Parcial Final FCII

En este examen se estudia, como tema central, el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD), los cuales fueron abordados previamente en el curso para resolver la ecuación de Navier–Stokes y el problema de la barra.

En este caso, consideraremos una onda electromagnética linealmente polarizada que se propaga en el vacío en dirección z. Bajo esta consideración, las ecuaciones de Maxwell que describen el sistema se reducen a ecuaciones acopladas que describen la evolución temporal de los campos eléctricos y magnéticos de la siguiente forma:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{-1}{\epsilon_0} \frac{\partial H_y(z,t)}{\partial z} \tag{1}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{-1}{\mu_0} \frac{\partial E_x(z,t)}{\partial z} \tag{2}$$

La solución numérica de estas ecuaciones se obtiene a través de la discretización del espacio y el tiempo. Usando el método de diferencias finitas centradas, se obtiene un sistema de la siguiente forma:

$$\frac{\partial E(z,t)}{\partial t} \simeq \frac{E\left(z, t+\Delta t/2\right) - E\left(z, t-\Delta t/2\right)}{\Delta t}, \tag{3}$$

$$\frac{\partial E(z,t)}{\partial z} \simeq \frac{E\left(z+\Delta z/2, t\right) - E\left(z-\Delta z/2, t\right)}{\Delta z}. \tag{4}$$

Introducimos ahora una malla en espacio y tiempo a través de la siguiente notación:

$$E_x(z,t) \quad \longrightarrow \quad E_x(k\,\Delta z,\, n\,\Delta t) \quad \longrightarrow \quad E_x^{k,n}, \tag{5}$$

donde k y n son enteros que indican la discretización en la dirección espacial z y temporal t, respectivamente.

Existe un problema asociado con la estabilidad del sistema, pues al reemplazar las derivadas continuas por esta forma, el algoritmo puede presentar inestabilidades numéricas (comportamientos físicos atípicos)

Para resolver esto, se propone un método de escalonar los campos en espacio y tiempo, es decir:

- calcular el campo electrico E_x en posiciones enteras k y tiempo en posiciones semienteros n +1/2
- Calcular el campo magnético H_y en posiciones semienteras k+1/2 y el tiempo entero

Este método reduce los errores de fase y acopla las derivadas centradas en espacio y tiempo. De esta manera, podemos escribir los campos redefinidos como:

$$\frac{E_x^{k,n+1/2} - E_x^{k,n-1/2}}{\Delta t} = -\frac{H_y^{k+1/2,n} - H_y^{k-1/2,n}}{\epsilon_0\,\Delta z}, \tag{6}$$

$$\frac{H_y^{k+1/2,n+1} - H_y^{k+1/2,n}}{\Delta t} = -\frac{E_x^{k+1,n+1/2} - E_x^{k,n+1/2}}{\mu_0\,\Delta z}. \tag{7}$$

Estas ecuaciones representan en mejor manera el fenómeno físico real, en donde un cambio en el campo eléctrico va a generar un cambio en el campo magnético y viceversa. La influencia del campo eléctrico sobre el magnético induce cambios recíprocos en el campo eléctrico, lo que da lugar a la propagación de la onda por la malla. Como los campos están entrelazados, la simulación debe calcular ambos simultáneamente, como si existieran dos mallas temporalmente desplazadas.

Despejando de la ecuación 6:

$$E_x^{k,n+1/2} - E_x^{k,n-1/2} = -\frac{\Delta t}{\epsilon_0\,\Delta z}\Big(H_y^{k+1/2,n} - H_y^{k-1/2,n}\Big), \tag{8}$$

$$E_x^{k,n+1/2} = E_x^{k,n-1/2} - \frac{\Delta t}{\epsilon_0\,\Delta z}\Big(H_y^{k+1/2,n} - H_y^{k-1/2,n}\Big). \tag{9}$$

Despejando de la ecuación 7:

$$H_y^{k+1/2,n+1} - H_y^{k+1/2,n} = -\frac{\Delta t}{\mu_0\,\Delta z}\Big(E_x^{k+1,n+1/2} - E_x^{k,n+1/2}\Big), \tag{10}$$

$$H_y^{k+1/2,n+1} = H_y^{k+1/2,n} - \frac{\Delta t}{\mu_0\,\Delta z}\Big(E_x^{k+1,n+1/2} - E_x^{k,n+1/2}\Big). \tag{11}$$

En el enunciado del parcial se presenta un ejemplo de malla de discretización que muestra la distribución de los puntos de cálculo en el plano z–t. En esta malla, E_x se evalúa en posiciones espaciales enteras y tiempos semienteros, mientras que H_y se evalúa de manera complementaria, es decir, en posiciones espaciales semienteras y tiempos enteros.

Para simplificar el algoritmos se duplican los indices para eliminar los 1/2 presentes en los indices, así, puede verse que en la malla de Yee, los campos no estan en los mismos puntos pero si están entrelazados, así, se obtiene que:

- k par, n impar

$$E_x^{k,n} = E_x^{k,n-2} - \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \Delta z}\left(H_y^{k+1,n-1} - H_y^{k-1,n-1}\right), \tag{12}$$

- k impar, n par

$$H_y^{k,n} = H_y^{k,n-2} - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta z}\left(E_x^{k+1,n-1} - E_x^{k-1,n-1}\right), \tag{13}$$

Se aplica una renormalización de los campos eléctricos para que tengan las mismas dimensiones que los magnéticos, evitando inestabilidades y facilitando las simulaciones FDTD:

$$\tilde{E} \equiv \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\,E \quad\Longrightarrow\quad E = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}\,\tilde{E}, \tag{14}$$

$$\text{Sustituyendo } \tilde{E} \text{ en (8)} \;:\; \frac{\tilde{E}_x^{k,n+\frac{1}{2}} - \tilde{E}_x^{k,n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = -\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\,\frac{H_y^{k+\frac{1}{2},n} - H_y^{k-\frac{1}{2},n}}{\epsilon_0 \Delta z} \tag{15}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}\,\frac{H_y^{k+\frac{1}{2},n} - H_y^{k-\frac{1}{2},n}}{\Delta z} \tag{16}$$

$$= -c\,\frac{H_y^{k+\frac{1}{2},n} - H_y^{k-\frac{1}{2},n}}{\Delta z}, \tag{17}$$

Multiplicando a ambos lados por Δt y definiendo $\beta \equiv \frac{c\,\Delta t}{\Delta z}$

$$\tilde{E}_x^{k,n+\frac{1}{2}} - \tilde{E}_x^{k,n-\frac{1}{2}} = -\beta\big(H_y^{k+\frac{1}{2},n} - H_y^{k-\frac{1}{2},n}\big) \tag{18}$$

$$\tilde{E}_x^{k,n+\frac{1}{2}} = \tilde{E}_x^{k,n-\frac{1}{2}} + \beta\big(H_y^{k-\frac{1}{2},n} - H_y^{k+\frac{1}{2},n}\big). \tag{19}$$

Aplicando un procedimiento análogo sobre la ecuación 11 se obtiene:

$$H_y^{k+\frac{1}{2},\,n+1} - H_y^{k+\frac{1}{2},\,n} = -\beta\big(\tilde{E}_x^{k+1,n+\frac{1}{2}} - \tilde{E}_x^{k,n+\frac{1}{2}}\big) \tag{20}$$

$$H_y^{k+\frac{1}{2},\,n+1} = H_y^{k+\frac{1}{2},\,n} + \beta\big(\tilde{E}_x^{k,n+\frac{1}{2}} - \tilde{E}_x^{k+1,n+\frac{1}{2}}\big). \tag{21}$$

Duplicando el valor de los indices y despejando se obtiene:

$$E_x^{k,n} = E_x^{k,n-2} + \beta\left(H_y^{k-1,n-1} - H_y^{k+1,n-1}\right)$$

$$H_y^{k,n} = H_y^{k,n-2} + \beta\left(E_x^{k-1,n-1} - E_x^{k+1,n-1}\right)$$

OJO

- Los pasos espacial Δz y temporal Δt deben elegirse garantizando la estabilidad del algoritmo.
- Las escalas de espacio y tiempo están determinadas por la longitud de onda y la frecuencia de la onda en propagación. Por ello, se impone como requisito mínimo que $\Delta z \leq \frac{\lambda}{10}$, lo que significa que al menos 10 puntos de la malla deben cubrir una longitud de onda. De esta manera se evita la deformación de la onda durante la simulación.
- El paso temporal se determina usando la condición de estabilidad de Courant $\beta = \frac{c\Delta t}{\Delta z} \leq \frac{1}{2}$

Propuesta de desarrollo:

0.1 Simulación de propagación de onda sinusoidal con FDTD

El desarrollo de la implementación inicial del .h y .cpp de las clases principales se basó en la experiencia adquirida en las tareas 02 y 03, correspondientes a historias y a la solución de la ecuación de Navier-Stokes, lo que permitió aprovechar esa estructura de programación para organizar el código.

En este caso, debemos implementar el algoritmo FDTD en una red unidimensional en z con 200 nodos para simular la propagación de una onda electromagnética linealmente polarizada en el vacío.

Para abordar este primer punto, lo primero que debemos hacer es desarrollar el núcleo del código. En este caso, implementamos una modularización del proyecto, por lo que desde un inicio se debe organizar el código en una estructura tipo Makefile, siguiendo la siguiente forma:

- **include:** Esta carpeta contiene los archivos `.h` que definen las inicializaciones y declaraciones principales.

  Dentro de `include` se encuentra `fdtd.h`, que declara todas las clases principales para la ejecución del proyecto:

  - **Grid:** Define la geometría del sistema.
  - **Fields:** Maneja todo lo relacionado con los campos físicos, incluyendo la inicialización de los campos eléctrico y magnético, su evolución en el tiempo, y la implementación de las condiciones de frontera.
  - **ComputeFields:** Implementa el método FDTD para evolucionar el sistema. En esta clase también se ejecuta la simulación y se guardan los resultados en archivos `.txt`, estos resultados se extraen y pueden analizarse posteriormente.

- **src:** Esta carpeta incluye los archivos .cpp que implementan las clases definidas en fdtd.h.

  La implementación se realizó siguiendo la teoría enunciada anteriormente, donde los campos eléctricos y magnéticos se ubican en mallas entrelazadas en espacio y tiempo.

  De este código es importante mencionar algunos aspectos:

  - Definí directamente $\beta = dt/dz$, por lo que en el `main` es posible asignar un valor a β directamente, o bien modificar dt o dz para ajustarlo.
  - Inicialmente solo existía una condición de frontera, debido al desarrollo del punto 2, y, para no modificar toda la clase `Fields`, modifiqué el método de *boundaryConditions* de tal forma que permite asignar dos tipos de condiciones de frontera y seleccionar cuál usar al compilar el código. Los tipos disponibles son: periódicas y de Dirichlet.
  - Agregué líneas de código para limpiar el archivo `campos.txt`, ya que al hacer debugging encontré que podría estar sobreescribiéndose y conservando datos de compilaciones anteriores.
  - Modifiqué la generación del nombre del archivo .txt para guardar simulaciones bajo diferentes configuraciones, facilitando la organización y comparación de resultados.

- **carpeta general:** En la carpeta general se encuentran algunos archivos importantes para la compilación del código:

- **main.cpp** contiene el código principal donde se inicializan las variables clave para ejecutar la simulación. En este archivo es posible ajustar la cantidad de pasos tras los cuales se guarda la información en los archivos .txt.

  Para la primera parte, se eligió un paso temporal de $t = 200$, garantizando que la evolución se mantuviera en órdenes de magnitud que faciliten la ilustración gráfica. Además, se fijaron inicialmente $dz = 0.1$ y $\beta = 0.2$ en el primer ejercicio, aunque estos valores se fueron modificando para ejecutar y compilar los distintos casos que se pedian en el segundo punto.
- **makefile:**Contiene instrucciones para compilar el proyecto de manera modular (Este corresponde al utilizado en clase).

El archivo .txt que se extrae del código tiene la siguiente estructura:

Columna	Descripción
1	Paso temporal guardado
2	Índice espacial del nodo ($0 \leq k \leq N-1$)
3	Campo eléctrico en el nodo k y tiempo t
4	Campo magnético en el nodo k y tiempo t

Table 1: Estructura del archivo `campos.txt`. Cada bloque de N filas corresponde a una captura del estado completo en el tiempo t

Una vez la simulación corre de manera adecuada, se extraen algunos datos que son analizados en el archivo .ipynb que se encuentra en la carpeta python

0.2 Estudio de condiciones de frontera y estabilidad numérica

En el segundo punto se implementaron condiciones de frontera de tipo Dirichlet, es decir, condiciones de frontera que se anulan en las que el campo se anula en los extremos del dominio. Bajo los mismos parámetros fijos de β y dz utilizados previamente para las condiciones periódicas, se analizó el comportamiento del sistema.

Se observa que, con condiciones de frontera Dirichlet, aparece un patrón ondulatorio localizado en los bordes. Este efecto podría identificarse como una perturbación que se propaga desde los extremos hacia el interior, siendo más evidente en los tiempos finales de la simulación (T_f)-, de hecho, para el caso comparativo en el cuál se preservan los parámetros del primer punto, es notorio el cambio que tiene la función para valores de tiempo finales, pues la perturbación que se genera en este caso modifica significativamente la onda.

En el caso de condiciones de frontera periódicas,si bien las perturbaciones son menores, si existen unos picos observados en los extremos, estos no provienen del tipo de frontera en sí, sino del valor de β, que genera inestabilidades propias del esquema FDTD. Esto sugiere que, incluso con condiciones periódicas, la estabilidad numérica dependerá significativamente de la elección de los parámetros-. Durante la implementación, estas inestabilidades se evidencian aún tomando valores que respeten la condición de estabilidad de Courant.

En la segunda parte, al variar los valores de Δt y Δz, se estudió la estabilidad de la simulación:

- Con $dz = 1.0$ y $dt = [0.2, 0.3, 0.5]$: se aprecia que, a medida que Δt aumenta, la solución muestra crecimientos abruptos, con escalas cada vez mayores. Esto refleja la pérdida de estabilidad para valores grandes de Δt.

- Con $dt = 0.2$ y $dz = [0.5, 1, 2]$: el comportamiento es opuesto; al aumentar Δz, la magnitud del ruido disminuye. En particular, para $dz = 2$ la evolución temporal resulta más clara y estable, logrando incluso la posibilidad de eviencian el comportamiento de la onda y las evoluciones.

Finalmente, se analizaron casos en los que no se cumple la condición de Courant ($\beta > 0.5$). Para $\beta = [1, 2]$ se comprobó que los valores se disparan rápidamente a escalas crecientes, tal como predice la teoría. Cabe resaltar que incluso en el límite $\beta = 0.5$ persisten inestabilidades, tal como puede notarse en las simulaciones con paso temporla, las mejores imagenes se obtienen a valores muy pequeños de beta, lo que confirma la sensibilidad del esquema FDTD a esta condición.

Se recomendaría en un próximo análisis tomar valores de β más extremos $\beta \ll 1$ con el fin de identificar regímenes de propagación distintos y el comportamiento bajo estas configuraciones.

Si bien durante el desarrollo del proyecto fue posible encontrar algunas configuraciones sobre las cuales pudiese notarse el comportamiento esperado, muchos casos aún faltan por ser explorados.