

Métodos numéricos en relatividad

Miguel Alcubierre
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Abril 2005

Índice

1. Introducción	2
2. Aproximaciones en diferencias finitas	2
2.1. Conceptos básicos	2
2.2. La ecuación de onda en una dimensión	4
2.3. Aproximaciones implícitas y moléculas computacionales	7
2.4. Consistencia, convergencia y estabilidad	9
2.5. Estabilidad de von Neumann	10
3. Sistemas de primer orden	14
3.1. Métodos explícitos clásicos	14
3.2. Métodos implícitos: Crank-Nicholson	16
3.3. Métodos de líneas: Crank-Nicholson iterado	16
Referencias	18

1. Introducción

Las teorías de campo juegan un papel fundamental en la física moderna. Desde la electrodinámica clásica de Maxwell, hasta las teorías cuánticas de campo, pasando por la ecuación de Schrödinger, la hidrodinámica, y desde luego la relatividad general, la noción de campo como una entidad física en si misma ha tenido implicaciones profundas en nuestra concepción del Universo. Los campos son funciones continuas del espacio y el tiempo, y la descripción matemática de sus leyes dinámicas se realiza en el contexto de las ecuaciones diferenciales parciales.

Las ecuaciones diferenciales parciales asociadas a teorías físicas son en general imposibles de resolver analíticamente excepto en casos muy idealizados. Esta dificultad puede tener diversos orígenes, desde la presencia de fronteras irregulares, a la existencia de términos no lineales en las ecuaciones mismas. Para resolver este tipo de ecuaciones en situaciones dinámicas generales resulta inevitable utilizar aproximaciones numéricas.

Existen muchas formas distintas de resolver ecuaciones diferenciales parciales de forma numérica. Los métodos más populares son tres: las “diferencias finitas” [7], los “elementos finitos” [6], y los “métodos espectrales”. En este curso nos limitaremos a estudiar las diferencias finitas por ser el método conceptualmente más simple y también por ser el más común en la relatividad numérica (aunque no el único, en particular los métodos espectrales han comenzado a ganar popularidad en los últimos años [2, 3, 4]).

2. Aproximaciones en diferencias finitas

2.1. Conceptos básicos

Cuando uno estudia un campo en un espacio-tiempo continuo, se ve en la necesidad de considerar un número infinito (y no contable) de variables desconocidas: el valor del campo en todo punto del espacio y a todo tiempo. Para encontrar el valor del campo utilizando aproximaciones numéricas primero se debe reducir el número de variables a una cantidad finita. Hay muchas formas de hacer esto. Los métodos espectrales, por ejemplo, expanden la solución como una combinación lineal finita de una base adecuada de funciones. Las variables a resolver son entonces los coeficientes de dicha expansión. Un enfoque distinto es tomado por las diferencias y los elementos finitos. En ambos casos se reduce el número de variables discretizando el dominio de dependencia de las funciones, aunque con distintas estrategias.

La idea básica de las diferencias finitas es substituir al espacio-tiempo continuo por un conjunto discreto de puntos. Este conjunto de puntos se conoce como la “malla” o

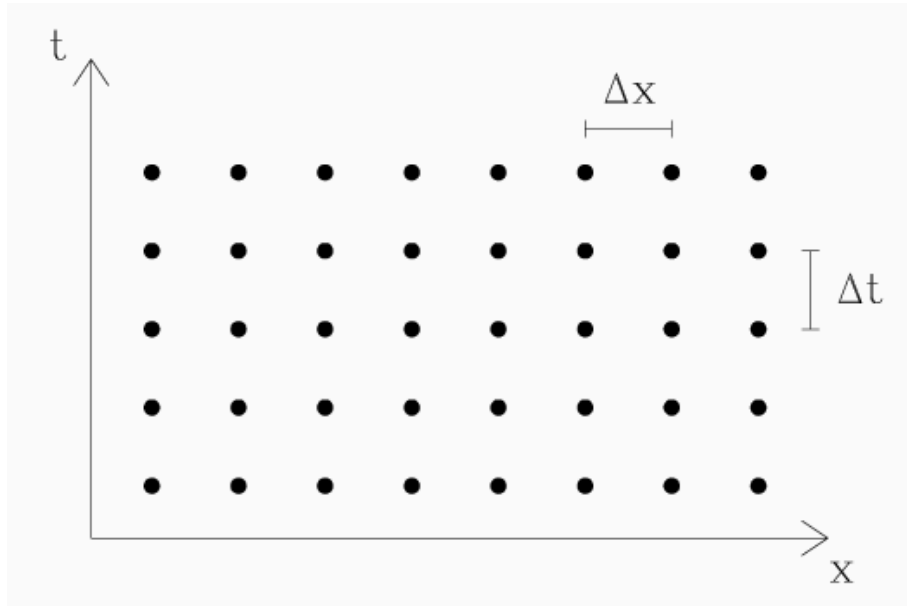


Figura 1: Discretización del espacio-tiempo utilizada en diferencias finitas.

“red” computacional. Las distancias en el espacio entre los puntos de esta red no tienen porqué ser uniformes, pero en estas notas asumiremos que si lo son. El paso de tiempo entre dos niveles consecutivos se denomina Δt , y la distancia entre dos puntos adyacentes en el espacio Δx . La Figura 1 es una representación gráfica de la red computacional.

Una vez establecida la malla computacional el siguiente paso es substituir las ecuaciones diferenciales por un sistema de ecuaciones algebraicas. Esto se logra aproximando los operadores diferenciales por diferencias finitas entre los valores de las funciones en puntos adyacentes de la malla. De esta forma se obtiene una ecuación algebraica en cada punto de la malla por cada ecuación diferencial. Estas ecuaciones algebraicas involucran los valores de las funciones en el punto considerado y en sus vecinos más cercanos. El sistema de ecuaciones algebraicas se puede resolver de manera sencilla, el precio que hemos pagado es que ahora tenemos muchísimas ecuaciones algebraicas, por lo que se requiere utilizar una computadora.

Para ver como se hace esto en la práctica, consideremos como modelo la ecuación de onda en una dimensión. Esta ecuación presenta muchas ventajas. En primer lugar se puede resolver de manera exacta y la solución exacta se puede utilizar para comparar con la solución numérica. Además, la mayoría de las ecuaciones fundamentales en las teorías de campo modernas se pueden ver como generalizaciones de diversos tipos de la ecuación de onda.

2.2. La ecuación de onda en una dimensión

La ecuación de onda en una dimensión (en un espacio plano) tiene la forma:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0, \quad (1)$$

donde ϕ es la función de onda y c la velocidad de onda.

Para encontrar una aproximación en diferencias finitas a esta ecuación comenzamos por introducir la siguiente notación para los valores de ϕ en la red computacional:

$$\phi_m^n := \phi(n\Delta t, m\Delta x), \quad (2)$$

Podemos ahora aproximar los operadores diferenciales que aparecen en la ecuación (1) utilizando expansiones de Taylor de ϕ alrededor del punto (n, m) . Consideremos, por ejemplo, el valor de ϕ en los puntos $(n, m + 1)$ y $(n, m - 1)$:

$$\phi_{m+1}^n = \phi_m^n + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right) (\Delta x)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right) (\Delta x)^3 + \dots, \quad (3)$$

$$\phi_{m-1}^n = \phi_m^n - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right) (\Delta x)^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right) (\Delta x)^3 + \dots, \quad (4)$$

donde todas las derivadas deben ser evaluadas en el punto $(t = n \Delta t, x = m \Delta x)$. A partir de estas expresiones es fácil ver que:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right) = \frac{\phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{(\Delta x)^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right) + \dots. \quad (5)$$

Podemos entonces aproximar la segunda derivada como:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right) \simeq \frac{\phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n}{(\Delta x)^2}. \quad (6)$$

Que tan buena es esta aproximación depende, desde luego, del tamaño de la malla Δx . Si Δx es pequeño en el sentido de que la función ϕ varía muy poco en una región de ese tamaño, entonces la aproximación puede ser muy buena. El error involucrado en esta aproximación es llamado “error de truncación” y como vemos en este caso su parte dominante resulta ser proporcional a Δx^2 , por lo que se dice que esta aproximación es de segundo orden.

La segunda derivada de ϕ con respecto a t se puede aproximar exactamente de la misma manera. De esta forma obtenemos la siguiente aproximación a segundo orden de la ecuación de onda:

$$\frac{\phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\phi_m^{n+1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n-1}}{(\Delta t)^2} = 0 . \quad (7)$$

Podemos reescribir esta ecuación de forma más compacta si introducimos el llamado “parámetro de Courant”: $\rho := c\Delta t/\Delta x$. La aproximación toma la forma final:

$$\rho^2 \left(\phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n \right) - \left(\phi_m^{n+1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n-1} \right) = 0 . \quad (8)$$

Esta ecuación tiene una propiedad muy importante: involucra solo un valor de la función de onda en el último nivel de tiempo, el valor ϕ_m^{n+1} . Podemos entonces despejar este valor en términos de valores en tiempos anteriores para obtener:

$$\phi_m^{n+1} = 2\phi_m^n - \phi_m^{n-1} + \rho^2 \left(\phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n \right) . \quad (9)$$

Por esta propiedad la aproximación anterior se conoce como “aproximación explícita”. Si conocemos los valores de la función ϕ en los niveles n y $n-1$, podemos usar la ecuación anterior para calcular directamente los valores de la función en el nuevo paso de tiempo $n+1$. El proceso puede luego iterarse tantas veces como se quiera. Es evidente que todo lo que se necesita para comenzar la evolución es el conocimiento del valor de la función de onda en los primeros dos pasos de tiempo. Pero obtener estos datos es muy fácil de hacer. Como se trata de una ecuación de segundo orden, los datos iniciales incluyen:

$$f(x) := \phi(0, x) , \quad g(x) := \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=0} . \quad (10)$$

El conocimiento de $f(x)$ evidentemente nos da el primer nivel de tiempo:

$$\phi_m^0 = f(m \Delta x) . \quad (11)$$

Para el segundo nivel basta con aproximar la primera derivada en el tiempo en diferencias finitas. Una posible aproximación es:

$$g(m \Delta x) = \frac{\phi_m^1 - \phi_m^0}{\Delta t} , \quad (12)$$

de donde obtenemos:

$$\phi_m^1 = g(m \Delta x) \Delta t + \phi_m^0 . \quad (13)$$

La expresión anterior tiene un inconveniente importante. De la expansión en Taylor podemos ver fácilmente que el error de truncación para esta expresión es de orden Δt , por lo que la aproximación es solo de primer orden. Es claro que si comenzamos la evolución con un error de primer orden, el segundo orden de todo el esquema se pierde. Sin embargo, es fácil resolver este problema. Una aproximación a segundo orden de la derivada temporal resulta ser:

$$g(m \Delta x) = \frac{\phi_m^1 - \phi_m^{-1}}{2 \Delta t} . \quad (14)$$

El problema ahora es que esta expresión hace referencia al valor de la función ϕ_m^{-1} que también es desconocido. Pero ya tenemos otra ecuación que hace referencia a ϕ_m^1 y ϕ_m^{-1} : la aproximación a la ecuación de onda (8) evaluada en $n = 0$. Podemos entonces utilizar estas dos ecuaciones para eliminar ϕ_m^{-1} y resolver para ϕ_m^1 . De esta forma obtenemos la siguiente aproximación a segundo orden para el segundo nivel de tiempo:

$$\phi_m^1 = \phi_m^0 + \frac{\rho^2}{2} (\phi_{m+1}^0 - 2\phi_m^0 + \phi_{m-1}^0) + \Delta t g(m \Delta x) . \quad (15)$$

Las ecuaciones (11) y (15) nos dan ahora toda la información necesaria para comenzar la evolución.

Hay un punto importante que debe mencionarse aquí. Para reducir el número total de variables a un número finito, también es necesario tomar una región finita del espacio, conocida como el “dominio computacional”, con un número finito de puntos N . Resulta entonces crucial especificar las condiciones de frontera que deberán aplicarse a los extremos de la red computacional. Es claro que la aproximación a la ecuación de onda (8) no puede ser utilizada en las fronteras debido a que hace referencia a puntos fuera del dominio computacional. Existen diversas maneras conocidas de imponer condiciones de frontera para la ecuación de onda. Sin embargo, para sistemas más complejos, como las ecuaciones de Einstein, la elección de condiciones de frontera adecuadas y consistentes es un problema no resuelto de gran actualidad [8, 9]. Para los objetivos de estas notas podemos olvidarnos del problema de las condiciones de frontera y asumir que tenemos un espacio periódico, de manera que la elección de las condiciones de frontera será simplemente:

$$\phi_0^n \equiv \phi_N^n . \quad (16)$$

Esta elección, además de ser sumamente simple, es equivalente a utilizar la aproximación interna en todos lados, por lo que nos permite concentrarnos en las propiedades del método interior únicamente, sin preocuparnos por los efectos que puedan introducir las fronteras.

2.3. Aproximaciones implícitas y moléculas computacionales

En la sección anterior se introdujeron las ideas básicas de las aproximaciones en diferencias finitas utilizando la ecuación de onda en una dimensión como ejemplo. La aproximación que encontramos, sin embargo, esta lejos de ser única. En principio, existe un número infinito de formas distintas de aproximar una misma ecuación diferencial utilizando diferencias finitas. Diferentes aproximaciones tienen distintas propiedades. En la siguiente sección se mencionarán cuales de estas propiedades pueden hacer una aproximación más útil que otra. En esta sección me limitaré a introducir una generalización de la aproximación explícita que vimos antes.

Para hacer las cosas más fáciles, introduciremos una notación compacta para las diferencias finitas. Definimos los operadores de “primeras diferencias centradas” como:

$$\delta_x \phi_m^n := \frac{1}{2} (\phi_{m+1}^n - \phi_{m-1}^n), \quad (17)$$

$$\delta_t \phi_m^n := \frac{1}{2} (\phi_m^{n+1} - \phi_m^{n-1}). \quad (18)$$

y los operadores de “segundas diferencias centradas” como:

$$\delta_x^2 \phi_m^n := \phi_{m+1}^n - 2\phi_m^n + \phi_{m-1}^n, \quad (19)$$

$$\delta_t^2 \phi_m^n := \phi_m^{n+1} - 2\phi_m^n + \phi_m^{n-1}, \quad (20)$$

(Cuidado: Con esta notación $(\delta_x)^2 \neq \delta_x^2$).

Habiendo definido estos operadores, podemos regresar a las aproximaciones que hicimos a los operadores diferenciales que aparecen en la ecuación de onda. Partiendo de nuevo de las series de Taylor, es posible mostrar que la segunda derivada espacial puede aproximarse de manera más general como:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \simeq \frac{1}{(\Delta x)^2} \delta_x^2 \left[\frac{\theta}{2} (\phi_m^{n+1} + \phi_m^{n-1}) + (1 - \theta) \phi_m^n \right], \quad (21)$$

con θ un parámetro arbitrario. La expresión que teníamos antes, ecuación (6), puede recuperarse tomando $\theta = 0$. Esta nueva aproximación corresponde a tomar promedios, con un cierto peso, de operadores en diferencias finitas actuando en diferentes pasos de tiempo. En el caso particular en que $\theta = 1$, la contribución del paso de tiempo intermedio de hecho desaparece por completo.

Si utilizamos esta aproximación para la segunda derivada espacial, pero mantenemos la misma aproximación que antes para la derivada temporal, obtenemos la siguiente aproximación en diferencias finitas de la ecuación de onda:

$$\rho^2 \delta_x^2 \left[\frac{\theta}{2} (\phi_m^{n+1} + \phi_m^{n-1}) + (1 - \theta) \phi_m^n \right] - \delta_t^2 \phi_m^n = 0. \quad (22)$$

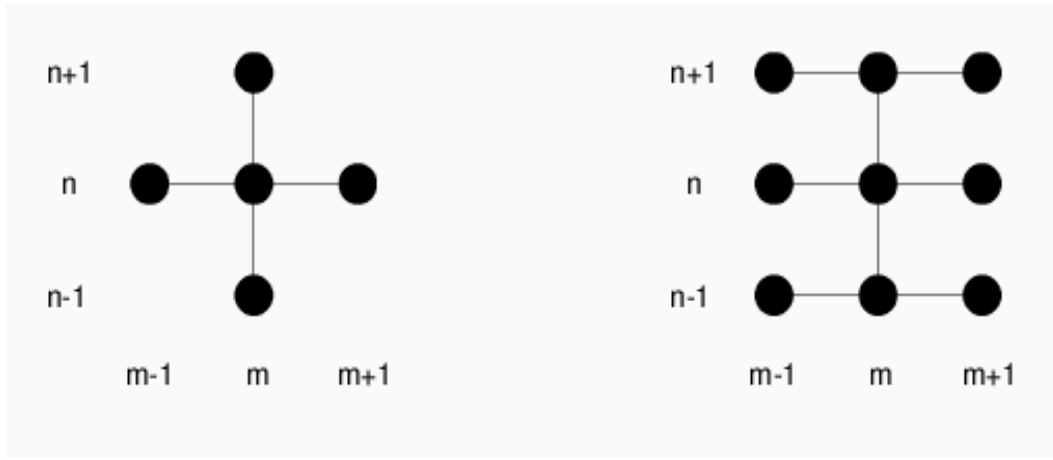


Figura 2: Moléculas computacionales.

Esta es una posible generalización de (8), pero claramente no la única, es claro que podemos jugar este juego de muchas maneras y obtener aproximaciones aún más generales, todas ellas válidas, y todas ellas a segundo orden (incluso es posible ingeniárselas para encontrar aproximaciones a cuarto orden o mayor). La aproximación dada por (22) tiene una nueva propiedad muy importante: hace referencia no a uno, sino a tres valores diferentes de ϕ en el último paso de tiempo. Esto significa que ahora no podemos resolver para ϕ en el último paso de manera explícita en términos de los valores en los dos pasos anteriores. Debido a esto, a la aproximación (22) se le conoce como “aproximación implícita”.

Cuando las ecuaciones para todos los puntos de la malla, incluyendo las fronteras, se consideran a la vez, es posible resolver el sistema completo invirtiendo una matriz no trivial, lo que desde luego toma más tiempo que el necesario para una aproximación explícita. Parecería entonces que no tiene ningún sentido considerar aproximaciones de tipo implícito. Sin embargo, en muchas ocasiones las aproximaciones implícitas resultan tener mejores propiedades que las explícitas, en particular relacionadas con la estabilidad del esquema numérico, concepto que se discutirá en la siguiente sección.

La diferencia entre una aproximación implícita y otra explícita puede verse gráficamente utilizando el concepto de “molécula computacional”, que no es otra cosa que un diagrama que muestra las relaciones entre los distintos puntos utilizados en una aproximación en diferencias finitas. La Figura 2 muestra las moléculas computacionales para los casos implícito y explícito que hemos considerado.

2.4. Consistencia, convergencia y estabilidad

En la última sección nos topamos con quizá uno de los conceptos más importantes de las diferencias finitas: Existe, en general, un número infinito de maneras posibles de aproximar una misma ecuación diferencial. Esto sigue siendo cierto incluso si uno se restringe a considerar aproximaciones con un mismo orden de error.

La multiplicidad de posibles aproximaciones nos lleva inmediatamente a la siguiente pregunta: ¿Cómo saber en que caso usar una cierta aproximación y no otra? Desgraciadamente, no existe una respuesta general a esta pregunta, por lo que muchas veces se dice que las diferencias finitas son un arte más que una ciencia. Sin embargo, si existen guías que nos permiten escoger entre distintas aproximaciones en ciertos casos. Estas guías tienen que ver con los conceptos de consistencia, convergencia y estabilidad.

Consideremos una cierta aproximación en diferencias finitas a una ecuación diferencial. Cuando la malla se refina (es decir, cuando Δt y Δx se hacen cada vez más pequeños), uno esperaría que la aproximación fuera cada vez mejor en el sentido de que los errores de truncación se hacen cada vez más pequeños. Buscamos entonces que en el límite continuo nuestra aproximación se acerca a la ecuación diferencial original y no a otra. Cuando esto ocurre localmente se dice que nuestra aproximación es “consistente”. En general, esta propiedad es muy fácil de ver de la estructura de las aproximaciones en diferencias finitas, y puede comprobarse casi a ojo. Las excepciones importantes son situaciones en las que el sistema de coordenadas es singular, donde mostrar consistencia en el punto singular puede no ser trivial. Por ejemplo, es común que aproximaciones en diferencias finitas “estándar” fallen en el punto $r = 0$ cuando se utilizan coordenadas esféricas. La consistencia es claramente fundamental en una aproximación en diferencias finitas. Si falla, aunque sea en un solo punto, implica que no recuperaremos la solución correcta de la ecuación diferencial.

La consistencia es solo una propiedad local: una aproximación consistente se reduce *localmente* a la ecuación diferencial en el límite continuo. En la práctica, estamos realmente interesados en una propiedad más global. Lo que realmente buscamos es que la aproximación mejore a un tiempo finito T cuando refinamos la malla. Es decir, la diferencia entre la solución exacta y la solución numérica a un tiempo fijo T debe tender a cero en el límite continuo. Esta condición se conoce como “convergencia”.

La convergencia es claramente diferente a la consistencia: esquemas consistentes pueden fácilmente no ser convergentes. Esto no es difícil de entender si pensamos que en el límite cuando Δt se hace cero, un tiempo finito T se puede alcanzar solo después de un número infinito de pasos. Esto implica que incluso si el error en cada paso es infinitesimal, su integral total puede muy fácilmente ser finita. La solución numérica puede incluso divergir y el error de hecho resultar infinito.

En general es muy difícil verificar analíticamente si un esquema de aproximación es convergente o no lo es. Numéricamente, por otro lado, es muy fácil ver si la solución aproximada converge a algo (es decir, no diverge). Lo difícil es saber si la solución numérica converge hacia la solución exacta y no a otra cosa.

Hay otra propiedad importante de las aproximaciones en diferencias finitas. Independientemente del comportamiento de la solución a la ecuación diferencial, debemos pedir que las *soluciones exactas de las ecuaciones en diferencias finitas* permanezcan acotadas para cualquier tiempo finito T y cualquier intervalo de tiempo Δt . Este requisito se conoce como “estabilidad”, e implica que ninguna componente de los datos iniciales debe amplificarse arbitrariamente. La estabilidad es una propiedad del sistema de ecuaciones en diferencias finitas, y no es otra cosa que el análogo discreto de la condición de que un sistema de ecuaciones diferenciales este bien planteado. Una aproximación inestable es inútil en la práctica.

Un resultado fundamental de la teoría de las aproximaciones en diferencias finitas es el teorema de Lax (para su demostración ver, por ejemplo, la referencia [7]):

TEOREMA: *Dado un problema de valores iniciales bien planteado matemáticamente y una aproximación en diferencias finitas a él que satisface la condición de consistencia, entonces la estabilidad es condición necesaria y suficiente para la convergencia.*

Este teorema es de gran importancia pues relaciona el objetivo final de toda aproximación en diferencias finitas, es decir, la convergencia a la solución exacta, con una propiedad que es mucho más fácil de probar: la estabilidad.

2.5. Estabilidad de von Neumann

Un método general para probar la estabilidad de los sistemas de ecuaciones en diferencias finitas se obtiene de la definición de estabilidad directamente. Comenzamos por escribir las ecuaciones en diferencias finitas como:

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{B} \mathbf{v}^n, \quad (23)$$

donde \mathbf{v}^n es el vector solución en el nivel de tiempo n , y \mathbf{B} es una matriz (en general con muchos ceros). Es importante notar que toda aproximación en diferencias finitas, incluso aquellas que involucran más de dos niveles de tiempo (como las que introdujimos para la ecuación de onda en las secciones anteriores), puede escribirse de la forma (23) simplemente introduciendo variables auxiliares.

Como el vector \mathbf{v}^n se puede escribir como una combinación lineal de los eigenvectores de \mathbf{B} , el requerimiento de estabilidad se reduce a pedir que la matriz \mathbf{B} no amplifique ninguno de sus eigenvectores, es decir, que la magnitud del mayor de sus eigenvalores sea

menor o igual que 1. Dicho de otra forma, el “radio espectral” de \mathbf{B} debe ser menor o igual a 1.

El análisis de estabilidad basado en la idea que hemos expuesto es muy general, pero requiere del conocimiento de los coeficientes de \mathbf{B} en todo el espacio, incluida la frontera. Existe, sin embargo, un método muy popular de análisis de estabilidad que, aunque en principio solo nos proporciona condiciones necesarias para la estabilidad, en muchos casos resulta también dar condiciones suficientes. Este método, introducido originalmente por von Neumann, está basado en una descomposición en Fourier de la solución.

Para introducir este método, empezamos entonces por expandir la solución de (23) en una serie de Fourier:

$$\mathbf{v}^n(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{v}}^n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (24)$$

donde la suma es sobre todos los vectores de onda \mathbf{k} que pueden representarse en la malla.¹ Si ahora sustituimos esto en la ecuación original (23) obtenemos:

$$\tilde{\mathbf{v}}^{n+1} = \mathbf{G}(\Delta x, \Delta t, \mathbf{k}) \tilde{\mathbf{v}}^n. \quad (25)$$

La matriz \mathbf{G} se conoce como “matriz de amplificación”. La condición de estabilidad ahora corresponde a pedir que ningún modo de Fourier se amplifique, es decir, el radio espectral de \mathbf{G} debe ser menor o igual que uno. Esta es la condición de estabilidad de von Neumann.

Es importante recalcar que para poder utilizar este criterio de estabilidad se han supuesto dos cosas: 1) Las condiciones de frontera son periódicas, pues de otra forma no se puede hacer la expansión en serie de Fourier, y 2) Los elementos de la matriz \mathbf{B} son constantes, pues de otra forma no se pueden separar los diferentes modos de Fourier.

Como ejemplo del análisis de estabilidad de von Neumann vamos a utilizar la aproximación implícita a la ecuación de onda que derivamos antes (ecuación (22)):

$$\rho^2 \delta_x^2 \left[(\theta/2) (\phi_m^{n+1} + \phi_m^{n-1}) + (1 - \theta) \phi_m^n \right] - \delta_t^2 \phi_m^n = 0. \quad (26)$$

Consideraremos ahora un modo de Fourier de la forma:

$$\phi_m^n = \xi^n e^{i m k \Delta x}. \quad (27)$$

Si sustituimos esto en la ecuación en diferencias finitas encontramos, después de un poco de álgebra, la siguiente ecuación cuadrática para ξ :

$$A \xi^2 + B \xi + C = 0, \quad (28)$$

¹La menor longitud de onda que se puede representar en la malla es claramente $2 \Delta x$, también conocida como la “longitud de onda de Niquist”. Esto implica que el valor máximo de cualquier componente del vector de onda es $\pi/\Delta x$.

con coeficientes dados por

$$A = \rho^2 \theta [\cos(k \Delta x) - 1] - 1 , \quad (29)$$

$$B = 2 \rho^2 (1 - \theta) [\cos(k \Delta x) - 1] + 2 , \quad (30)$$

$$C = \rho^2 \theta [\cos(k \Delta x) - 1] - 1 . \quad (31)$$

La dos raíces de la ecuación cuadrática son, claramente:

$$\xi_{\pm} = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A} , \quad (32)$$

y la solución general a la ecuación en diferencias finitas resulta ser:

$$\phi_m^n = \sum_k [Z_k^+ (\xi_+(k))^n + Z_k^- (\xi_-(k))^n] e^{imk \Delta x} , \quad (33)$$

donde Z_k^+ y Z_k^- son constantes arbitrarias.

Por otro lado, del hecho de que $A = C$ es fácil mostrar que:

$$|\xi_+ \xi_-| = \left| \frac{C}{A} \right| = 1 . \quad (34)$$

Esta es una propiedad muy importante, implica que si el sistema es estable para toda k , es decir, si $|\xi_{\pm}(k)| \leq 1$, entonces necesariamente será también no disipativo (los modos de Fourier no solo no crecen, sino que tampoco se disipan). Para que el sistema sea estable debemos ahora pedir que:

$$\xi_+(k) = \xi_-(k) = 1 . \quad (35)$$

Es fácil ver que esto ocurrirá siempre que:

$$B^2 - 4AC \leq 0 . \quad (36)$$

Substituyendo los valores de los coeficientes A , B y C en esta expresión obtenemos la siguiente condición de estabilidad:

$$\rho^2 (1 - 2\theta) [1 - \cos(k \Delta x)] - 2 \leq 0 . \quad (37)$$

Como queremos que esto se cumpla para toda k , debemos considerar el caso cuando el lado izquierdo alcanza su valor máximo. Si tomamos $\theta < 1/2$ esto ocurrirá para $k = \pi/\Delta x$, en cuyo caso la condición de estabilidad se reduce a:

$$\rho^2 \leq 1/(1 - 2\theta) . \quad (38)$$

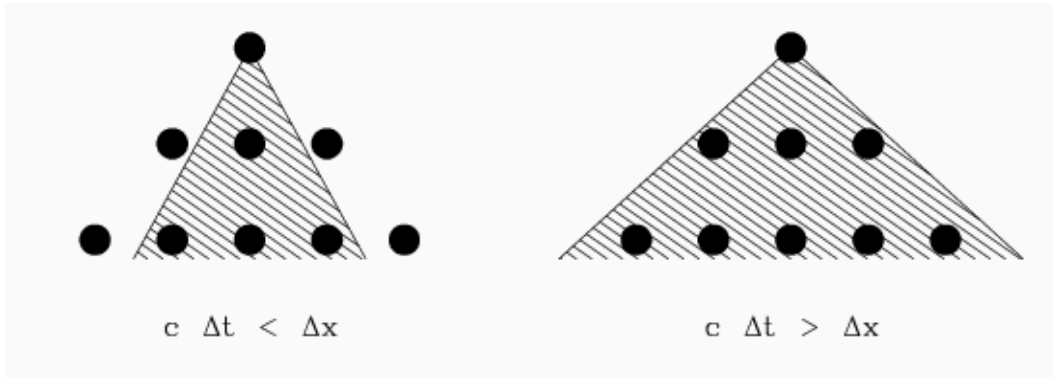


Figura 3: Condición de estabilidad CFL. Para $c \Delta t < \Delta x$, el dominio de dependencia numérico es mayor que el dominio de dependencia físico (región sombreada), y el sistema es estable. Para $c \Delta t > \Delta x$, la situación es la opuesta, y el sistema es inestable.

Para el esquema explícito se tiene $\theta = 0$, y la condición se reduce a la bien conocida condición de estabilidad de Courant-Friedrich-Lewy (CFL):

$$c\Delta t \leq \Delta x . \quad (39)$$

La condición CFL tiene una clara interpretación geométrica: el dominio de dependencia numérico debe ser mayor que el dominio de dependencia físico, y no al revés (ver Figura 3). Si esto no fuera así, resultaría imposible para la solución numérica converger a la solución exacta, pues al refinar la malla siempre habría información física relevante que quedaría fuera del dominio de dependencia numérico. Y, como hemos visto, el teorema de Lax implica que si no hay convergencia el sistema es inestable.

El argumento que acabamos de dar claramente solo se aplica a esquema explícitos. Esto se debe a que para un sistema implícito, el dominio de dependencia numérico es toda la malla. En este caso no hay un argumento físico simple que nos diga cual debe ser la condición de estabilidad.

Para llegar a la condición de estabilidad (38), supusimos que $\theta < 1/2$. Si, por otro lado, tomamos $\theta \geq 1/2$, debemos regresar a la condición general (37). Sin embargo, en este caso es fácil ver que la condición se satisface siempre. Esto significa que un sistema implícito con $\theta \geq 1/2$ es estable para todo valor de ρ , es decir, es “incondicionalmente estable”.

Esto nos lleva a quizá una de las lecciones más importantes de la teoría de las diferencias finitas: Los esquemas más simples no siempre tienen las mejores propiedades de estabilidad.

3. Sistemas de primer orden

En muchas áreas de la física es común escribir las ecuaciones de evolución de un sistema como sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. Debido a esto se ha dado un mayor desarrollo a los métodos numéricos para este tipo de sistemas.

Un ejemplo clásico de una ecuación a primer orden es la llamada ecuación de advección:

$$\partial_t u + \lambda \partial_x u = 0 , \quad (40)$$

donde λ es una constante. Esta es similar a la ecuación de onda en cuanto a que representa propagación a velocidad constante, pero en este caso la propagación es solo en una dirección.

Es importante señalar que todo sistema de ecuaciones de evolución puede reescribirse como un sistema a primer orden definiendo las derivadas como variables auxiliares, por lo que los métodos desarrollados para este tipo de sistemas son de aplicación general.

Por ejemplo, en el caso de la ecuación de onda (1) podemos definir las variables auxiliares: $\Pi := \partial_t \phi$ y $\Psi := \partial_x \phi$. La ecuación de onda se convierte en

$$\partial_t \Pi - \frac{1}{c^2} \partial_x \Psi = 0 . \quad (41)$$

Este sistema, sin embargo, no es cerrado pues falta una ecuación de evolución para Ψ . Esta puede obtenerse recordando que las derivadas parciales conmutan. Podemos escribir entonces a la ecuación de onda como el siguiente sistema a primer orden:

$$\partial_t \phi = \Pi , \quad (42)$$

$$\partial_t \Psi - \partial_x \Pi = 0 , \quad (43)$$

$$\partial_t \Pi - \frac{1}{c^2} \partial_x \Psi = 0 . \quad (44)$$

3.1. Métodos explícitos clásicos

Existen muchos métodos explícitos clásicos para resolver problemas de primer orden. Tomando como ejemplo la ecuación de advección (40), el método más sencillo simplemente toma diferencias centrales para la derivada espacial y diferencias hacia adelante (“avanzadas”) para la derivada temporal:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \lambda \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 , \quad (45)$$

de donde obtenemos:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\lambda\rho}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) , \quad (46)$$

con $\rho = \Delta t/\Delta x$ el parámetro de Courant.

Este método se conoce como el “método avanzado de Euler”. Es claramente de primer orden por la diferencia temporal avanzada. Peor aún, resulta ser inestable para cualquier valor de ρ y por lo tanto inútil en la práctica.

Un método que resulta ser mucho mejor es el llamado “upwind”, es decir, en la dirección del flujo. Este método usa derivadas de un solo lado en la parte espacial:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda\rho (u_j^n - u_{j-1}^n) , \quad \lambda > 0 \quad (47)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda\rho (u_{j+1}^n - u_j^n) . \quad \lambda < 0 \quad (48)$$

El método sigue siendo de primer orden, ahora por ambas derivadas, pero resulta ser estable para $\lambda\rho < 1$ (debido a que incorpora cierta información sobre la causalidad). Nótese que el método depende del signo de λ , por lo que si λ es una función de la posición que cambia de signo en algún lugar debemos cambiar la manera de calcular la diferencia espacial en ese punto.

Otra variante es el método de Lax-Friedrichs, que se mantiene de segundo orden en el espacio y primer orden en el tiempo pero logra ser estable al tomar un promedio en el espacio en el primer término del método de Euler.

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{\lambda\rho}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) . \quad (49)$$

Existen también métodos de segundo orden tanto en el espacio como en el tiempo que se obtienen a partir de la siguiente expansión en serie de Taylor:

$$\begin{aligned} u(x, t + \Delta t) &= u(x, t) + \Delta t \partial_t u(x, t) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \partial_t^2 u(x, t) + \dots \\ &= u(x, t) - \lambda \Delta t \partial_x u(x, t) + \lambda^2 \frac{(\Delta t)^2}{2} \partial_x^2 u(x, t) + \dots \end{aligned} \quad (50)$$

donde en el segundo renglón se usó la ecuación de advección para cambiar derivadas temporales por espaciales. Esto nos lleva al método de Lax-Wendroff:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\lambda\rho}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{\lambda^2\rho^2}{2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) . \quad (51)$$

El método de Lax-Wendroff se parece al método de Euler salvo por una corrección proporcional a la segunda derivada que introduce un término disipativo. Esta corrección juega dos papeles pues hace a método de segundo orden y a la vez lo hace estable.

Una variante del método de Lax-Wendroff es el método de Beam-Warming que utiliza diferencias ladeadas de segundo orden en lugar de diferencias centradas:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\lambda\rho}{2} (3u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n) + \frac{\lambda^2\rho^2}{2} (u_j^n - 2u_{j-1}^n + u_{j-2}^n) . \quad (52)$$

Este método es también de segundo orden, pero solo es estable para $\lambda > 0$. Para $\lambda < 0$ debe usarse una expresión similar, pero cargada hacia el otro lado.

Los métodos anteriores son muy utilizados todavía y se describen en muchos libros de texto (ver por ejemplo [5]). El problema principal radica en que no son fáciles de generalizar a sistemas no lineales, y además en general tienen problemas cuando las soluciones se vuelven discontinuas.

3.2. Métodos implícitos: Crank-Nicholson

Como vimos en las secciones anteriores, los métodos implícitos en general son más estables que los explícitos. Existe un método implícito muy común para sistemas de ecuaciones de primer orden conocido como el “método de Crank-Nicholson”. Este método no es otra cosa que la versión implícita del método de Euler:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \lambda \frac{(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}) + (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}{4\Delta x} = 0 . \quad (53)$$

Debido a la forma en la que están promediadas las diferencias espaciales en ambos pasos de tiempo, el método no solo resulta ser estable para cualquier valor de ρ (“incondicionalmente estable”), sino que además resulta ser de segundo orden en el espacio y el tiempo.

El problema con este método está en que al ser implícito es difícil de resolver, y para sistemas no lineales es simplemente imposible de utilizar.

3.3. Métodos de líneas: Crank-Nicholson iterado

Existe una clase general de métodos explícitos que se conoce como “métodos de líneas” donde el objetivo es desacoplar las derivadas espaciales de las temporales. La idea básica es utilizar la diferenciación que más nos guste para la parte espacial, y reescribir la ecuación de evolución como:

$$\partial_t u = \hat{\mathcal{O}} u , \quad (54)$$

donde el operador $\hat{\mathcal{O}}$ es un operador en diferencias finitas cuya estructura no nos importa. La ecuación anterior puede verse entonces formalmente como una ecuación diferencial

ordinaria en el tiempo, y se puede resolver utilizando cualquier método para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. De hecho, todos los métodos explícitos para ecuaciones de primer orden de las secciones anteriores pueden reescribirse como un método de líneas.

Los métodos de líneas no siempre son estables. Por ejemplo, si en la ecuación de advección se usan diferencias espaciales centradas y luego en la parte temporal se utilizad Runge-Kutta de segundo orden, el método resultante es de segundo orden pero resulta ser inestable. Utilizar Runge-Kutta de cuarto orden en la parte temporal y diferencias centradas en la parte espacial es en general estable para muchos tipos de ecuaciones, pero no siempre.

Un método de líneas que ha ganado gran popularidad en los últimos años en la relatividad numérica debido a lo general de su aplicación, incluso para sistemas no lineales, y a que en general resulta ser muy robusto (es decir, estable para muchas situaciones) es el llamado “método de Crank-Nicholson iterado” (ICN). Este método intenta resolver el método implícito de Crank-Nicholson utilizando un método iterativo explícito que, de converger, nos llevará a la solución del problema implícito. Este método puede escribirse de forma esquemática como:

$$u_j^{(1)} = u_j^n + \frac{\Delta t}{2} \hat{O}u_j^n, \quad (55)$$

$$u_j^{(i)} = u_j^n + \frac{\Delta t}{2} \hat{O}u_j^{(i-1)}, \quad i = 2, \dots, N \quad (56)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \hat{O}u_j^{(N)}. \quad (57)$$

$$(58)$$

De estas ecuaciones puede verse que el método consiste en una serie de pasos de prueba que aproximan cada vez mejor el valor de la función al tiempo $t + \Delta t/2$, para finalmente utilizar esta aproximación para dar un salto completo hasta $t + \Delta t$.

Es importante hacer aquí una observación. Lo que se busca, finalmente, es una aproximación estable a la solución de la ecuación diferencial original, y no una solución al método de Crank-Nicholson. Es decir, no hace falta iterar hasta converger a la solución de Crank-Nicholson, basta iterar hasta obtener una aproximación estable de segundo orden. Resulta que si uno utiliza el método ICN y se da solo un paso ($N = 0$), nos reducimos al método inestable de Euler. Si se dan dos pasos ($N = 1$), la situación resulta ser equivalente a Runge-Kutta de segundo orden que sigue siendo inestable. Si se dan tres pasos ($N = 2$) tenemos ya una aproximación estable de segundo orden. Debido a esto el método ICN de tres pasos se ha vuelto el estandard en relatividad numérica. ²

²Algunos autores cuentan iteraciones y no pasos, por lo que tres pasos corresponden a solo dos iteraciones ($N = 2$), y se refieren al método que hemos mencionado como “ICN de dos iteraciones”.

Otro punto interesante es el referente a la condición de estabilidad. Podría pensarse que, ya que el método implícito es estable para valores arbitrariamente grandes de Δt , podría ser buena idea iterar hasta converger y así poder tomar pasos de tiempo muy grandes. Sin embargo, esto no es así, pues es posible mostrar que las iteraciones solo convergen si $\lambda\Delta t < \Delta x$, y de otro modo divergen (ver [1, 10]).

Referencias

- [1] M. Alcubierre, B. Brügmann, T. Dramlitsch, J.A. Font, P. Papadopoulos, E. Seidel, N. Stergioulas, and R. Takahashi. Towards a stable numerical evolution of strongly gravitating systems in general relativity: The conformal treatments. *Phys. Rev. D*, 62:044034, 2000. gr-qc/0003071.
- [2] S. Bonazzola and J.-A. Marck. Pseudo-spectral methods applied to gravitational collapse. In C. Evans, L. Finn, and D. Hobill, editors, *Frontiers in Numerical Relativity*, pages 239–253. Cambridge University Press, Cambridge, England, 1989.
- [3] L. E. Kidder and L. S. Finn. Spectral methods for numerical relativity. the initial data problem. *Phys. Rev. D*, 62:084026, 2000.
- [4] L. E. Kidder, M. A. Scheel, S. A. Teukolsky, E. D. Carlson, and G. B. Cook. Black hole evolution by spectral methods. *Phys. Rev. D*, 62:084032, 2000.
- [5] R. J. Leveque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser Verlag, Basel, 1992.
- [6] A. R. Mitchell. *The finite element method in partial differential equations*. J. Wiley and Sons, U.S.A., 1977.
- [7] R. D. Richtmyer and K.W. Morton. *Difference Methods for Initial Value Problems*. Interscience Publishers, New York, 1967.
- [8] B. Szilágyi, Roberto Gómez, N. T. Bishop, and Jeffrey Winicour. Cauchy boundaries in linearized gravitational theory. *Phys. Rev. D*, 62:104006, 2000.
- [9] B. Szilagy, B. Schmidt, and J. Winicour. Boundary conditions in linearized harmonic gravity. *Phys. Rev. D*, 65, 2002. gr-qc/0106026.
- [10] S. Teukolsky. On the stability of the iterated Crank-Nicholson method in numerical relativity. *Phys. Rev. D*, 61:087501, 2000. gr-qc/9909026.