

Equação De Onda Escalar E FDTD Em Uma Dimensão

J. E. Oliveira, V. R. Leonardi and L. R. d. Souza

Abstract—Esse relatório tem como objetivo detalhar o uso do método FDTD para representação do comportamento de ondas em um meio computacional, partindo da equação de onda escalar em uma dimensão e levando a discussões sobre dispersão numérica, velocidade de fase e estabilidade.

Keywords— FDTD em 1 dimensão; equação de onda escalar; simulação de ondas.

I. INTRODUÇÃO

A EQUAÇÃO de onda escalar é uma equação diferencial de segunda ordem com derivadas parciais. Sua importância se dá ao descrever a propagação das ondas, fator importante em áreas como acústica, dinâmica de fluidos e eletromagnetismo. No caso unidimensional (1), a equação descreve a propagação ao longo do eixo x e do tempo.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

Para que seja possível analisar o comportamento da onda em um meio computacional, é necessário uma discretização da equação escalar. Isso se dá com a utilização do método FDTD, gerando uma solução numérica que pode ser simulada por um computador.

A introdução do método FDTD também gera discussões sobre dispersão numérica, velocidade de fase e estabilidade, que devem ser levadas em conta na construção de um programa capaz de lidar com a questão de propagação de onda.

Para exemplificar e entender o método e suas aplicações, foram resolvidos os exercícios 2.4 a 2.11 do capítulo 2 do livro *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, por A. Taflov e S. C. Hagness. Esses exercícios requerem a construção de programas que simulem a propagação de onda através do método FDTD.

Foi escolhido o programa Octave, para a construção dos programas necessários, por ser livre e conter métodos de fácil acesso para representação gráfica dos resultados.

II. FDTD PARA EQUAÇÃO DE ONDA ESCALAR

Dada a equação (1), considere a representação $u_i^n = u(x_i, t_n)$. Tomando a expansão de Taylor de $u(x, t_n)$ sobre o ponto x_i até o ponto $x_i + \Delta x$, mantendo t_n fixo:

$$(2.1) \quad u_{i+1}^n = u_i^n + \Delta x \frac{\partial u_i^n}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial x^3} + \dots$$

De forma similar, considerando a expansão de Taylor ao ponto $x_i - \Delta x$, mantendo t_n fixo, tem-se

$$(2.2) \quad u_{i-1}^n = u_i^n - \Delta x \frac{\partial u_i^n}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 u_i^n}{\partial x^3} + \dots$$

Somando as equações (2.1) e (2.2), encontra-se:

$$(2.3) \quad u_{i+1}^n + u_{i-1}^n = 2u_i^n + (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 u_i^n}{\partial x^4} + \dots$$

Resolvendo para a derivada de segunda ordem:

$$(2.4) \quad \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2} - \frac{(\Delta x)^2}{12} \frac{\partial^4 u_i^n}{\partial x^4} - \dots$$

Os termos a partir da derivada de quarta ordem se aproximarão de zero a medida que Δx diminui. Pode-se então agrupá-los em um único termo $O[(\Delta x)^2]$, pois seu componente de maior valor dependerá de $(\Delta x)^2$.

$$(2.5) \quad \frac{\partial^2 u_i^n}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2]$$

É dito que a equação 2.5 tem precisão de segunda ordem e é a aproximação por diferenças centrais da derivada no espaço de segunda ordem.

Por analogia, encontra-se uma aproximação para a derivada de segunda ordem no tempo:

¹J. E. Oliveira, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, Brasil, jeosvici@usp.br, NUSP 10716491

V. R. Leonardi, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, Brasil, vitorleonardi@usp.br, NUSP 10716567

L. R. de Souza, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, Brasil, leo_souza@usp.br, NUSP

Corresponding author: Julio Eiji Oliveira

$$\frac{\partial^2 u_i^n}{\partial t^2} = \frac{u_i^{n+1} + u_i^{n-1} - 2u_i^n}{(\Delta t)^2} + O[(\Delta t)^2] \quad (2.6)$$

Substituindo (2.5) e (2.6) em (1), obtém-se:

$$\frac{u_i^{n+1} + u_i^{n-1} - 2u_i^n}{(\Delta t)^2} + O[(\Delta t)^2] = v^2 \left(\frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2] \right) \quad (2.7)$$

Sabendo que essa aproximação tem precisão de segunda ordem no tempo e espaço, pode-se ignorar os termos de erro e resolver 2.7 para o valor futuro de u para chegar na equação explícita de u_i^{n+1} :

$$u_i^{n+1} \simeq (v \Delta t)^2 \left[\frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2} \right] + 2u_i^n - u_i^{n-1} \quad (2.8)$$

Essa equação depende apenas de valores anteriores a n+1 e portanto pode ser calculada a partir de dados já conhecidos. Discretizando x e t de tal forma que $x_i = i \Delta x$ e $t_n = n \Delta t$, com i e n inteiros, a equação 2.8 é capaz de descrever a propagação de uma onda por meios computacionais.

III. DISPERSÃO

Sejam λ o comprimento de onda, f a frequência, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ o número de onda e $\omega = 2\pi f$ a frequência angular. Tomando a solução senoidal de (1), pode-se explorar a relação de dispersão no caso contínuo e no caso do FDTD:

$$u(x, t) = e^{j(\omega t - kx)} \quad (3.1)$$

Onde j é a unidade imaginária. Substituindo essa solução na equação (1):

$$(j\omega)^2 e^{j(\omega t - kx)} = v^2 (-jk)^2 e^{j(\omega t - kx)} \quad (3.2)$$

Resolvendo a equação tem-se:

$$k = \pm \frac{\omega}{v} \quad (3.3)$$

Essa equação indica uma relação linear entre o número de onda e a frequência angular.

No vácuo, a velocidade v é constante. Dessa forma, é possível exprimir a velocidade de fase da onda:

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \pm v \quad (3.4)$$

Com os resultados de (3.3) e (3.4), pode-se concluir que ondas propagantes no caso contínuo não apresentam efeitos de dispersão no vácuo.

No caso do FDTD, pode-se obter a relação de dispersão numérica aplicando um processo similar. Considerando a mesma solução dada por (3.1), porém agora discretizada no tempo e espaço por (x_i, t_n) , e $\tilde{k} = k_{real} + j k_{img}$ o número de onda do caso numérico:

$$u_i^n = e^{j(\omega n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} \quad (3.5)$$

Acoplando essa solução na equação (1):

$$(3.6) \quad \frac{e^{j(\omega[n+1]\Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} - 2e^{j(\omega n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} + e^{j(\omega[n-1]\Delta t - \tilde{k} i \Delta x)}}{\left(\frac{v \Delta t}{\Delta x}\right)^2} = \frac{e^{j(\omega n \Delta t - \tilde{k}[i+1]\Delta x)} - 2e^{j(\omega n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} + e^{j(\omega n \Delta t - \tilde{k}[i-1]\Delta x)}}{\left(\frac{\Delta x}{v \Delta t}\right)^2} \quad \square$$

Simplificando, organizando os termos e dividindo por 2 temos:

$$(3.7) \quad \frac{e^{j\omega \Delta t} + e^{-j\omega \Delta t}}{2} = \left(\frac{v \Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left(\frac{e^{j\tilde{k} \Delta x} + e^{-j\tilde{k} \Delta x}}{2} - 1 \right) + 1$$

Aplicando a fórmula de Euler encontra-se a relação de dispersão para o método numérico:

$$\cos(\omega \Delta t) = \left(\frac{v \Delta t}{\Delta x}\right)^2 [\cos(\tilde{k} \Delta x) - 1] + 1 \quad (3.8)$$

$$\tilde{k} = \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1} \left[1 + \left(\frac{\Delta x}{v \Delta t}\right)^2 [\cos(\omega \Delta t) - 1] \right] \quad (3.9)$$

Comparadas à relação (3.3), as relações (3.8) e (3.9) são mais complexas e apresentam características relevantes para certos valores de Δx e Δt .

Quando Δx e Δt se aproximam de zero, a equação (3.9) pode ser resolvida por uma expansão de Taylor dos cossenos, gerando:

$$\tilde{k} = \frac{1}{\Delta x} (k \Delta x) = k \quad (3.10)$$

Nota-se então que para passos que tendem a zero no espaço e no tempo o número de onda da solução numérica é o próprio número de onda da solução contínua, gerando uma velocidade de fase constante no vácuo. Ou seja, a onda simulada pelo FDTD não apresenta dispersão numérica.

O segundo caso se refere ao “passo mágico”, onde $v \Delta t = \Delta x$. Substituindo em (3.9) chega-se à relação:

$$\tilde{k} = \frac{\omega \Delta t}{v \Delta x} = k \quad (3.11)$$

Mais uma vez o número de onda da solução numérica é o próprio número de onda da solução contínua no vácuo. Esse resultado indica que, independente da escolha dos passos de tempo e espaço, é possível encontrar uma solução sem dispersão numérica pelo método FDTD.

Fora desses dois casos específicos é preciso explorar a solução geral. Define-se então o número de Courant (S) e o número de passos por comprimento de onda (N_λ).

$$S = \frac{v \Delta t}{\Delta x} \quad (3.12)$$

$$N_\lambda = \frac{\lambda}{\Delta x} \quad (3.13)$$

É então possível escrever (3.9) como:

$$\tilde{k} = \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1} \left[1 + \left(\frac{1}{S} \right)^2 \left[\cos \left(\frac{2\pi S}{N_\lambda} \right) - 1 \right] \right] \quad (3.14)$$

ou:

$$\tilde{k} = \frac{1}{\Delta x} \cos^{-1}(\zeta) \quad (3.15)$$

onde:

$$\zeta = 1 + \left(\frac{1}{S} \right)^2 \left[\cos \left(\frac{2\pi S}{N_\lambda} \right) - 1 \right] \quad (3.16)$$

Nota-se que \tilde{k} assume um valor complexo quando $\zeta = -1$, dependendo de S e N_λ . Resolvendo para o número de passos nesse valor de transição.

$$N_{\lambda| \text{transição}} = \frac{2\pi S}{\cos^{-1}(1 - 2S^2)} \quad (3.17)$$

Para valores maiores que $N_{\lambda| \text{transição}}$, a velocidade de fase pode ser dada por:

$$\tilde{v}_p = \frac{\omega}{\tilde{k}} = \frac{2\pi f \Delta x}{\cos^{-1}(\zeta)} = \frac{2\pi}{N_\lambda \cos^{-1}(\zeta)} c \quad (3.18)$$

Para valores menores, ela é dada por:

$$\tilde{v}_p = \frac{2}{N_\lambda} c \quad (3.19)$$

Porém, nesse caso, a velocidade sofre o efeito, por \tilde{k} ser complexo, de uma constante de atenuação em cada ponto da malha do FDTD:

$$\alpha \Delta x = -\ln(-\zeta - \sqrt{\zeta^2 - 1}) \quad (3.20)$$

O exercício 2.4 explora os efeitos da escolha de N_λ sobre a velocidade de fase da onda e sobre a constante de atenuação. Para esse exercício o número de Courant é

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} :$$

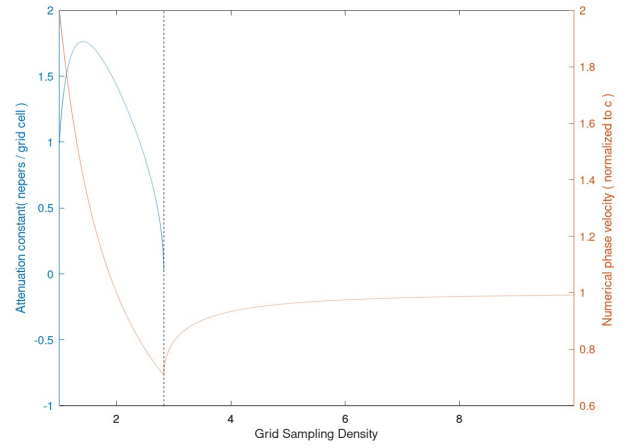


Figura 1. Variação da velocidade normalizada de fase da onda e da constante de atenuação em função do número de passos por comprimento de onda para $S = 1/\sqrt{2}$.

Na Fig.1, obtida na realização do exercício 2.4, pode-se ver que a partir de $N_\lambda = 3$ a constante de atenuação zera e a velocidade da onda se aproxima de $1 \cdot c$ conforme a densidade de passos em cada ponto aumenta, se aproximando da solução sem dispersão.

Os exercícios 2.5 e 2.6 exploram a porcentagem de erro numérico da velocidade de fase, em relação a velocidade da luz no vácuo, conforme se aumenta a densidade de passos. A Fig.2 foi obtida na resolução do exercício 2.5, com $S = 0.5$, e a

Fig.3 na resolução do 2.6, com $S = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Dessas figuras é possível observar que o erro diminui com o inverso do quadrado de N_λ , o que é indicativo da precisão de segunda ordem do FDTD. Além disso é possível notar que na Fig3. o erro decai mais rapidamente do que na Fig.2, esse efeito se deve ao S da Fig3. Estar mais próximo passo mágico $S=1$.

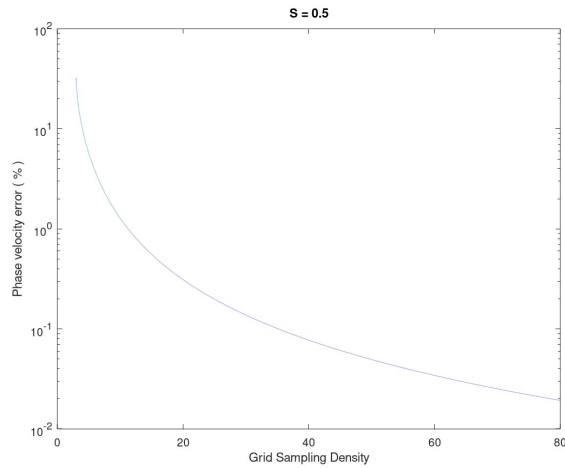


Figura 2. Porcentagem de erro da velocidade de fase relativa a velocidade da luz no vácuo, para $S=0.5$.

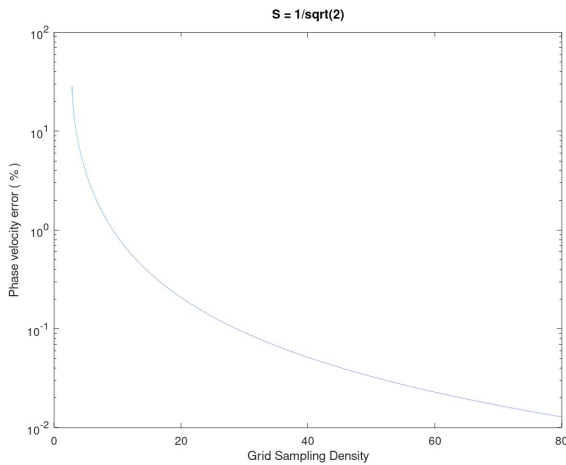


Figura 3. Porcentagem de erro da velocidade de fase relativa a velocidade da luz no vácuo, para $S=1/\sqrt{2}$.

Finalmente, o exercício 2.7 põe em prática a equação de propagação de onda do FDTD, obtida em (2.8), para analisar os efeitos que diferentes valores de S têm sobre a onda.

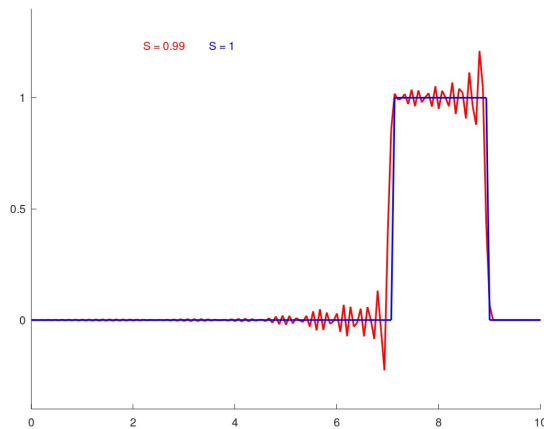


Figura 4. Propagação de um pulso retangular para $S=0.99$ e $S=1$.

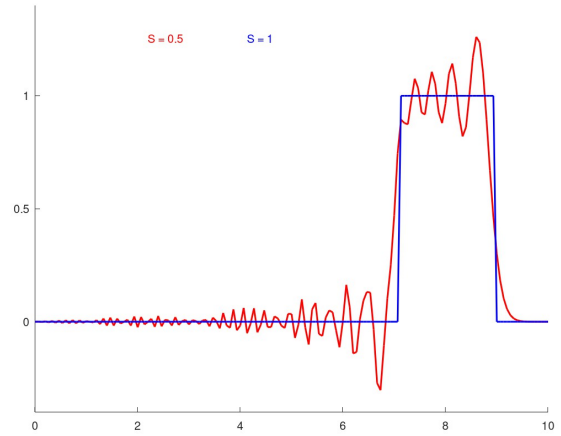


Figura 5. Propagação de um pulso retangular para $S=0.5$ e $S=1$.

Quando $S=1$, a onda retangular mantém sua forma e tamanho durante toda a simulação e sua velocidade de fase deve ser c , já que não há dispersão. Na Fig.4 pode-se ver a distorção na amplitude da onda em forma de oscilações quando $S=0.99$, apenas 1% abaixo do passo mágico. Além disso, a onda distorcida apresenta uma pequena porção a frente da onda retangular, apresentando uma velocidade de fase maior que c .

Na Fig.5, com $S=0.5$, os efeitos de dispersão são bem maiores: a onda apresenta oscilações de maior amplitude e está muito mais a frente da onda retangular.

O exercício 2.8 pede experimentos similares, porém para um pulso Gaussiano:

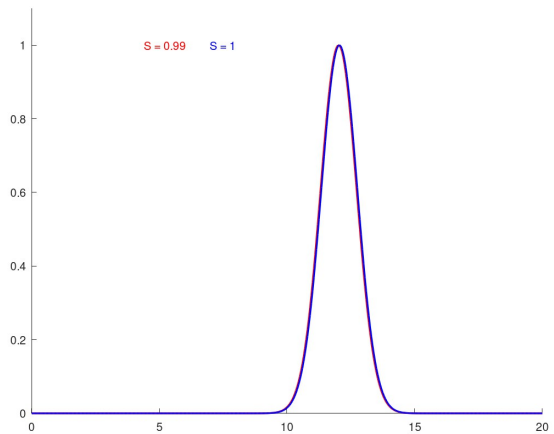


Figura 6. Propagação de um pulso Gaussiano para $S=0.99$ e $S=1$.

Para $S=0.99$, na Fig.6, é possível ver que praticamente não existe distorção em relação ao pulso com $S=1$. A distorção na onda com $S=0.5$, na Fig.7, também é pequena, apesar de S estar mais longe do passo mágico. Desses resultados é possível concluir que o pulso Gaussiano sofre significativamente menos os efeitos da dispersão numérica do que o pulso retangular.

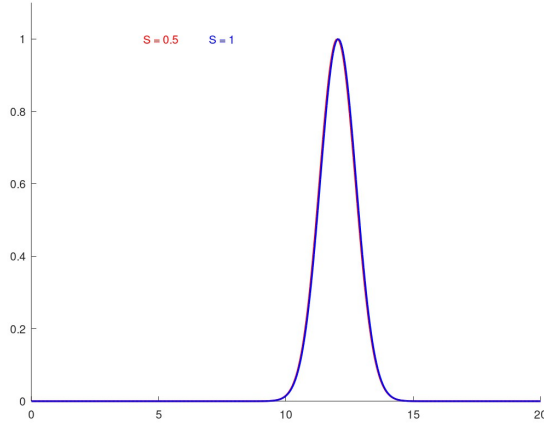


Figura 7. Propagação de um pulso Gaussiano para $S=0.5$ e $S=1$.

O exercício 2.9 requer a replicação dos resultados gráficos obtidos na transmissão e reflexão de um pulso Gaussiano na interface do espaço livre com um material sem perdas com velocidade de fase $c/4$:

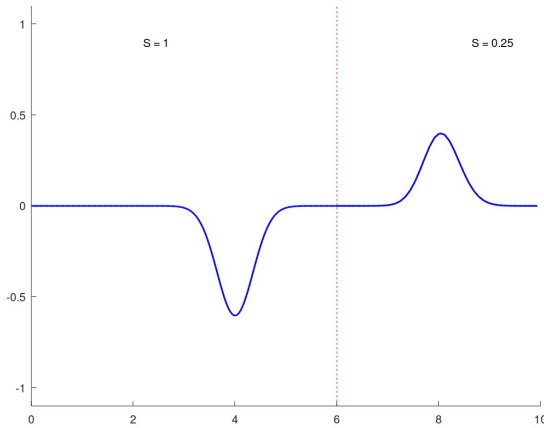


Figura 8. Propagação e reflexão do pulso Gaussiano em uma interface com um material de $S=0.25$.

A Fig.8 apresenta o pulso pós reflexão. A onda retornante apresenta amplitude de aproximadamente 0.6, enquanto a onda incidente tem amplitude aproximadamente 0.4. Esses resultados estão próximos dos esperados teoricamente e mostram a eficácia do método FDTD de simular o comportamento da propagação de ondas.

IV. ESTABILIDADE NÚMERICA

Enquanto a escolha de passos no tempo e espaço inapropriados podem levar a erros na velocidade de propagação das ondas, a escolha de um passo de tempo muito grande pode afetar a estabilidade da resposta do FDTD.

Para encontrar um limitante para o passo de tempo, pode-se partir da solução senoidal do FDTD (3.5). Porém, dessa vez

considera-se a possibilidade da frequência angular ser complexa: $\tilde{\omega} = \omega_{real} + \omega_{imag}$.

$$u_i^n = e^{j(\tilde{\omega} n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} = e^{-\omega_{imag} n \Delta t} e^{j(\omega_{real} n \Delta t - \tilde{k} i \Delta x)} \quad (4.1)$$

Resolvendo (3.8), porém agora para a frequência:

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{\Delta t} \cos^{-1} [S^2 [\cos(\tilde{k} \Delta x) - 1] + 1] \quad (4.2)$$

ou:

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{\Delta t} \cos^{-1}(\xi) \quad (4.3)$$

Onde:

$$\xi = S^2 [\cos(\tilde{k} \Delta x) - 1] + 1 \quad (4.4)$$

De (4.4) observa-se que $-1 \leq \xi \leq 1$ para qualquer valor de k . Para os valores de -1 a 1 , que coincidem com $0 \leq S \leq 1$, a equação é estável. Já para os valores de $1 - 2S^2 \leq \xi \leq -1$ a frequência angular apresenta um fração imaginária, gerando instabilidade na propagação da onda. Esse intervalo coincide com valores de $S > 1$.

Como resultado da instabilidade nos casos $1 - 2S^2 \leq \xi \leq -1$ tem-se que a velocidade de fase da onda será distorcida da forma que:

$$v_p = \frac{c}{S} \quad (4.5)$$

E que o algoritmo irá crescer exponencialmente gerando cada vez mais erros.

Chega-se então a conclusão que para impedir essa instabilidade deve-se certificar que $S < 1$ e portanto

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c}.$$

O exercício 2.10 trata justamente dos casos de instabilidade no FDTD, assumindo um valor de $S=1.0005$.

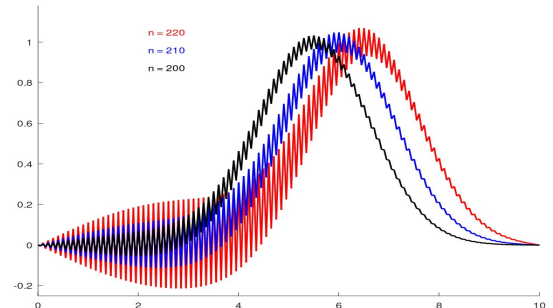


Figura 9. Instabilidade na propagação do pulso Gaussiano com $S=1.0005$.

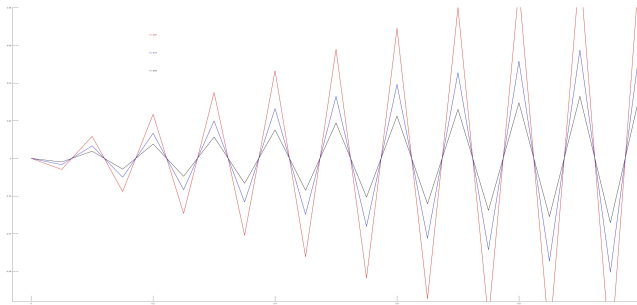


Figura 10. Visão expandida da figura 9 no começo do algoritmo.

A Fig.9 mostra a instabilidade do sistema com $S > 1$, com um pulso Gaussiano. Três ondas com diferentes resoluções de malha apresentam ruído, principalmente nas caudas, que cresce conforme o número de passos no tempo aumenta. A Fig.10 é uma visão expandida da Fig.9, logo no começo das ondas, nas posições perto do 0.

O exercício 2.11 por outro lado, explora a situação em que apenas um ponto da malha contém um valor de $S > 1$. Apenas no ponto $i=90$ a constante de estabilidade de Courant $S = 1.075$, nos outros pontos ela apresenta o valor $S=1$.

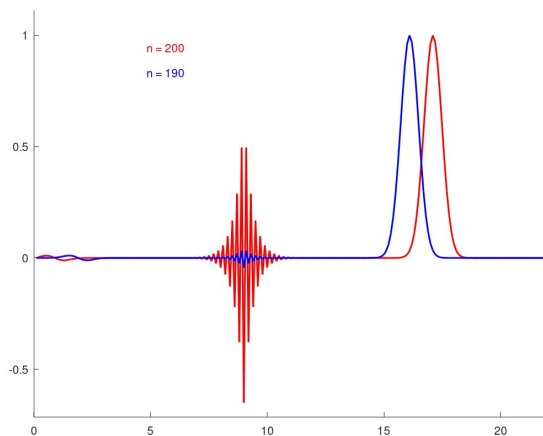


Figura 11. A instabilidade inicia no ponto onde $S=1.075$.

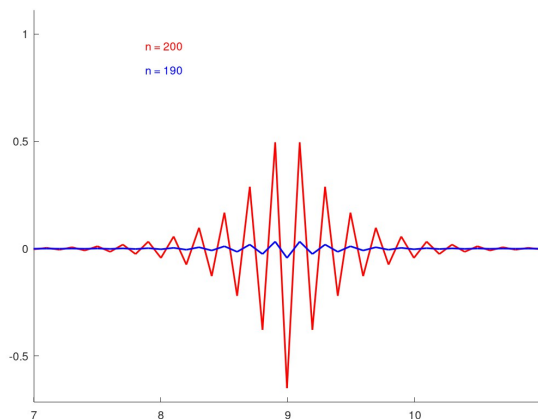


Figura 12. Visão expandida da figura 11 no ponto de instabilidade.

As Fig.11 e 12 mostram que a instabilidade se inicia no ponto de $S=1.075$, se expandindo simetricamente e exponencialmente pela onda, diferente do que ocorre quando toda a malha não atende as condições de estabilidade.

V. CONCLUSÃO

Assim como no caso de linhas de transmissão, o algoritmo FDTD providencia uma maneira de modelar o comportamento de ondas com o uso de computadores. Para o caso da equação de onda escalar a solução numérica apresenta uma característica peculiar: ela é capaz de representar a solução exata para a propagação de onda, desde de que o valor do passo mágico, $S=1$, seja atendido. Nos casos em que isso não for atingido, a precisão de segunda ordem do método ainda garante uma boa margem de erro ao se aumentar a densidade de pontos na malha.

AGRADECIMENTOS

Agradecimento especial para o Monitor PAE Luiz Felipe Machado Votto para o Prof. Dr. Leonardo André Ambrosio.

REFERÊNCIAS

- [1] A. Taflove e S. C. Hagness. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference TimeDomain Method. Norwood: Artech House, 2a. ed., 2000.