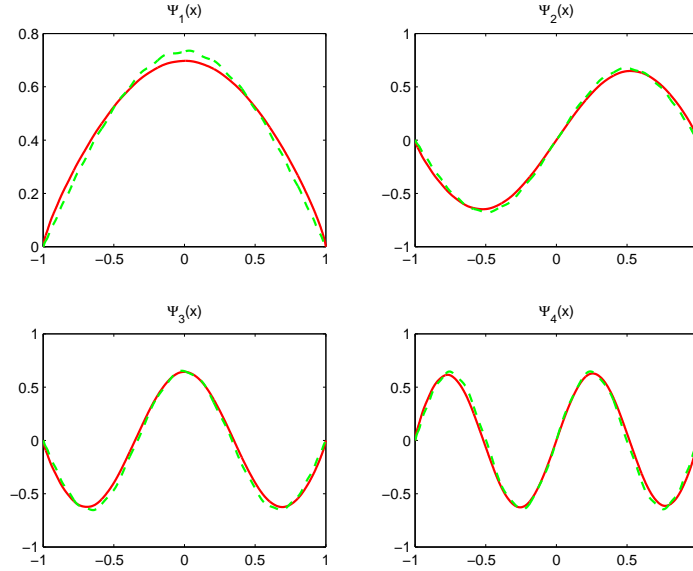


Figura 2.16: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el potencial infinito. $\alpha = 1.5$ (línea sólida), $\alpha = 1.9$ (línea punteada).

De [Laskin \(2002\)](#) se tienen los estimadores WKB dados por

$$E_n^{WKB} = \left[\frac{\pi}{B(1/2, 1/\alpha + 1)} \left(n - \frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{2\alpha}{2+\alpha}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

donde $B(\cdot, \cdot)$ es la función beta. Por otra parte, en la Tabla (2.3) mostramos el error relativo entre el método de colocación y el método asintótico WKB para $\alpha = 1.5$. Las eigenfunciones se muestran en las Figuras (2.17) y (2.18).

α	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
0.01	1.0021	1.8661	1.8704	4.3663	4.368	8.213	8.215	12.969	12.970	18.089
0.1	1.0181	1.8802	1.9121	4.3890	4.406	8.246	8.257	13.014	13.021	18.151
0.2	1.0296	1.9214	1.9609	4.4285	4.455	8.295	8.311	13.076	13.087	18.234
0.5	1.0349	2.1211	2.1870	4.6262	4.646	8.516	8.530	13.347	13.355	18.582
1.5	0.9997	2.7113	4.1811	5.5902	6.923	8.229	9.492	10.745	11.906	13.239
1.8	0.9960	2.8877	4.6837	6.4462	8.175	9.890	11.585	13.268	14.937	16.600
1.9	1.0025	2.9503	4.8451	6.7273	8.591	10.446	12.292	14.131	15.964	17.794
1.99	1.0191	3.0156	5.0034	6.9924	8.964	10.927	12.917	14.916	16.915	18.926

Tabla 2.2: Potencial cuadrático

α	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
1.5	0.9997	2.7113	4.1811	5.5902	6.923	8.229	9.492	10.745	11.906	13.239
Error Rel. WKB	0.0509	0.0038	0.0009	0.0011	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.007

Tabla 2.3: Método de Colocación vs WKB

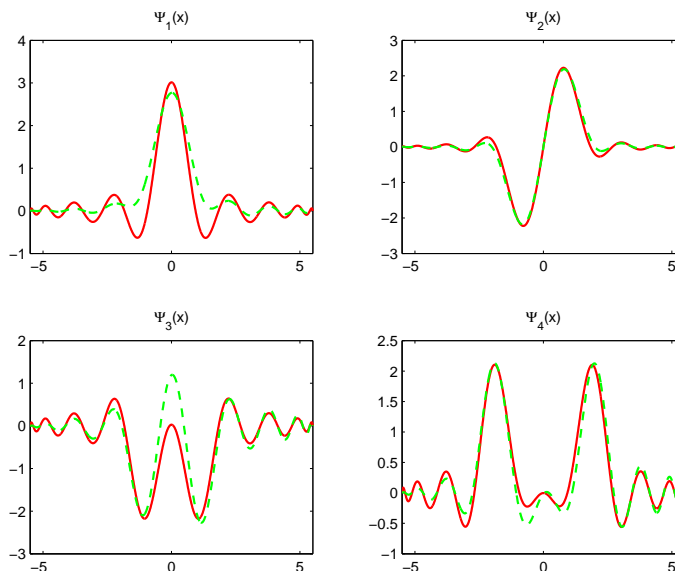


Figura 2.17: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el oscilador armónico. $\alpha = 0.01$ (línea sólida), $\alpha = 0.5$ (línea punteada).

2.6.3 Oscilador Anarmónico Fraccionario

Sea $V(x) = x^4$ con $x \in [-r, r]$.

Para este potencial, resolvemos (2.34) y (2.35) con $r = 3$ haciendo uso de los nodos GLL.

Aproximamos los primeros 10 eigenvalores. En la Tabla (2.4) mostramos los resultados obtenidos con el método propuesto.

Para $\alpha = 4/3$ se conoce una buena aproximación para los eigenvalores que está dada por el método asintótico WKB:

$$E_n^{WKB} = \frac{2\pi}{\Gamma(1/4)\Gamma(7/4)} \left(n - \frac{1}{2} \right), \quad n = 1, 2, \dots$$

donde $\Gamma(\cdot)$ es la función gamma. Por otra parte, en la Tabla (2.5) mostramos el error

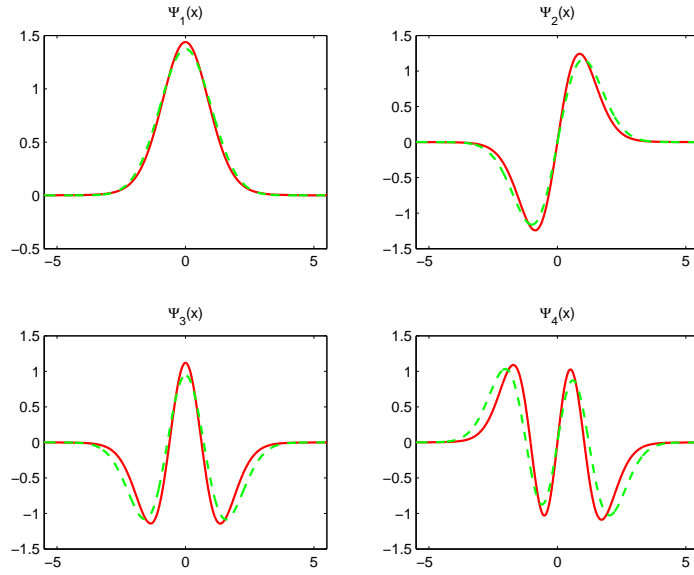


Figura 2.18: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el oscilador armónico. $\alpha = 1.5$ (línea sólida), $\alpha = 1.9$ (línea punteada).

relativo, entre el método de colocación y los estimadores WKB, como también contra el método CVRFB propuesto en Guerrero and Moreles (2014) para $\alpha = 4/3$. Las eigenfunciones se muestran en las Figuras (2.19) y (2.20).

α	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
0.01	1.0072	1.0736	1.0770	2.0099	2.012	5.611	5.613	13.682	13.683	26.846
0.1	1.0188	1.1765	1.2024	2.0948	2.110	5.703	5.714	13.786	13.794	26.968
0.2	1.0101	1.2952	1.3920	2.2201	2.239	5.829	5.846	13.928	13.940	27.133
0.5	0.9852	1.6846	2.1204	2.8062	2.844	6.394	6.407	14.552	14.563	27.872
4/3	0.9972	2.8198	4.7086	6.6091	8.480	10.373	12.253	14.140	16.027	17.910
1.5	1.0108	3.0604	5.3362	7.7131	10.139	12.625	15.143	17.705	20.292	22.911
1.8	1.0387	3.5001	6.5704	9.9649	13.600	17.445	21.458	25.627	29.933	34.366
1.99	1.0720	3.7893	7.4147	11.5676	16.142	21.037	26.216	31.717	37.503	43.562

Tabla 2.4: Potencial anarmónico

α	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
4/3	0.9972	2.8198	4.7086	6.6091	8.4802	10.3731	12.2534	14.1395	16.0273	17.9100
Error Rel. WKB	0.0577	0.0031	0.0012	0.0014	0.0006	0.0002	0.0003	0.0002	0.0000	0.0002
Error Rel. CVRBF	0.0025	0.0002	0.0004	0.0010	0.0001	0.0004	0.0004	0.0002	0.0007	0.0004

Tabla 2.5: Error relativo entre MC vs WKB y MC vs CVRBF

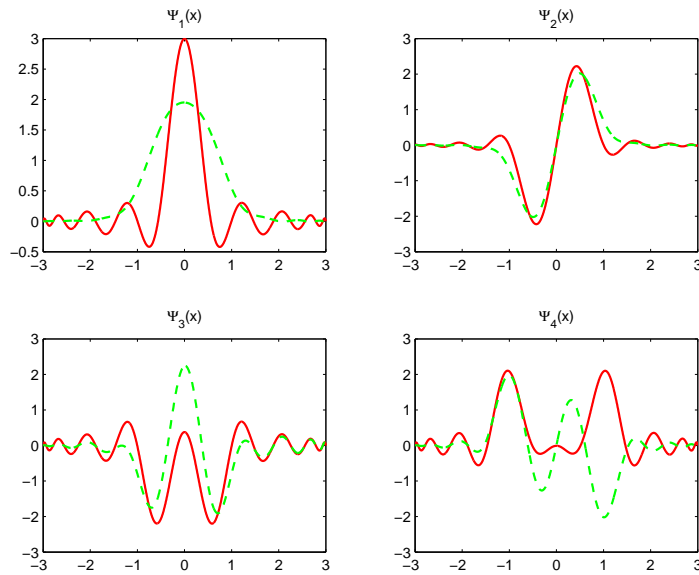


Figura 2.19: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el oscilador anarmónico. $\alpha = 0.01$ (línea sólida), $\alpha = 0.5$ (línea punteada).

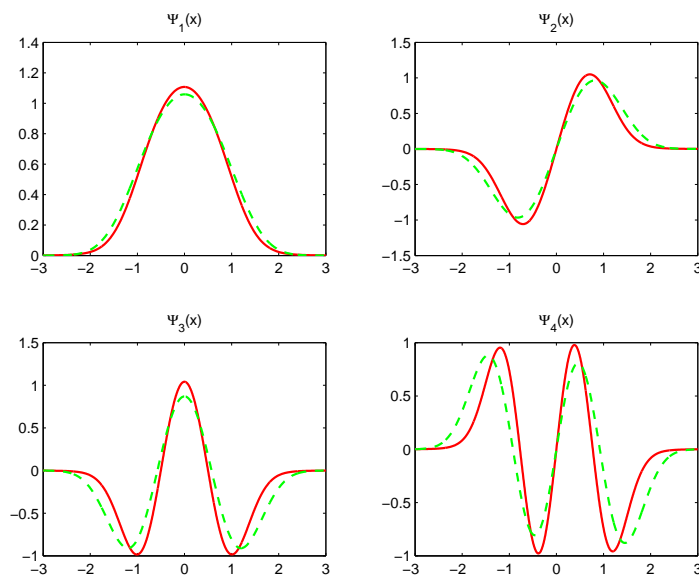


Figura 2.20: Primeras eigenfunciones $\Psi_i(x)$, $i = 1, \dots, 4$, para el oscilador anarmónico. $\alpha = 4/3$ (línea sólida), $\alpha = 1.9$ (línea punteada).

CAPITULO 3

Un Problema Inverso de Sturm - Liouville Fraccionario

En este capítulo, se expone y resuelve un problema inverso de Sturm-Liouville fraccionario, donde la Derivada Fraccionaria es en el sentido de Riesz. En este caso, se hace la estimación del parámetro α , donde para su solución recurrimos a la teoría de Estadística Bayesiana.

3.1 Preliminares

El procedimiento científico para el estudio de un sistema físico puede ser dividido en los siguientes tres pasos.

1. *Parametrización del sistema:* Encontrar un conjunto mínimo de *parámetros del modelo* cuyos valores caractericen completamente al sistema (de un punto de vista dado).
2. *Modelo directo:* Proponer *Leyes Físicas* que nos permitan asignar valores a los parámetros del modelo para hacer predicciones sobre los resultados de mediciones de *parámetros observables*.
3. *Modelo Inverso:* Usar los resultados actuales de las mediciones de los parámetros observables para inferir los valores actuales de los parámetros del modelo.

Mientras los primeros dos pasos son principalmente inductivos, el tercer paso es deductivo.

Supongamos que estamos midiendo una cantidad $y \in \mathbb{R}^m$ (datos) con el fin de obtener información acerca de otra cantidad $x \in \mathbb{R}^n$. Con el fin de relacionar estas dos cantidades, necesitamos un modelo para su dependencia. Este modelo puede ser inexacto y puede contener parámetros que no conocemos, además que la cantidad y siempre contiene ruido.

En problemas inversos, típicamente escribimos un modelo de la forma

$$y = f(x) \tag{3.1}$$

donde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ es la función modelo y $x \in \mathbb{R}^n$ es un vector que contiene todos los parámetros desconocidos y y es un vector con los datos observables.

Los problemas inversos en Estadística, todos los parámetros son vistos como variables aleatorias, entonces, el modelo (3.1) conduce a la relación

$$Y = f(X) \tag{3.2}$$

Hay una relación entre las variables aleatorias X, Y , y consecuentemente sus distribuciones de probabilidad depende una de otra.

Por otra parte, llamamos directamente a la **variable aleatoria observable** Y como la *medición*, y su realización $Y = y$ en el actual proceso de medición de los datos. La **variable aleatoria no observable** X que es de principal interés es llamado el *parámetro o parámetros desconocidos*.

Supongamos que antes de realizar la medición Y , tenemos alguna información acerca de la variable X . En la teoría Bayesiana, se supone que esta información puede ser codificada dentro de una densidad de probabilidad $x \mapsto \pi_{pr}(x)$ llamada la **densidad a priori**.

A continuación damos unas definiciones que nos serán de ayuda.

Definición 3.1

Supongamos que $\pi(x, y)$ es la **densidad de probabilidad conjunta** de X, Y , entonces la **densidad marginal de X** es

$$\int_{\mathbb{R}^m} \pi(x, y) dy = \pi_{pr}(x). \quad (3.3)$$

Definición 3.2

Supongamos que conocemos el valor del parámetro desconocido, es decir, $X = x$, entonces la **densidad de probabilidad condicional de Y dada esta información** es

$$\pi(y | x) = \frac{\pi(x, y)}{\pi_{pr}(x)}, \text{ si } \pi_{pr}(x) \neq 0. \quad (3.4)$$

La probabilidad condicional de Y es llamada la **función de verosimilitud**.

En el marco Bayesiano, el problema inverso es expresado de la siguiente manera: **Dados los datos $Y = y$, encontramos la distribución de probabilidad condicional $\pi(x | y)$ de la variable X .**

Definición 3.3

Supongamos que los datos de medida $Y = y$ es dado, entonces la **distribución de probabilidad condicional o distribución posterior de X** es

$$\pi(x | y) = \frac{\pi(x, y)}{\pi(y)}, \text{ si } \pi(y) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(x, y) dx \neq 0. \quad (3.5)$$

Resumiendo todo lo anterior, tenemos el siguiente teorema que es fundamental para esta teoría.

Teorema 3.1 (Teorema de Bayes para problemas inversos)

Supongamos que la variable aleatoria $X \in \mathbb{R}^n$ tiene una distribución a priori conocida $\pi_{pr}(x)$ y los datos consiste de los valores observados y de una variable aleatoria observable $Y \in \mathbb{R}^k$ tal que $\pi(y) > 0$. Entonces la distribución posterior de X dados los datos

y es

$$\pi_{post}(x) = \pi(x | y) = \frac{\pi_{pr}(x)\pi(y | x)}{\pi(y)} \quad (3.6)$$

donde $\pi(y)$ está dado por

$$\pi(y) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(x, y)dx = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(y | x)\pi_{pr}(x)dx$$

la cual juega el papel de una constante de normalización y usualmente de poca importancia.

Resumiendo, observando la fórmula de Bayes (3.6), podemos decir que resolver un problema inverso puede ser partido en tres subtareas:

1. Basado en toda la información anterior de la variable desconocida X , encontramos una distribución *a priori* que refleja juiciosamente la información anterior.
2. Encontramos la función de verosimilitud $\pi(y|x)$ que describe la interrelación entre lo observado y lo desconocido.
3. Desarrollar métodos para explorar la distribución posterior.

Cabe mencionar, que cada uno de estos pasos pueden ser problemas de gran reto para nosotros.

3.1.1 Construcción de la función de Verosimilitud

La construcción de la función de verosimilitud es a menudo la parte más fácil en la inversión estadística. En este caso, solo consideramos que nuestro modelo tiene un ruido aditivo.

Ruido Aditivo

Típicamente en problemas inversos, el ruido es modelado como aditivo y mutuamente independiente de la variable aleatoria X , aunque esto no es necesariamente cierto.

Con los métodos de regularización clásicos, la independencia mutua es usualmente implícita.

Para el caso aditivo, consideremos el modelo

$$Y = f(X) + E^1 \quad (3.7)$$

donde $X \in \mathbb{R}^n$ es el vector de parámetros desconocidos, $Y, E \in \mathbb{R}^m$ son los vectores de los datos y el error respectivamente, además X y E son mutuamente independientes.

Supongamos que la distribución de probabilidad del ruido E es conocida

$$\mu_E(B) = P\{E \in B\} = \int_B \pi_{noise}(e) de$$

donde B es nuestro conjunto de interés.

Si fijamos $X = x$ y suponemos la mutua independencia de X con E , aseguramos que la densidad de probabilidad de E es la misma. Por tanto, se tiene que Y condicionada a $X = x$ se distribuye como E , es decir, la función de verosimilitud es

$$\pi(y | x) = \pi_{noise}(y - f(x))$$

En consecuencia por (3.6) se obtiene

$$\pi(x | y) \propto \pi_{pr}(x) \pi_{noise}(y - f(x)) \quad (3.8)$$

Estimadores

Como se vio anteriormente la solución de un problema inverso fue definido por la distribución posterior. Sin embargo, al conocer esta distribución, uno puede calcular diferentes *estimaciones puntuales*. Un estimador puntual, responde a preguntas del tipo *Dados los datos y y la información a priori, cuál es el valor más probable de la*

¹No hay que confundir con la E presentada en el capítulo anterior que representa el nivel de energía.

variable aleatoria desconocida X ?.

Uno de los estimadores estadísticos más populares es el estimador *maximum a posteriori* (MAP). Dada la distribución posterior $\pi_{post}(x)$ de la variable aleatoria desconocida X , el MAP satisface

$$x_{MAP} = \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi_{post}(x) \quad (3.9)$$

siempre que exista tal maximizador. Observemos, y cuando éste existe, puede no ser único.

Otro estimador común es el *conditional mean* (CM), el cual está definido como

$$x_{CM} = \mathbb{E}\{x | y\} = \int_{\mathbb{R}^n} x \pi_{post}(x) dx \quad (3.10)$$

siempre y cuando la integral converja.

3.1.2 Métodos MCMC

Como se menciono anteriormente, para resolver un problema inverso un punto importante es tener métodos para poder muestrear nuestra distribución posterior, a estos métodos se les conoce como *Métodos Markov Chain Monte Carlo* (MCMC). Los más comunes son los métodos: Metropolis Hastings (MH), Rechazo Retardado (DR por sus siglas en ingles), Metropolis Adaptativo (AM).

El método AM tiene por objeto adaptar la distribución propuesta basada en la historia pasada de la cadena, es decir, dada una a priori inicial está se modifica de acuerdo a la historia pasada de la cadena para una adaptación global.

El método DR hace una adaptación local, únicamente sobre la base de propuestas rechazadas en cada paso de tiempo, con el objetivo de mejorar la eficiencia de los estimadores MCMC.

Otro método MCMC es DRAM (combinación de los dos anteriores). DRAM resulta ser un método confiable de muestreo. Una versión robusta está implementada en MatlabR2014a. La implementación del método directo de valores propios se ha hecho en MatlabR2014a. Por tanto hemos usado DRAM para el muestreo de la distribución posterior.

Para más detalles acerca de DRAM puede consultar [Haario et al. \(2006\)](#).

Autocorrelación

De la teoría de Cadenas de Markov, se espera que nuestras cadenas eventualmente converjan a la distribución estacionaria, que es también nuestra distribución objetivo.

Una forma de evaluar la convergencia es evaluar la autocorrelación entre el muestreo y nuestra cadena de Markov.

Definición 3.4

El retraso k de autocorrelación ρ_k , es la correlación entre cada muestreo y su k -ésimo retraso dado por

$$\rho_k = \frac{\sum_{i=1}^{n-k} (x_i - \bar{x})(x_{i+k} - \bar{x})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (3.11)$$

Esperaríamos que la k -ésima autocorrelación debe ser más pequeña conforme k crece. Si la autocorrelación es todavía relativamente grande para valores muy grandes de k , esto indica un alto grado de correlación entre nuestras muestras.

3.2 Un Problema Inverso

En esta sección expondremos un problema inverso de Sturm-Liouville fraccionario.

Consideremos el problema directo cuando $\alpha = 1 + \mu$, $\mu \in (0, 1)$

$$\begin{aligned}
 a_\mu \left[\frac{d}{dx} {}^{RL}\mathcal{D}_r^\mu \Psi(x) - \frac{d}{dx} {}^{RL}\mathcal{D}_x^\mu \Psi(x) \right] + V(x)\Psi(x) &= E\Psi(x), \quad x \in (-r, r) \quad (3.12) \\
 \Psi(-r) = \Psi(r) &= 0, \\
 \text{donde } a_\mu &= \frac{\Gamma(1-\mu)}{H_1(1-\mu)}, \quad H_1(1-\mu) = 2^{1-\mu} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{1-\mu}{2})}{\Gamma(\frac{\mu}{2})}.
 \end{aligned}$$

es decir, *dado el orden de la derivada fraccionaria μ y el potencial $V(x)$, calculamos los niveles de energía E_n , $i = 1, \dots, n$.*

Ahora bien, el *problema inverso* a estudiar es el siguiente:

Dado un conjunto de niveles de energía $E = \{E_1, \dots, E_n\}$ de la ecuación gobernante (3.12), ¿Podemos determinar el orden de la derivada fraccionaria? .

Para poder resolver este problema, hacemos uso de la teoría mencionada anteriormente, donde consideremos lo siguiente:

Sea η el ruido de nuestros datos de forma aditiva que se distribuye de forma gaussiana con media ν y varianza σ^2 , es decir,

$$E = g(\mu) + \eta \quad (3.13)$$

donde $g(\mu)$ está dado por (3.12) (μ es el parámetro a estimar), E es el vector de datos dado por los niveles de energía y $\eta \sim \mathcal{N}(\nu, \sigma^2)$ es le vector de ruido.

Supongamos que E es independiente de η , entonces la función posterior viene dada por

$$\pi_{post}(\mu) = \pi(\mu | E) \propto \pi_{noise}(E - g(\mu))\pi_{pr}(\mu) \quad (3.14)$$

Por otra parte, sabemos que si tenemos una variable $x \sim \mathcal{N}(\nu, \sigma^2)$, entonces su función de densidad de probabilidad está dada por

$$\pi(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{(x - \nu)^2}{2\sigma^2} \right\}$$

3.3 Solución numérica del Problema Inverso

Para muestrear nuestra distribución posterior, usamos DRAM.

Supongamos que η se distribuyen como $\mathcal{N}(0, 1)$, donde η es independiente de E , en consecuencia se tiene

$$\pi_{noise}(E - g(\mu)) \propto \exp \left\{ -\frac{\|E - g(\mu)\|^2}{2} \right\}$$

Puesto que DRAM hace menos restrictivo la elección de la distribución *a priori*, consideramos dos escenarios las cuales incluyen el rango de μ :

1. Distribución no informativa, es decir, $\mu \sim \mathcal{U}([0, 1])$, entonces por (3.14) se tiene

$$\pi_{post}(\mu) \propto \exp \left\{ -\frac{\|E - g(\mu)\|^2}{2} \right\} \mathcal{U}([0, 1]) \quad (3.15)$$

2. Distribución normal con $\nu = 1$ y $\sigma^2 = 0.5$, es decir, $\mu \sim \mathcal{N}(1, 0.5)$, entonces por (3.14) se tiene

$$\pi_{post}(\mu) \propto \exp \left\{ -\frac{(\|E - g(\mu)\|^2 + 2(\mu - 1)^2)}{2} \right\} \quad (3.16)$$

Dada está información, resolvemos nuestro problema inverso considerando los distintos tipos de potencial mencionados en esta tesis.

3.3.1 Potencial Infinito

Usamos el potencial dado por (2.41) con $r = 1$. En la Tabla (3.1) mostramos los primeros 10 niveles de energía que corresponden cuando $\alpha = 1.5$ ($\mu = 0.5$), los cuales se obtienen con el método de colocación y el método propuesto en Guerrero and Moreles (2014), a estos últimos los perturbamos con un error de cinco por ciento y son nuestros datos.

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
MC	1.5974	5.0620	9.6027	15.0301	21.2053	28.0561	35.5144	43.5379	52.0884	61.1361
CVRBF + Per	1.6192	5.1282	9.7237	15.2209	21.4737	28.4106	35.9619	44.0860	52.7415	61.8989
Diferencia	-0.0218	-0.0662	-0.1210	-0.1908	-0.2684	-0.3545	-0.4475	-0.5481	-0.6530	-0.7628
Errel	0.0136	0.0131	0.0126	0.0127	0.0127	0.0126	0.0126	0.0126	0.0125	0.0125

Tabla 3.1: Datos Potencial Infinito

A priori no informativa

Para este caso, consideramos un tamaño de muestra $N = 1500$ con un $burnin = 100$ y con punto inicial $\alpha_0 = 1.9$ ($\mu_0 = 0.9$).

Consideramos nuestra distribución posterior dada por (3.15).

En las Figura (3.1) se muestra la aproximación a la distribución posterior junto con los estimadores obtenidos, los cuales toman los valores: $\mu_{CM} = 0.504789$ y $\mu_{MAP} = 0.504869$ en consecuencia $\alpha_{CM} = 1.504789$ y $\alpha_{MAP} = 1.504869$.

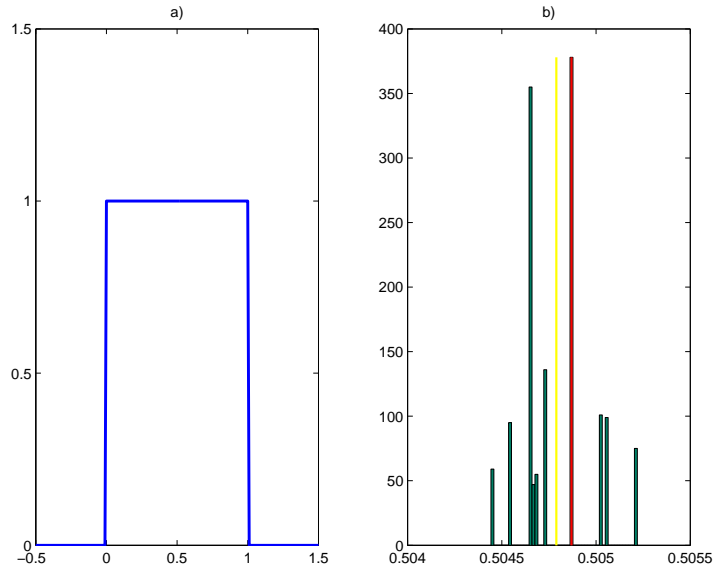


Figura 3.1: a) Distribución *a priori*. b) Histograma de la distribución posterior. Los estimadores CM (línea amarilla) - MAP (línea roja) también se muestran.

En la Figura (3.2) se muestra la Caminata como también la Autocorrelación, estas gráficas nos muestran que tenemos convergencia.

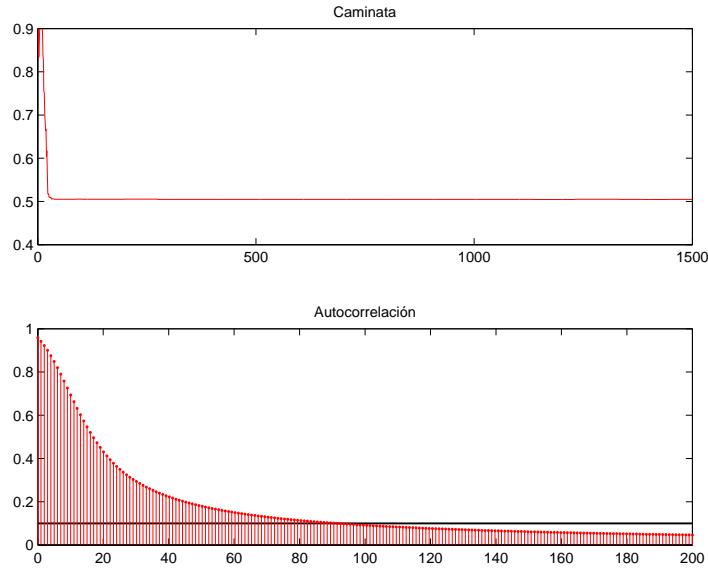


Figura 3.2: Caminata y Autocorrelación para el parámetro μ con 10 niveles de Energía.

Para decidir cual de los dos estimadores es el mejor, consideramos el *error relativo*, el cuál nos indica que los dos estimadores son buenos, esto se puede observar en la Tabla (3.2).

μ	μ_{CM}	μ_{MAP}	$Errel_{CM}$	$Errel_{MAP}$
0.5	0.504789	0.504869	0.009578	0.009739

Tabla 3.2: Errores relativos.

Finalmente, en la Tabla (3.3) comparamos los valores de los eigenvalores para $\mu = 0.5$ y elegimos como nuestro estimador a $\mu_{MAP} = 0.504869$. Observamos que el error relativo entre los valores es sumamente pequeño, por lo que podemos concluir que tenemos una buena estimación del orden de nuestra derivada, además esto nos indica que nuestro sistema no es sensible a pequeñas perturbaciones.

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
μ	1.5974	5.0620	9.6027	15.0301	21.2053	28.0561	35.5144	43.5379	52.0884	61.1361
μ_{MAP}	1.6059	5.0961	9.6780	15.1699	21.4248	28.3705	35.9388	44.0867	52.7730	61.9712
Errel	0.0053	0.0067	0.0078	0.0093	0.0104	0.0112	0.0120	0.0126	0.0131	0.0137

Tabla 3.3: Comparación entre Eigenvalores para μ y μ_{MAP} .**A priori** $\mathcal{N}(1, 0.5)$

En este caso, consideramos un tamaño de muestra $N = 1500$ con un *burnin* = 100 y con punto inicial $\alpha_0 = 1.9$ ($\mu_0 = 0.9$).

Consideramos nuestra distribución posterior dada por (3.16).

En las Figura (3.3) se muestra la aproximación a la distribución posterior junto con los estimadores obtenidos, los cuales toman los valores: $\mu_{CM} = 0.504779$ y $\mu_{MAP} = 0.504839$ en consecuencia $\alpha_{CM} = 1.504779$ y $\alpha_{MAP} = 1.504839$.

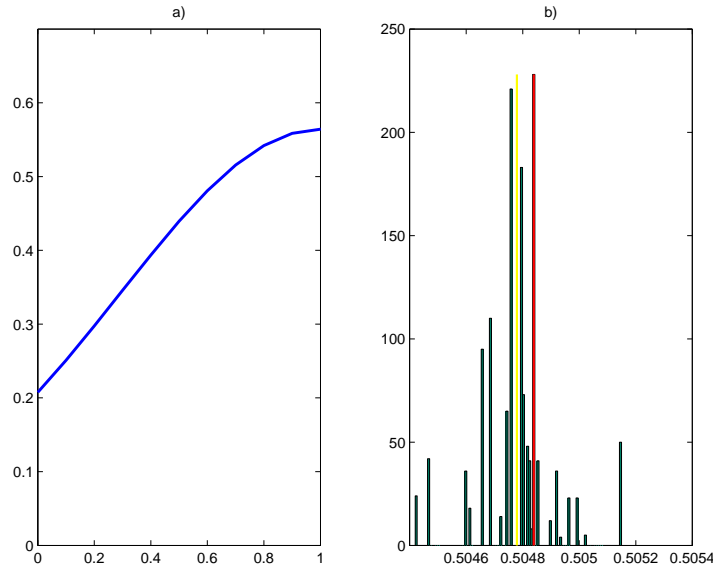


Figura 3.3: a) Distribución *a priori*. b) Histograma de la distribución posterior. Los estimadores CM (línea amarilla) - MAP (línea roja) también se muestran.

En la Figura (3.4) se muestra la Caminata como también la Autocorrelación, estas gráficas nos muestran que hay convergencia.

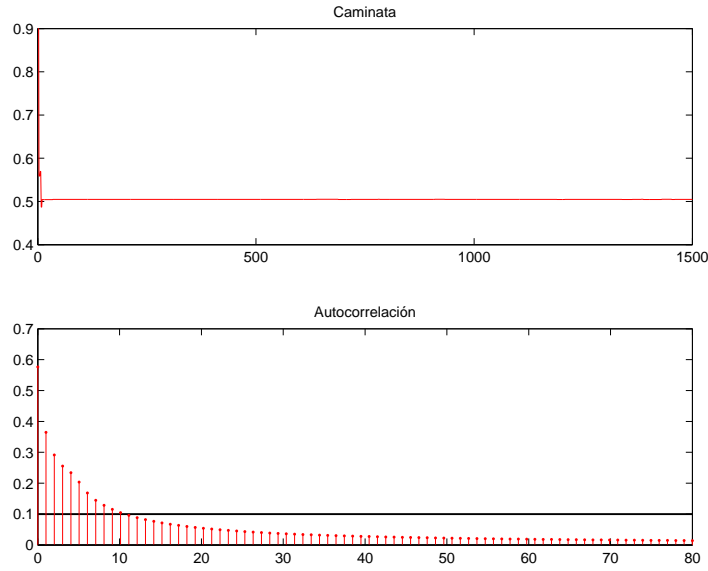


Figura 3.4: Caminata y Autocorrelación para el parámetro μ con 10 niveles de Energía.

Considerando la información proporcionada por la Tabla (3.4), nos indica los dos estimadores son buenos.

μ	μ_{CM}	μ_{MAP}	$Errel_{CM}$	$Errel_{MAP}$
0.5	0.504779	0.504839	0.009559	0.009678

Tabla 3.4: Errores relativos.

Finalmente, en la Tabla (3.5) comparamos los valores de los eigenvalores para $\mu = 0.5$ y $\mu_{MAP} = 0.504839$.

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
μ	1.5974	5.0620	9.6027	15.0301	21.2053	28.0561	35.5144	43.5379	52.0884	61.1361
μ_{MAP}	1.6032	5.0940	9.6774	15.1661	21.4215	28.3660	35.9353	44.0823	52.7684	61.9664
Errel	0.0037	0.0063	0.0078	0.0090	0.0102	0.0110	0.0119	0.0125	0.0131	0.0136

Tabla 3.5: Comparación entre Eigenvalores para μ y μ_{MAP} .

3.3.2 Oscilador Armónico Fraccionario

Se considera el potencial $V(x) = x^2$, con $x \in [-5.5, 5.5]$. Los datos son proporcionados por el método asintótico WKB más una perturbación del tres por ciento para $\alpha = \frac{3}{2}$ (ver [Laskin \(2002\)](#)).

Esta información se aprecia en la Tabla (3.6).

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
MC	0.99971	2.71128	4.18115	5.59020	6.92306	8.22947	9.49214	10.74491	11.90602	13.23882
WKB + Per	1.06101	2.72071	4.21539	5.62459	6.97659	8.28597	9.56158	10.80934	12.03349	13.23718
Diferencia	-0.06130	-0.00943	-0.03424	-0.03439	-0.05353	-0.05650	-0.06944	-0.06443	-0.12747	0.00164
Errel	0.06132	0.00348	0.00819	0.00615	0.00773	0.00687	0.00732	0.00600	0.01071	0.00012

Tabla 3.6: Datos Potencial Cuadrático

A priori $\mathcal{N}(1, 0.5)$

En este caso, consideramos un tamaño de muestra $N = 1500$ con un $burnin = 100$ y con punto inicial $\alpha_0 = 1.9$ ($\mu_0 = 0.9$).

Consideramos nuestra distribución posterior dada por (3.16).

En las Figura (3.5) se muestra la aproximación a la distribución posterior junto con los estimadores obtenidos, los cuales tienen valores: $\mu_{CM} = 0.508218$ y $\mu_{MAP} = 0.507572$ en consecuencia $\alpha_{CM} = 1.508218$ y $\alpha_{MAP} = 1.507572$.

En la Figura (3.6) se muestra la Caminata como también la Autocorrelación, estas gráficas nos muestran que hay convergencia.

De la Tabla (3.7) se tiene que ambos estimadores son buenos.

<i>a priori</i>	μ_{CM}	μ_{MAP}	$Errel_{CM}$	$Errel_{MAP}$
$\mu \sim \mathcal{N}(1, 0.5)$	0.508218	0.507572	0.016435	0.015144

Tabla 3.7: Errores relativos.

En la Tabla (3.8) comparamos los valores de los eigenvalores para $\mu = 0.5$ y $\mu_{MAP} = 0.507572$.

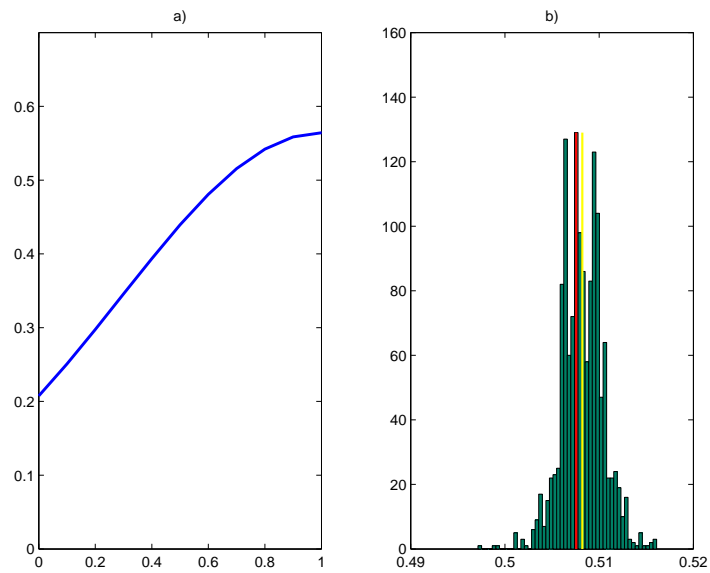


Figura 3.5: a) Distribución *a priori*. b) Histograma de la distribución posterior. Los estimadores CM (línea amarilla) - MAP (línea roja) también se muestran.

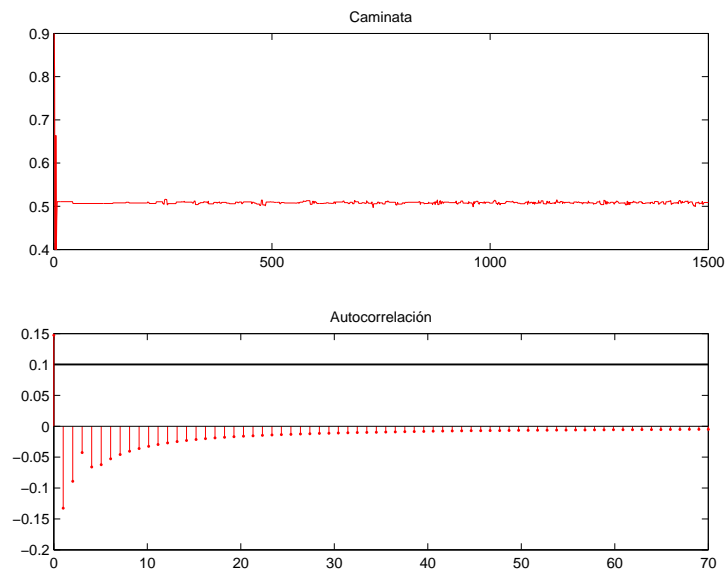


Figura 3.6: Caminata y Autocorrelación para el parámetro μ con 10 niveles de Energía.

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
μ	0.9997	2.7113	4.1811	5.5902	6.9231	8.2295	9.4921	10.7449	11.9060	13.2388
μ_{MAP}	1.0036	2.7118	4.1873	5.6102	6.9591	8.2657	9.5443	10.8065	11.9770	13.3193
Errel	0.0039	0.0002	0.0015	0.0036	0.0052	0.0044	0.0055	0.0057	0.0060	0.0061

Tabla 3.8: Comparación entre Eigenvalores para μ y μ_{MAP} .

3.3.3 Oscilador Anarmónico Fraccionario

Se considera el potencial $V(x) = x^4$, con $x \in [-3, 3]$. Los valores para los niveles de energía proporcionados por el método asintótico WKB para el caso $\alpha = \frac{4}{3}$ más un ruido del tres por ciento son considerados como nuestros datos (ver [Laskin \(2002\)](#)), esta información se aprecia en la Tabla (3.9)

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
MC	0.99718	2.81978	4.70857	6.60911	8.48015	10.37310	12.25345	14.13953	16.02732	17.91004
WKB + Per	0.94965	2.84896	4.74827	6.64757	8.54688	10.44618	12.34549	14.24480	16.14410	18.04341
Diferencia	0.04753	-0.02918	-0.03970	-0.03846	-0.06672	-0.07309	-0.09204	-0.10526	-0.11678	-0.13337
Errel	0.04766	0.01035	0.00843	0.00582	0.00787	0.00705	0.00751	0.00744	0.00729	0.00745

Tabla 3.9: Datos Potencial Cuartico

A priori $\mathcal{N}(1, 0.5)$

En este caso, consideramos un tamaño de muestra $N = 1500$ con un $burnin = 100$ y con punto inicial $\alpha_0 = 1.9$ ($\mu_0 = 0.9$).

Consideramos nuestra distribución posterior dada por (3.16).

En las Figura (3.7) se muestra la aproximación a la distribución posterior junto con los estimadores obtenidos, los cuales tienen valores: $\mu_{CM} = 0.338720$ y $\mu_{MAP} = 0.338947$ en consecuencia $\alpha_{CM} = 1.338720$ y $\alpha_{MAP} = 1.338947$.

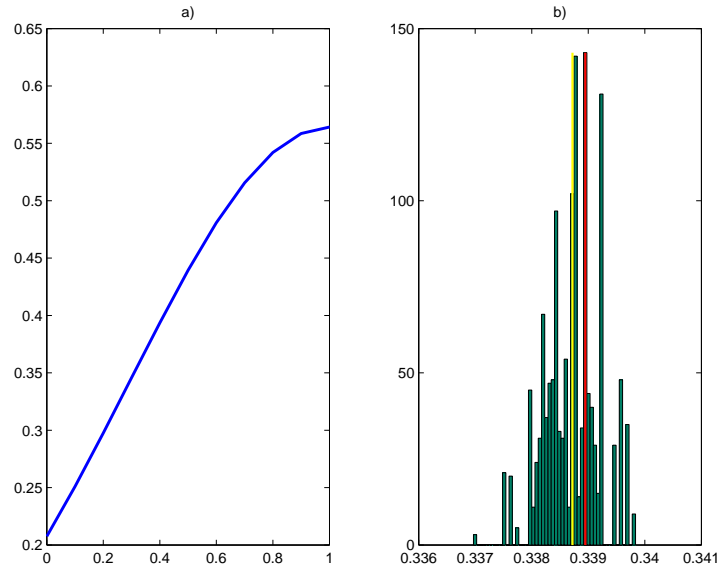


Figura 3.7: a) Distribución *a priori*. b) Histograma de la distribución posterior. Los estimadores CM (línea amarilla) - MAP (línea roja) también se muestran.

En la Figura (3.8) se muestra la Caminata como también la Autocorrelación, estas gráficas nos muestran que hay convergencia.

De la Tabla (3.10) se tiene que los dos estimadores son buenos .

μ	μ_{CM}	μ_{MAP}	$Errel_{CM}$	$Errel_{MAP}$
$\frac{1}{3}$	0.338720	0.338947	0.016161	0.016840

Tabla 3.10: Errores relativos.

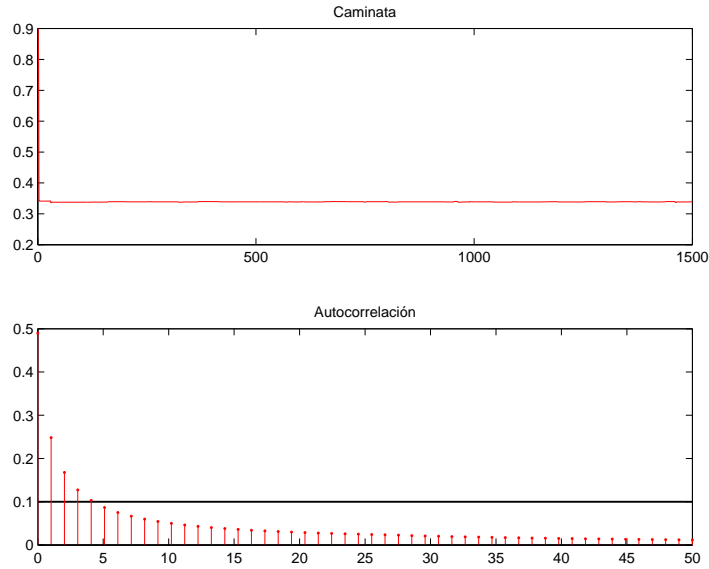


Figura 3.8: Caminata y Autocorrelación para el parámetro μ con 10 niveles de Energía.

Por último, en la Tabla (3.11) comparamos los valores de los eigenvalores para $\mu = \frac{1}{3}$ y $\mu_{MAP} = 0.338947$.

	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10
μ	0.9972	2.8198	4.7086	6.6091	8.4802	10.3731	12.2534	14.1395	16.0273	17.9100
μ_{MAP}	0.9927	2.8336	4.7250	6.6376	8.5334	10.4512	12.3451	14.2555	16.1608	18.0672
Errel	0.0045	0.0049	0.0035	0.0043	0.0063	0.0075	0.0075	0.0082	0.0083	0.0088

Tabla 3.11: Comparación entre Eigenvalores para μ y μ_{MAP} .

CAPITULO 4

Conclusiones y Trabajo a Futuro

Conclusiones

En está tesis, se ha propuesto y desarrollado un Método Espectral para resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger Fraccionaria que es un caso particular de un problema del tipo Sturm-Liouville Fraccionario con derivada en el sentido de Riesz, cuyos resultados fueron muy satisfactorios. Observamos que el método propuesto tiene mejor desempeño en comparación con otros métodos existentes en la literatura, pues se tienen buenas aproximaciones a los niveles de energía.

La ventaja del método espectral sobre los demás, es que necesitamos pocos nodos de colocación para tener una buena aproximación y su costo de cómputo no es caro, una desventaja es que solo es factible para dominios rectangulares.

Con respecto a los nodos de colocación, para el caso fraccionario no hay una teoría sistemática que diga como elegirlos, sin embargo, al realizar varias pruebas numéricas se llegó a la conclusión que para nuestro problema en particular, los que mejor se adecuan son lo GLL.

Una vez que se tiene el problema directo, se prosigue a resolver un problema inverso asociado a Sturm-Liouville. Este problema se basa en estimar el orden de la derivada fraccionaria α . Los resultados obtenidos son satisfactorios y esto se refleja en los estimadores encontrados.

Trabajo a Futuro

Como se menciona anteriormente, en esta tesis se trabajaron diversas cosas en relación con la ecuación de Schrödinger fraccionario, sin embargo, faltan muchas cosas por abarcar, tanto teóricamente como numéricamente, algunas de esas cosas las mencionamos a continuación:

- Análisis teórico del método espectral fraccionario.
- Extensión del Método Espectral Fraccionario a dominios rectangulares.
- Analizar la dependencia del orden de la derivada en datos espectrales.

BIBLIOGRAFÍA

- Canuto, C., Quarteroni, A., Hussaini, M., and Zang, T. (2006). *Spectral Methods : Fundamentals in Single Domains*. Springer.
- Folland, G. B. (1992). *Fourier Analysis And Its Applications*. Wadsworth & Brooks/Cole.
- Gilks, W., Richardson, S., and Spiegelhalter, D. (1998). *Markov Chain Monte Carlo in Practice*. Chapman & Hall/CRC.
- Guerrero, A. and Moreles, M. A. (2014). On the numerical solution of the eigenvalue problem in fractional quantum mechanics. *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*.
- Haario, H., Laine, M., Mira, A., and Saksman, E. (2006). Dram: Efficient adaptive mcmc. *Statistics and Computing*, 16:339–354.
- Helgason, S. (1999). *The Radon Transform*. 2nd Edition.
- Kaipio, J. and Somersalo, E. (2005). *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer.
- Kwaśnicki, M. (2012). Eigenvalues of the fractional laplace operator in the interval. *Journal of Functional Analysis*.
- Laskin, N. (2002). Fractional schrödinger equation. *Phys Rev E*.
- Podlubny, I. (1999). *Fractional Differential Equations*. Academic Press.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. P. (2007). *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*.

- Quarteroni, A., Sacco, R., and Saleri, F. (2007). *Numerical Mathematics*. Springer.
- Teschl, G. (2012). *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*. American Mathematical Society.
- Vázquez, L. and Velasco, M. P. (2011). El cálculo fraccionario como instrumento de modelización. Technical report, Universidad Complutense de Madrid.
- Zayernouri, M. and Karniadakis, G. E. (2013). Fractional sturm-liouville eigenproblems: Theory and numerical approximation. *Journal of Computational Physics*.
- Zayernouri, M. and Karniadakis, G. E. (2014). Fractional spectral collocation method. *SIAM J. Sci. Comput.*