# 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 númerica, velocidade de fase e estabilidade. Os códigos utilizados estão disponíveis no repositório que se encontra no final deste relatório.

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 fluídos e eletromagnetismo. No caso unidimensional (1), a equação descreve a propagação ao longo do eixo x e do tempo.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1}$$

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 Electrdynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, por A. Taflove 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.

Corresponding author: Julio Eiji Oliveira

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

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

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

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

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

Resolvendo para a derivada de segunda ordem:

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

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

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

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:

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>J. 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

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

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

$$\frac{u_i^{n+1} + u_i^{n-1} - 2u_i^n}{(\Delta t)^2} + O[(\Delta t)^2] = v^2 \left( \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2] \right)$$
(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 explicita de u<sub>i</sub><sup>n+1</sup>:

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

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  $\lambda$  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:

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

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

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

Resolvendo a equação tem-se:

$$k = \pm \frac{\omega}{\nu} \tag{3.3}$$

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:

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \pm v \tag{3.4}$$

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 similiar. 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:

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

Acoplando essa solução na equação (1):

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

Simplificando, organizando os termos e dividindo por 2 temos:

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

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

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

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

Quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$  se aproximam de zero, a equação (3.9) pode ser resolvida por uma expansão de Taylor dos cossenos, gerando:

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

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  $v \Delta t = \Delta x$ . Substituíndo em (3.9) chega-se à relação:

$$\tilde{k} = \frac{\omega \Delta t}{v \Delta t} = k \tag{3.11}$$

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 ( $N_{\lambda}$ ).

$$S = \frac{v \Delta t}{\Delta x} \tag{3.12}$$

$$N_{\lambda} = \frac{\lambda}{\Delta x} \tag{3.13}$$

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:

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

onde:

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

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

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

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

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

Para valores menores, ela é dada por:

$$\tilde{v_p} = \frac{2}{N_{\lambda}}c\tag{3.19}$$

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

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

O exercício 2.4 explora os efeitos da escolha de  $N_{\lambda}$  sobre a velocidade de fase da onda e sobre a constante de atenuação. Para esse exercício o número de Courant é

$$S = \frac{1}{\sqrt{(2)}}$$

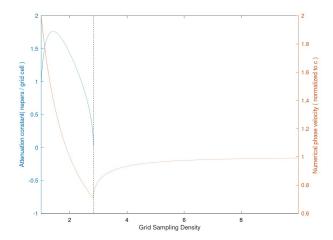


Figura 1. Variação da velocidade normalizada de fase da onda e da constante de atenuação em função do número de passos por comprimento de onda para S=1/sqrt(2).

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\*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  $N_{\lambda}$ , 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.

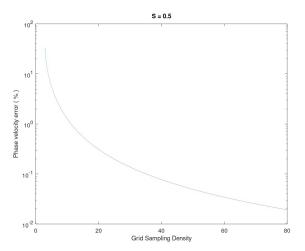


Figura 2. Porcentagem de erro da velocidade de fase relativa a velocidade da luz no vácuo, para S=0.5.

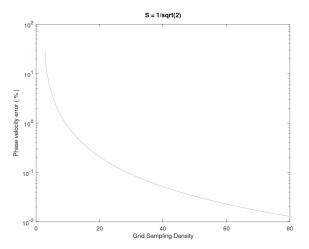


Figura 3. Porcentagem de erro da velocidade de fase relativa a velocidade da luz no vácuo, para S=1/sqrt(2).

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.

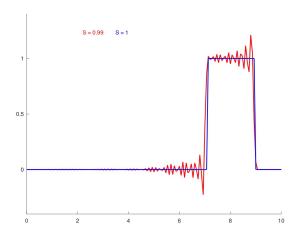


Figura 4. Propagação de um pulso retangular para S=0.99 e S=1.

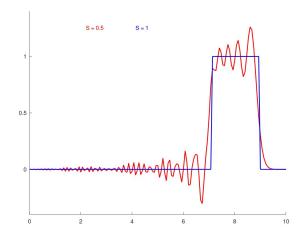


Figura 5. Propagação de um pulso retangular para S=0.5 e S=1.

Quando S=1, a onda retangular mantem 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:

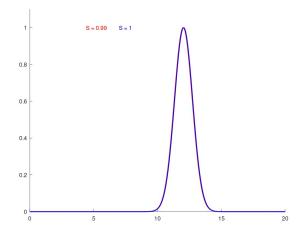


Figura 6. Propagação de um pulso Gaussiano para S=0.99 e S=1.

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.

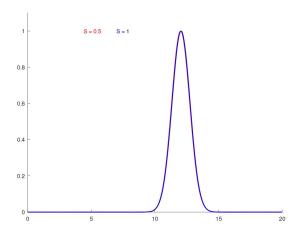


Figura 7. Propagação de um pulso Gaussiano para S=0.5 e S=1.

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

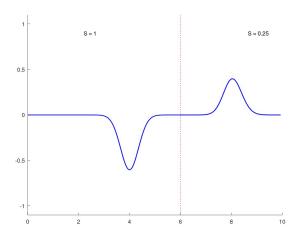


Figura 8. Propagação e reflexação do pulso Gaussiano em uma interfaçe com um material de S=0.25.

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 eficacia 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 possiblidade da frequência anguar ser complexa:  $\tilde{\omega} = \omega_{real}^{\bar{\nu}} + \omega_{imag}^{\bar{\nu}}$ .

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

Resolvendo (3.8), porém agora para a frequência:

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

ou:

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

Onde:

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

De (4.4) observa-se que  $1-2S^2 \le \xi \le 1$  para qualquer valor de k. Para os valores de -1 a 1, que coincidem com 0<= S <=1, a equação é estável. Já para os valores de  $1-2S^2 \le \xi \le -1$  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  $1-2S^2 \le \xi \le -1$  tem-se que a velocidade de fase da onda será distorcidade forma que:

$$v_p = \frac{c}{S} \tag{4.5}$$

E que o algoritmo irá crescer exponecialmente 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.

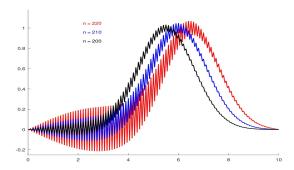


Figura 9. Instabilidade na propagação do pulso Gaussiano com S=1.0005.

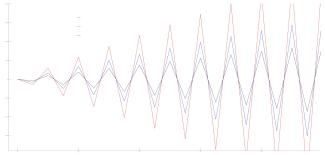


Figura 10. Visão expandida da figura 9 no começo do algoritmo.

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 crese 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 stabilidade de Courant S = 1.075, nos outros pontos ela apresenta o valor S=1.

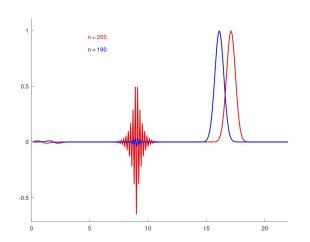


Figura 11. A instabilidade inicia no ponto onde S=1.075.

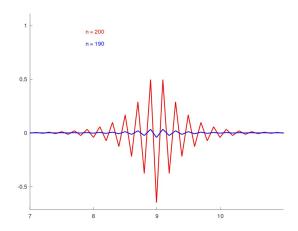


Figura 12. Visão expandida da figura 11 no ponto de instabilidade.

As Fig.11 e 12 mostram que a instabilidade se inicia no ponto de S=1.075, se expandindo simetricamente e exponecialmente 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 caracteristica peculiar: ela é capaz de representara 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.

#### **LINKS**

Todos os códigos utilizados para o relatório foram feitos e testados somente no Octave. Eles podem se encontrados em: https://github.com/VitorLeonardi/OndasEM/tree/mast er/Trabalho%202

#### **AGRADECIMENTOS**

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

## REFERÊNCIAS

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