Introdução a Métodos Computacionais em Física
Módulo 10

Leonardo Cabral

8 de Novembro de 2019

UFPE

DF-UFPE

Objetivos

Introdução a equações diferenciais aplicadas a sistemas físicos:

- Equação da onda: corda vibrante.
- Equação de Poisson: potencial elétrico entre placas de um capacitor.

Mais informações sobre este assunto podem ser encontradas em:

- H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian, "An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical systems", 3rd Ed, Secões 9.7 e Seções 10.5-10.6.
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, "Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing, 2nd Ed, Cap. 19.
- Notas de aula.

$$-\nabla^2 u + \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \qquad \text{onde } \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

onde u denota a amplitude da onda e v sua velocidade.

Equação da onda unidimensional em $a \leq x \leq b$ e $t \geq 0$

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0,$$

com condições de contorno em $x = a$ e $x = b$, assim como condições iniciais $u(x, 0) = u_0(x)$ e $\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{t=0} = v_0(x)$ para todo $x \in [a,\, b]$.

Condições de contorno:

$$\begin{aligned}
u(a,\, t) = u_a(t) \text{ ou } u(b,\, t) = u_b(t), &\qquad \text{Dirichlet} \\
\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_a = w_a(t) \text{ ou } \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_b = w_b(t), &\qquad \text{Neumann} \\
u(a,\, t) = u(b,\, t) \text{ e } \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_a = \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_b, &\qquad \text{Periódicas}
\end{aligned}$$

Discretização do espaço e do tempo

$$
\begin{aligned}
a \leq x \leq b \rightarrow \quad & x_k = a + k\Delta x, \qquad \Delta x = (b-a)/N, \\
0 \leq t < \infty \rightarrow \quad & t^{(n)} = n\Delta t.
\end{aligned}
$$

onde temos $N+1$ pontos ao longo de x. Para uma função $f(z)$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \doteq \frac{f(z+\Delta) + f(z-\Delta) - 2f(z)}{\Delta^2},$$

de modo que a equação de onda se torna,

$$-\frac{u_{k+1}^{(n)} + u_{k-1}^{(n)} - 2u_k^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{u_k^{(n+1)} + u_k^{(n-1)} - 2u_k^{(n+1)}}{v^2 \Delta t^2} = 0$$

o que fornece,

$$u_k^{(n+1)} = 2\left[1 - \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right] u_k^{(n)} + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x}\right)^2 [u_{k+1}^{(n)} + u_{k-1}^{(n)}] - u_k^{(n-1)}.$$

Entretanto, se definirmos $\Delta x = v\Delta t$, teremos,

$$u_k^{(n+1)} = u_{k+1}^{(n)} + u_{k-1}^{(n)} - u_k^{(n-1)}.$$

Elabore um relatório em `pdf` contendo seus resultados referentes ao itens abaixo:

1. Elabore um programa (em `C/C++`, `Java` ou `Python`) para determinar a evolução no tempo de um pacote de onda gaussiano. Mostre graficamente seus resultados e, quando possível, compare com resultados conhecidos. Assuma, por conveniência, que a velocidade inicial do pacote seja zero (ou seja, declare inicialmente $u_{\mathrm{old}}(x_i, 0) = u(x_i, 0)$, para todos os pontos do *grid*, $i = 1, 2, \ldots N$, onde $u_{\mathrm{old}}(x_i, t) = u(x_i, t)$).
2. Defina $u(x, t) = 0$ para x na fronteira (condições de contorno de Dirichlet).
3. Utilize condição de contorno periódica, i.e., $u(x + L, t) = u(x, t)$, onde L é o tamanho do sistema.
4. Modifique as condições iniciais e observe o que acontece.

$$-\nabla^2 \Phi = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0},$$

onde $\nabla^2 = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$, $\Phi(\mathbf{r})$ é o potencial eletrostático, $\rho(\mathbf{r})$ a densidade de carga em um ponto $\mathbf{r}$ e ε é a permissividade do vácuo.

Condições de contorno de Dirichlet impõem valor do potencial na fronteira ∂S,

$$\Phi|_{\partial S} = f, \qquad \text{(e.g., capacitor em potencial dado)}$$

enquanto condições de contorno de Neumann definem a derivada normal do potencial na fronteira,

$$\left.\frac{d\Phi}{dn}\right|_{\partial S} = g, \qquad \text{(e.g., capacitor com carga elétrica dada)}$$

Discretização do espaço

Seja D o número de dimensões do espaço considerado. Então, uma discretização regular igualmente espaçado (espaçamento Δ) resulta em
$\mathbf{r} \rightarrow \quad \mathbf{r}_{ijk\ldots} = (x_i,\, y_j,\, z_k, \ldots)$, onde

$$x_i = x_0 + i\Delta, \qquad y_j = y_0 + j\Delta, \qquad z_k = z_0 + k\Delta, \ldots$$

onde temos $i = 0,\, 1,\, \ldots,\, N_x + 1$, $j = 0,\, 1,\, \ldots,\, N_y + 1$, $k = 0,\, 1,\, \ldots,\, N_z + 1$, ..., e $\Phi(\mathbf{r}_{ijk\ldots}) = \Phi_{ijk\ldots}$. Como,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \doteq \frac{f(z+\Delta) + f(z-\Delta) - 2f(z)}{\Delta^2},$$

então (assumindo $\varepsilon_0 \Phi \rightarrow \Phi$),

$$-\sum_{\alpha=1}^{D} \frac{\Phi_{j_{\alpha+}} + \Phi_{j_{\alpha-}} - 2\Phi_{j_\alpha}}{\Delta^2} = \rho_{j_\alpha}$$

onde $j_\alpha \doteq (j_1,\, j_2,\, j_3,\, \ldots)$ denota um elemento do grid, $j_{\alpha+}$ ($j_{\alpha-}$) denota o primeiro vizinho posterior (anterior) de α.

Esta equação pode ser resolvida por inversão matricial (identificando o LHS como um produto matricial) ou podemos aplicar o método da relaxação.

Equação de Poisson

A discretização do laplaciano (acima dada) pode ser interpretada como

$$-\sum_{\alpha=1}^{D} \frac{\Phi_{j_{\alpha+}} + \Phi_{j_{\alpha-}} - 2\Phi_{j_\alpha}}{\Delta^2} = \rho_{j_\alpha} \rightarrow 2D\frac{\Phi_{j_\alpha}}{\Delta^2} = \rho_{j_\alpha} + \frac{\sum_{\alpha=1}^{D}\left(\Phi_{j_{\alpha+}} + \Phi_{j_{\alpha-}}\right)}{\Delta^2}$$

$$\Phi_{j_\alpha} = \langle \Phi_{j_\alpha} \rangle + \frac{\Delta^2}{2D}\rho_{j_\alpha}$$

onde $\langle \Phi_{j_\alpha} \rangle$ é a média do potencial nos primeiros vizinhos de Φ_{j_α}, i.e.,

$$\langle \Phi_{j_\alpha} \rangle = \frac{\Phi_{j-1} + \Phi_{j+1}}{2}, \qquad D = 1$$

$$\langle \Phi_{j_\alpha} \rangle = \frac{\Phi_{i,j-1} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i+1,j}}{4}, \qquad D = 2$$

$$\langle \Phi_{j_\alpha} \rangle = \frac{\Phi_{i,j,k-1} + \Phi_{i,j,k+1} + \Phi_{i,j-1,k} + \Phi_{i,j+1,k} + \Phi_{i-1,j,k} + \Phi_{i+1,j,k}}{6}, \qquad D = 3$$

O potencial em cada ponto do grid é determinado iterativamente a partir destas expressões (ver notas de aula).

UFPE

DF-UFPE

Elabore um relatório em `pdf` contendo seus resultados referentes ao itens abaixo:

1. Elabore um programa (em `C/C++`, `Java` ou `Python`) para determinar o potencial elétrico (em 2D) entre as placas de um capacitor com diferença de potencial dada, i.e, $V = -1$ e $V = 1$ em cada uma das placas. Escolha uma geometria conveniente. Mostre graficamente seus resultados, ou seja, mostre Φ em função da posição[1].
2. Determine o campo elétrico entre os condutores. Lembre que $\vec{E} = -\nabla\phi$ e utilize uma aproximação discreta para a derivada.

[1] Gráficos de linhas de contorno são bons para ver as equipotenciais e gráficos de superfície permitem ver o potencial como uma terceira dimensão.