

**ALGORITMOS DE EVOLUÇÃO TEMPORAL APLICADOS A SISTEMAS
ACÚSTICOS UNIDIMENSIONAIS**

DIÓGENES BOSQUETTI

**Tese apresentada ao Instituto de Física de
São Carlos, Universidade de São Paulo,
para obtenção do título de Doutor em
Ciências "Física Básica"**

**Orientador: Prof. Dr. Euclides Marega Júnior
Co-Orientador: Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques**

04 USP/IFSC/SBI



8-2-001451

**São Carlos – São Paulo
2002**

Bosquetti, Diógenes

A Técnica do Split-Operator Aplicada a Sistemas Clássicos:
Aplicação a Sistemas Acústicos Unidimensionais.

/ Diógenes Bosquetti

São Carlos, 2001. 144 p.

Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, 2002.

Orientador: Prof. Dr. Euclides Marega Junior

Co- Orientador: Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques

1. Evolução Temporal. 2. Split-Operator. 3. Acústica

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
DIOGENES BOSQUETTI, APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA
DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 05-03-2002.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. EUCLYDES MAREGA JUNIOR (Orientador e Presidente) – IFSC -USP



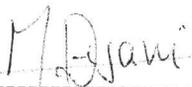
Prof. Dr. SILVESTRE RAGUSA – IFSC-USP



Prof. Dr. LIDERIO CITRÂNGULO IORIATTI JÚNIOR – IFSC-USP



Prof. Dr. NELSON STUDART FILHO – UFSCar



Prof. Dr. MARCOS HENRIQUE DEGANI – USF

Apesar de todas as pessoas com quem convivemos, exercerem um papel importante em nossas vidas, creio que no término deste trabalho, destaco:

a minha família:
Aristides Wanderley Bosquetti (in memorian),
Maria Corbi Bosquetti,
Péricles Bosquetti,

e

Prof. Dr. Euclides Marega Jr.,
Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques,
Prof. Dr. José Sanchez-Dehesa Moreno,
Prof. Dr. Silvestre Ragusa,

como as pessoas mais importantes, que me auxiliaram, me deram forças, e me estimularam em todos os momentos, na confecção deste meu trabalho.

É para elas que eu dedico, com muito carinho, a tese de meu doutorado.

AGRADECIMENTOS

No decorrer da realização deste trabalho, recebemos a ajuda de amigos, colegas e acadêmicos, sob a forma de críticas construtivas, sugestões para melhoramentos e informações adicionais. Gostaria de aproveitar esta oportunidade para reconhecer com gratidão a assistência que nos deram.

Deste modo, quero exprimir meu sincero obrigado aos professores do Instituto de Física de São Carlos (IFSC), e também do Departamento de Física Teórica da Matéria Condensada, da Universidade Autónoma de Madrid (UAM), pelos inúmeros ensinamentos e frutíferas discussões, ministrados ao longo destes anos.

Agradeço aos alunos da pós-graduação do IFSC e do módulo C-V, da faculdade de Ciências da UAM, pelo companheirismo e gostoso convívio. Meus particulares agradecimentos ao Prof. Dr. José Sanchez-Dehesa, da Universidade Autónoma de Madrid, por sempre ter sido atencioso comigo (sendo meu “pai” aqui na Espanha), além de ter me proporcionado a oportunidade de estar aqui em Madrid durante quase 2 anos, tomando contato com outra língua e cultura. Outra pessoa que agradeço de coração é o Prof. Euclides Marega Jr., o qual me deu completa assistência, principalmente nos momentos mais difíceis do meu doutorado. Ao Prof. Dr. Gilmar E. Marques pela oportunidade que me deu de conhecer o Prof. José Sanchez-Dehesa e pelas valoras discussões.

Quero agradecer ao CNPq pelo suporte financeiro nos anos que eu passei no Brasil e também ao apoio financeiro de diversas instituições espanholas, sem as quais não seria possível minha instância. Em particular, meus sinceros agradecimentos ao apoio recebido através da oficina de relações internacionais da UAM e do ministério da *investigacion y ciencia de España*. Agradeço também a união europeia, por financiamento parcial, através do projeto Phobos – IST1999.

Sumário

Resumo	ix
Abstract	xi
1 Introdução	1
1.1 Propriedades gerais dos sistemas considerados	5
2 Técnica do Split-Operator aplicada a sistemas clássicos	8
2.1 Sistemas acústicos lineares e não-dissipativos	8
2.2 A equação de Liouville	10
2.3 Evolução das variáveis Φ e Λ	12
2.4 Passagem de um pulso sonoro entre dois meios semi-infinitos	14
2.5 Passagem de um pulso sonoro por uma parede	17
2.6 Emissor de pulsos sonoros	20
2.7 Split-Operator e Método tradicional (FDTD)	23
2.7.1 Método do FDTD aplicado a sistemas acústicos lineares	24
2.7.2 Método do SO de ordem Δt_k^2 , aplicado a sistemas acústicos lineares	24
3 O Método do Split-Operator Modificado	28
3.1 MSO em sistemas não-homogêneos	31
3.1.1 Condição de não-reflexão para o MNU	34
3.2 Cristal acústico unidimensional	36
3.3 Diferença de fase $\Delta\phi$, velocidades de fase e de grupo	40
3.4 Análise espectral do cristal acústico	41

4	Efeitos de dissipação e não-linearidade	47
4.1	Meios dissipativos	47
4.1.1	Sistema sem atrito	48
4.1.2	Meios com atrito e viscosidade	53
4.2	Aplicação: Parede dupla com revestimento acústico	54
4.3	Meios não-lineares: Considerações iniciais	56
4.4	Equação da onda no caso não-linear	61
4.4.1	Termo não-linear agindo como uma perturbação	61
4.4.2	Tratamento geral do termo não-linear	64
4.5	Pacote de ondas penetrando em um meio não-linear	66
5	Sistemas Acústicos Bidimensionais	71
5.1	Relações de recorrência para sistemas bidimensionais	72
5.2	Tratamento das interfaces	76
5.3	Exemplos de sistemas bidimensionais	79
5.3.1	Disco não-rígido	79
5.3.2	Cristal acústico bidimensional	88
5.3.3	Propagação de um pacote de onda numa guia retangular	89
6	Conclusões gerais do Trabalho	102
A	Formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano para sistemas acústicos	111
A.1	Hamiltoniana total do sistema	111
A.2	As equações canônicas de movimento	113
A.3	Conservação da Hamiltoniana total	114
B	Critérios para incrementos temporais	116
C	Separação de operadores diferenciais	118
D	A matriz evolução temporal e suas propriedades	121
D.1	A matriz evolução temporal	122
D.2	Matriz de evolução temporal do FDTD	125

D.3	Matriz de evolução temporal do SO de ordem Δt^2	126
E	Solução das relações de recorrência implícitas	128
E.1	Algoritmo de Thomas para matrizes tri-diagonais	128
E.2	Algoritmo para uma matriz pentadiagonal	129
F	Valores típicos dos parâmetros utilizados neste trabalho	132
F.1	Densidade e velocidade de propagação do som no meio	132
F.2	Coefficiente de atrito	132
F.3	Coefficiente de viscosidade	135
F.4	A razão entre os calores específicos γ e a teoria cinética dos gases	139

Lista de Figuras

2-1	<i>Pacote de ondas gaussiano incidindo num meio semi-infinito. O meio 1 contem completamente o pacote de ondas nos instantes iniciais.</i>	16
2-2	<i>Tunelamento de um pacote de ondas para a pressão numa barreira. A largura da barreira é suficientemente grande para que o fenômeno de reflexão na segunda interface seja desacoplada ao processo de transmissão da primeira interface. . . .</i>	18
2-3	<i>Evolução temporal de um pacote de ondas para a pressão. O pacote parte do centro do sistema, no meio 2.</i>	21
2-4	<i>Comparação entre os algoritmos FDTD e o Split-Operator para um pacote de onda sendo evoluído no tempo.</i>	27
3-1	<i>Propagação de um pulso acústico num meio não homogêneo.</i>	33
3-2	<i>Propagação do pulso na estrutura periódica. Comparação para vários instantes de tempo.</i>	38
3-3	<i>Posição dos detetores no sistema.</i>	39
3-4	<i>Sinal de pressão nos detetores.</i>	42
3-5	<i>Comparação entre PSD da pressão e os coeficientes de transmissão e reflexão. . .</i>	44
3-6	<i>Comparação entre ASF da pressão e a velocidade de fase.</i>	45
3-7	<i>Comparação entre a diferença de fase e velocidade de grupo.</i>	46
4-1	<i>A espuma acústica ESPUMEX exibida ao lado, é de alta eficiência, baixo custo, ótimo aspecto e auto extingüível (não propaga o fogo). Como pode-se notar, o ESPUMEX possui o desenho na forma de "mamilos" os quais aumentam a área absorção acústica.</i>	55

4-2	Parede dupla, com um meio isolante em seu centro.	57
4-3	Deslocamento de uma partícula de fluido de sua posição de equilíbrio.	59
4-4	Subtração dos valores da pressão nas faces da partícula de fluido.	60
4-5	Evolução temporal para um pulso, penetrando num meio não-linear.	67
4-6	Comparação entre os pulsos de onda movimentando-se num meio (a) linear e (b) não-linear.	68
4-7	Evolução do pacote de ondas em um cristal acústico não-linear	69
4-8	Comparação entre os pacotes de onda da pressão para os cristais acústicos linear e não-linear.	70
5-1	Malha homogênea bidimensional	77
5-2	Curvas de nível da pressão no sistema contendo um disco não-rígido. No instante 4.5×10^{-6} s, o pacote de ondas gaussiano esta prestes a atingir a superfície que delimita o disco.	81
5-3	Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante 2.26×10^{-6} s. O pacote de ondas está sendo parcialmente transmitido para dentro do disco.	82
5-4	No instante 4.06×10^{-6} s, vemos as curvas de nível da pressão espalhada pelo disco. Existe uma região de sombra provocada pela presença do disco. O pacote de ondas que está dentro do disco sofre reflexão com inversão de fase, pois a impedância acústica externa é maior do que a interna.	83
5-5	Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante 5.86×10^{-6} s. O pacote de ondas gaussiano está tentando se recompor, na região de sombras. O pacote dentro do disco movimenta-se na direção oposta ao pacote de ondas incidente.	84
5-6	Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco em 7.66×10^{-5} s. O pacote que está dentro do disco sofre nova reflexão, mudando novamente sua fase e sua direção de movimento.	85
5-7	Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco, no instante 9.46×10^{-5} s. O pacote de ondas dentro do cilindro começa a perder a intensidade em virtude de irradiação.	86

5-8	Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante $9,46 \times 10^{-5}$ s. Neste caso o pulso tem um espectro maior de frequências, pois o pacote de ondas é mais estreito. Observa-se um espalhamento anisotrópico do pacote de ondas incidente no disco.	87
5-9	Perfil de intensidade da propagando-se através do cristal para um tempo de $1,8 \times 10^{-5}$ s	90
5-10	Perfil de intensidade da pressão para o pulso propagando-se através do cristal para um tempo de $2,5 \times 10^{-5}$ s	91
5-11	Comparação entre os espectros para três cristais com diferentes fatores de empacotamento (FP). Neste caso variou-se somente o diâmetro dos cilindros.	92
5-12	Esquema geral do problema proposto para a propagação num guia retangular. No problema proposto um pacote de onda é confinado em uma das direções (canal) enquanto a outra é livre. Neste caso, o canal tem dimensões que são comparáveis com o comprimento de onda médio do pulso, que no nosso caso é de 1 cm.	94
5-13	Numa determinada posição do canal (centro do sistema), cria-se a possibilidade de propagação em outra direção perpendicular, conforme mostrado na figura.	95
5-14	Propagação de um pulso numa guia retangular. É possível ver a formação de modos de propagação característicos na guia perpendicular devido à difração do pacote ocasionada pela mudança das condições de contorno.	96
5-15	O pulso inicial sofre reflexão parcial e também um novo espalhamento, devido as quinas existentes na outra extremidade do canal transversal.	97
5-16	A parcela do pacote que se encontra na região das cavidades começa a oscilar, sofrendo múltiplas reflexões e espalhamentos para as regiões interna das cavidades.	98
5-17	Propagação de um pulso gaussiano num cruzamento de guias de onda retangulares, no instante $1,2 \times 10^{-4}$ s. Podemos ver que uma parte do pacote de ondas inicial consegue passar pela guia perpendicular e seguir seu movimento no canal original.	99
5-18	Propagação de um pulso numa guia retangular no instante $1,4 \times 10^{-4}$ s. Múltiplas reflexões ocorrem na região do cruzamento entre os dutos.	100

5-19 Propagação de um pulso numa guia retangular. Neste caso o pacote de ondas tem um espectro mais amplo de frequências. O tempo é equivalente ao do gráfico anterior, ou seja, 1.4×10^{-4} s. 101

Lista de Tabelas

2.1	Comparação entre os coeficientes de transmissão e reflexão	20
2.2	Coeficientes de transmissão e reflexão exatos e via Split-Operator	23
2.3	Valor esperado da posição para os pacotes transmitido e refletido	23
F.1	Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias sólidas	133
F.2	Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias líquidas	133
F.3	Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias no estado gasoso	134
F.4	Densidade e velocidade de propagação do som para diversos vapores	134
F.5	Coeficientes de atrito para diversas substâncias - condição clean	136
F.6	Coeficiente de atrito, na condição clean, em função da temperatura	136
F.7	Coeficiente de atrito, para o aço no aço sob distintas condições iniciais, a temperatura de 25 C	136
F.8	Coeficiente de viscosidade para oleos, sob distintos valores de temperatura	138
F.9	Coeficiente de viscosidade para ácidos, sob distintos valores de temperatura . . .	138
F.10	a)Variação da viscosidade do mel tipo "white clover"a 250 C de acordo com a porcentagem de água presente b)Variação da viscosidade do mel tipo "sweet clover"contendo 16.1de água, de acordo com a temperatura (Munro, 1943). . . .	139
F.11	Variação da viscosidade com relação a sua origem botânica).	139
F.12	Coeficiente de viscosidade para o ar, sob distintos valores de temperatura	140
F.13	Coeficiente de viscosidade para o etileno e para o neonio, sob distintos valores de temperatura	140
F.14	Coeficiente de viscosidade para o alcool etilico, sob distintos valores de temperatura	140

Resumo

Neste trabalho, estudamos a evolução temporal de pacotes de ondas gaussiano, propagando-se ao longo de hetero-estruturas clássicas. Estas hetero-estruturas apresentam características e propriedades semelhantes a diversas hetero-estruturas quânticas, as quais são exaustivamente estudadas. Estes sistemas tem recebido muito interesse nestes últimos anos, possibilitando uma melhor compreensão dos próprios sistemas quânticos, bem como o aparecimento de novos transdutores e sonares.

Os pacotes de ondas propagam-se em meios que apenas permitem ondas longitudinais. Dentre a gama de sistemas unidimensionais abordados neste trabalho, destacamos o estudo de um emissor de pulsos acústicos, do problema do isolamento acústico de ambientes, enfatizando o problema da transmissão de um pacote de ondas incidindo normalmente em um sistema de dupla parede idêntica, com um meio absorvedor situado entre as paredes, e dos cristais acústicos unidimensionais lineares e não-lineares. Nos sistemas bidimensionais, existe o aparecimento de muitos efeitos que acontecem simultaneamente, como espalhamentos, difração, refração, reflexão e transmissão de ondas acústicas planas e esféricas. Destacamos o estudo de três problemas: i) Espalhamento de uma onda por um disco não-rígido, com impedância acústica característica menor do que a do meio externo; ii) Propagação de um pulso em um sistema periódico de cilindros perfeitamente rígidos, formando um cristal clássico; iii) Propagação do pacote onda por uma guia perfeitamente rígida, de secção reta constante, a qual é cortada por uma outra guia retangular, de características semelhantes à primeira.

A evolução temporal do pacote de ondas foi obtido através do desenvolvimento um novo algoritmo numérico. Este algoritmo é baseado na técnica do *Split-Operator (SO)*, que é uma técnica de separação de operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial. Através deste novo algoritmo, foi possível estudar as propriedades dinâmicas de ondas de pressão em sistemas acústicos uni e bidimensionais, calculando a estrutura de bandas onde o método do PWE (do inglês *plane-wave-expansion*) apresenta fraca convergência ou falha.

Comparando o nosso novo algoritmo com o método FDTD (*finite difference time-domain method*), usualmente utilizado em problemas de acústica, o método possui uma série de vantagens: i) conserva o espaço de fase; ii) o SO é temporalmente inversível enquanto o FDTD não tem esta propriedade; iii) tem uma estabilidade numérica maior. Um método alternati-

vo de evolução foi desenvolvido a partir do SO, quando consideramos aplicações consecutivas. Este método foi denominado de método *Split-Operator* Modificado (MSO). Este método tem as mesmas propriedades, porém dispende cerca de 20% menos de tempo computacional. Posteriormente, o método foi generalizado para incluir termos de dissipação e termos não-lineares.

Abstract

In this work, we studied the time evolution of a Gaussian wave packet, moving in classical heterostructures. These heterostructures have similar properties and behavior as quantum artificial structures, which are extensively studied in the literature. These classical heterostructures have been explored in these last years, to understand the quantum systems with more accuracy, as well as, to develop new kind of transducers and sonars.

All the considered systems just support longitudinal acoustic waves. Here we studied several unidimensional systems, and the most relevant ones are the periodic pulse emitter, the problem of two identical walls containing an dissipative media placed between them, and the linear and non-linear unidimensional acoustic crystals. For two dimensional systems, we have several phenomena occurring at the same time: scattering, diffraction, refraction, reflection and transmission of plane and circular waves. We analyzed three distinct systems: i) Scattering of a wave due to a non-rigid disc; ii) Pulse propagation through a periodic array of perfectly rigid cylinders; iii) pulse propagation in a rectangular wave guide, crossed by another rectangular wave guide.

We present here, a new computational algorithm, based on the Split-Operator (SO) technique, which allow us to study the dynamic properties of pressure waves in one and two-dimensional acoustical systems. With this new algorithm, we studied classical artificial structures, with high mismatch differences, where the PWE (plane-wave-expansion) method converges very slowly or fails. Our new algorithm also allow us to study the dynamitic properties of the system, while the PWE just give us the band structure of the system.

Comparing this new time evolution algorithm for acoustic waves in classical systems with the FDTD method (finite difference time-domain method), usually used in problems of acoustics, the method has a series of advantages: i) the phase space is conserved; ii) the SO has time reversal symmetry, while FDTD doesn't have this property; iii) the SO has a larger numeric stability.

An alternative method for time evolution was developed starting from the SO, when we considered consecutive applications. This method was denominated modified Split-Operator method (MSO). This method has the same properties, however MSO needs about 20% less computational time. Alternatively, the method was extended to systems that present dissipative

and non-linear terms.

Capítulo 1

Introdução

A Acústica, como uma parte da física, pode ser definida como o estudo das vibrações e ondas mecânicas em meios materiais. Dentro do estudo comum, a vibração mecânica ou onda elástica deve permanecer dentro da faixa audível, para ser considerada som. Como esta faixa audível refere-se ao ouvido humano médio, as frequências que delimitam o tamanho da faixa audível não segue um padrão exato, variando de autor para autor. Pela a classificação de Hueter e Bolt [1], o som está situado na faixa entre os 16 e 16000 Hz. Abaixo dos 16 Hz temos os infra-sons, também conhecido como tremores (um exemplo interessante de ondas infra-sônicas são os abalos sísmicos). Entre 16 kHz e 10 GHz, estão os ultra-sons e acima de 10 GHz, temos os hiper-sons. É preciso ressaltar que a faixa audível se refere ao homem. Os gatos, cães e cavalos ouvem frequências próximas a 45 kHz, e os morcegos e algumas espécies de ratos ouvem até cerca de 70 kHz.

O desenvolvimento da acústica como ciência iniciou-se com o trabalho de Chladni intitulado *Die Akustik*, editado em 1802. Nesta obra, o autor pela primeira vez efetua um compêndio de todos os resultados teóricos existentes, bem como acrescenta algumas contribuições. Na mesma época, aparece o princípio de Huyghens e existe um grande desenvolvimento dos trabalhos de Young sobre a teoria ondulatória, sendo mencionadas as semelhanças existentes entre a luz e as ondas que aparecem na superfície da água. A acústica clássica atingiu o seu apogeu com o Rayleigh e seu livro intitulado *Theory of Sound*, de 1877, onde foram estabelecidas as bases científicas da acústica, numa obra pedagógica completa. Após Rayleigh, a acústica ficou praticamente estacionada, e os poucos progressos posteriores deveram-se mais às necessidades das comunicações. Os sistemas de comunicações servem a dois propósitos distintos: i) o primeiro é a transmissão da linguagem falada, cuja preocupação principal é a manutenção da forma inicial dos pulsos acústicos, de modo que a inteligibilidade seja satisfatória, ao chegar no aparelho receptor. ii) o segundo, mais elaborado, é a reprodução e gravação dos sons, principalmente a

música. Deste modo, enquanto que a técnica da comunicação verbal tem uma finalidade social, a reprodução da música tem uma finalidade cultural, uma vez que reproduz a beleza da arte. Estes progressos, que ocorreram desde os fins do século XIX e quase todo o século XX, foram realizados por homens que trabalhavam em eletricidade, eletrônica, artes bélicas, e outras áreas correlatas.

Com o resultado de avanços em Física teórica e experimental, muitos problemas interessantes, originários da Física Quântica, têm encontrado seu correspondente na Física Clássica [2]. Desde meados da década de 70 até os dias de hoje, muita pesquisa sobre nanoestruturas artificiais, formadas pela união de dois ou mais materiais tem sido feitas [3] e suas propriedades eletrônicas, ópticas e eletromagnéticas determinadas [4, 5]. Mais recentemente, houve um crescente interesse em materiais, cuja junção formam heteroestruturas que apresentam estruturas de bandas permitidas e proibidas, no limite de ondas da ordem de 1 GHz [6]. Estes sistemas, batizados de cristais acústicos [7, 11], possuem tipicamente $10^3 - 10^4$ átomos, e parâmetros de rede da ordem de 13 nm, sendo portanto um sistema macroscópico.

Estas macroestruturas são obtidas através de uma modelagem apropriada das constantes elásticas dos materiais [9], e a prova da existência de bandas acústicas, em experimentos de transmissão de ultrassons nestes materiais já foram realizadas [11, 10]. Sendo os cristais acústicos da ordem de milímetros, estruturas cristalinas que podem ser obtidas a partir de um arranjo periódico de furos cilíndricos, em um meio material homogêneo, que serve de substrato [10]. Estes furos são preenchidos de ar, apresentando uma diferença muito grande de impedância acústica característica. Ao atingir um furo, o som é fortemente espalhado e, se houver pouca distância entre os furos cilíndricos, espera-se que haverá pouca ou mesmo nenhuma transmissão de ultrassons, nesta estrutura. Suas aplicações são amplas [8], variando desde a construção de dispositivos acústicos semicondutores, fabricação de lentes e espelhos acústicos, bem como a verificação de propriedades dos sistemas quânticos correspondentes. Este último é uma vantagem inerente de se trabalhar com sistemas clássicos, pois em um sistema macroscópico, todas as grandezas podem ser controladas e medidas.

Muitos autores [8] tem calculado a estrutura de bandas de cristais acústicos bidimensionais, utilizando o método PWE (do inglês *plane-wave-expansion*). Este método explica razoavelmente bem as propriedades do sistema quando a diferença entre as impedâncias acústicas dos materiais constituintes não são muito grandes. Caso contrário, um número muito grande de ondas planas são necessárias para se obter a estrutura de bandas do cristal. Além disto, se o material que preenche os furos cilíndricos não for um fluido viscoso, de modo que não seja possível a propagação de ondas transversais dentro do cilindro, o método PWE falha, produzindo uma estrutura de bandas errônea. Neste caso, um método mais poderoso que o PWE é necessário, para se calcular a relação de dispersão de cristais acústicos. Atualmente, as investigações

destas estruturas clássicas se restringem ao plano "estático" [12], ou seja, nenhum estudo de propriedades dinâmicas, está sendo feita nestes sistemas.

Neste trabalho, apresentamos um estudo da evolução temporal de pacotes de ondas gaussiano, aplicado a sistemas acústicos uni e bidimensionais. Estes pacotes de ondas são produzidos através de pequenas perturbações mecânicas, que se propagam elasticamente ao longo dos meios materiais. Os sistemas aqui tratados apresentam materiais isotrópicos, cujos parâmetros intrínsecos (constante de elasticidade, velocidade de propagação do som no meio, etc), não apresentam dependência temporal. Particularmente, estamos interessados em obter a evolução temporal de grandezas como a pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$, sua derivada temporal parcial $\Lambda(\mathbf{r}, t)$, a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, a aceleração $\mathbf{a}(\mathbf{r}, t)$ e o deslocamento das partículas referentes às respectivas posições de equilíbrio $\ell(\mathbf{r}, t)$, causada pela passagem do pacote de ondas no sistema.

Na literatura usual, o método padrão utilizado no estudo da propagação de pacotes de ondas no tempo, é denominado de FDTD, que é a abreviação do inglês *finite difference time-domain method* [14, 15]. Este método foi primeiramente utilizado em 1966, por K.S. Yee [13], para estudar a evolução de ondas eletromagnéticas, em meios isotrópicos. Mais recentemente, o FDTD foi adaptado, e empregado para se resolver problemas de acústica marinha [14], e também para lentes dielétricas [15]. Entretanto, devido a sua formulação intrínseca, este método apresenta uma baixa estabilidade numérica, além de uma perda de informação a cada passo de tempo, pois seu algoritmo não é conservativo. Para sanar as dificuldades inerentes ao FDTD, desenvolvemos diversos algoritmos numéricos, todos eles baseados na técnica de separação de operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial denominada de técnica do *Split-Operator (SO)*. Esta técnica foi desenvolvida em 1982, por M. D. Fleit, J. A. Fleck. e A. Steiger [16]. Esta linha de pesquisa utilizando o *Split-Operator(SO)* continua até nos dias de hoje [17].

A adaptação da técnica do SO para o estudo de sistemas clássicos é uma das contribuições originais deste trabalho. Ela é discutida ao longo de todos os capítulos, adequando-se e crescendo em grau de complexidade, à medida que os capítulos vão avançando. No capítulo 2 é feito o desenvolvimento do formalismo necessário para a aplicação da técnica de SO na solução da equação de onda clássica para meios lineares e conservativos. No capítulo 3 o método foi adaptado e um novo algoritmo foi desenvolvido e re-batizado de *Split-Operator Modificado*. No capítulo 4 apresentamos uma extensão do método quando termos dissipativos e não-lineares são incluídos na equação de onda. No capítulo 5 apresentamos a aplicação do método em sistemas bi-dimensionais.

Nos capítulos que consideramos os sistemas unidimensionais, efetuamos a simulação numérica de diversos sistemas:

- i. Fonte de pulsos acústicos não-puntual, que emite pulsos a intervalos regulares, mas com intensidade decrescente com o tempo;
- ii. O problema da passagem de um pulso acústico em um meio com distinta impedância acústica característica. Sistema este que apresenta uma analogia com o problema de tunelamento quântico de pacotes de ondas eletrônicos;
- iii. Problema das distorções transientes de pulsos sonoros, devido a presença de um meio não-homogêneo no sistema, mas com impedância acústica característica constante e igual ao meio de propagação original do pacote de ondas;
- iv. O estudo de cristais acústicos finitos, cuja análise espectral dos pacotes de ondas transmitido e refletido nos permite determinar as propriedades intrínsecas deste cristal, como sua estrutura de bandas e a velocidade de grupo do pacote em função de sua frequência angular;
- v. Quando consideramos termos dissipativos, estudamos o problema de isolamento acústico de ambientes, simulando a passagem de um pacote de ondas gaussiano incidindo perpendicularmente em uma sistema constituído por duas paredes idênticas (mesmo material, espessura, etc), separadas entre si por uma camada formada por um material de alto poder de atenuação de ondas sonoras;
- vi. Finalmente, simulamos numericamente um cristal acústico não-linear, comparando-o com seu equivalente linear, discutindo suas principais diferenças, ressaltando a distorção sofrida pelo pacote de ondas, ao propagar-se no meio não-linear.

No capítulo 5, dedicamos nossos esforços para tratar os sistemas bidimensionais, cujos algoritmos foram aplicados na análise de três problemas:

- vii. O problema do espalhamento de uma onda gaussiana, por um disco não-rígido. A parte do pacote de ondas que penetra no disco passa a oscilar com uma frequência definida, e seu comportamento é o de um dipolo acústico;
- viii. A propagação de uma onda através de um sistema de discos perfeitamente rígidos, onde não existe a possibilidade do pacote de ondas penetrar no interior de nenhum disco. Este sistema é um sistema de múltiplos espalhamentos, formando um cristal acústico bidimensional;
- ix. A propagação de uma onda por uma guia retangular, sofrendo uma difração e posterior confinamento parcial, quando este pacote encontra um cruzamento perpendicular de guias de ondas.

No capítulo 6 são apresentadas as conclusões do trabalho desenvolvido e propostas para trabalhos futuros. Nos apêndices encontram-se tópicos complementares aos assuntos discutidos nos capítulos. Antes porém de iniciarmos este estudo, convém definirmos exatamente as propriedades e características dos sistemas que são considerados neste trabalho. Isto porque as grandezas, unidades e quantidades usadas normalmente em Acústica estão bastante desorganizadas. Embora o comitê ISO-TC/43 já tenha estabelecido várias normas quanto à nomenclatura, quantidades, unidades e grandezas, o seu uso ainda não está generalizado e o sistema utilizado varia de autor para autor. O mais grave é que os diferentes autores usam conceitos e definições diferentes para uma mesma grandeza, havendo uma completa mistura de unidades. Por causa disto, dedicamos uma parte deste capítulo inicial à exposição das convenções que adotamos ao longo de todo este trabalho.

1.1 Propriedades gerais dos sistemas considerados

Os sistemas considerados em todo este trabalho estão perfeitamente isolados, não sofrendo influências de campos ou forças externas. Estes sistemas são formados por um ou mais meios, onde cada meio é composto por apenas um tipo de material.

Os sistemas simulados numericamente nos capítulos 2, 3 e 5 são ideais, não apresentando quaisquer tipos de dissipações. Estes meios são homogêneos, isotrópicos, localmente reativos, temporalmente invariantes, e também lineares. Eles seguem as propriedades descritas no *Handbook of Radiation and Scattering Waves* [18], e cujas características são apresentadas a seguir:

- **Homogeneidade:** Um meio é considerado homogêneo, quando as propriedades que o caracterizam, como densidade, elasticidade, etc, não apresentam mudanças de valores numa determinada direção, ao longo deste meio;
- **Isotrópico:** Os meios tratados neste trabalho são todos isotrópicos, apresentando os mesmos valores para qualquer dos parâmetros que o caracterizam, independente da direção escolhida;
- **Reatividade Local:** As ondas acústicas que propagam neste sistema se relacionam apenas localmente com os parâmetros intrínsecos de cada meio. Portanto, para uma onda de pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$ que esteja se propagando no sistema, e se encontra na posição $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a$ no instante $t = t_k$, temos que ela provocará distúrbios neste meio apenas em regiões circunvizinhas a \mathbf{r}_a .
- **Invariância temporal:** Os parâmetros internos que compõem o sistema não apresentam dependência temporal, possuindo sempre os mesmos valores.

- **Linearidade:** As equações que regem a dinâmica das ondas acústicas que se propagam ao longo do sistema, são lineares com relação à pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Não existem termos contendo $\Phi^2(\mathbf{r}, t)$, ou $\mathbf{v}^2(\mathbf{r}, t)$, ou de ordens superiores.

Consideramos também que os meios que são aqui considerados apresentam o comportamento de fluido ideal. Este comportamento é satisfeito, se e somente se, apresentar as seguintes propriedades:

- A estrutura discreta da matéria é ignorada e a substância é tratada como contínua e infinitamente divisível.
- O movimento de uma “partícula” de fluido se refere ao movimento médio das moléculas, as quais estão contidas nesta “partícula”.
- Esta partícula possui um elemento de volume dV , que é microscopicamente grande, ou seja, cada elemento contém um grande número de moléculas da substância que compõem o fluido. Suas dimensões são grandes quando comparadas com o livre caminho médio das moléculas. Este elemento de volume é macroscopicamente pequeno, isto é, suas dimensões são muito pequenas quando comparadas com qualquer outra quantidade física relevante.
- Desde que o movimento de uma partícula, representa a média do movimento das muitas moléculas que a compõem, é impossível descrever o movimento randômico das moléculas.
- Num fluido que não esteja em equilíbrio (ex: Sistema que esteja sofrendo gradientes de pressão, temperatura, etc), espera-se nessas condições, que o movimento do fluido resultará numa propagação destes distúrbios a outras partes do fluido.
- No fluido ideal, as forças externas são desprezíveis e no estado não perturbado, as condições como densidade, pressão, temperatura são constantes e uniformes ao longo de todo o fluido.

Estamos interessados em estudar o movimento de ondas acústicas com frente de ondas planas, deslocando-se neste fluido ideal. No caso unidimensional, adotamos o sistema cartesiano de coordenadas, definindo o eixo \mathbf{x} , como eixo de propagação do pacote de ondas acústico. Uma vez que as frente de ondas são planas, o valor que obtemos, no ponto de coordenadas espaciais $(x_0, 0, 0)$ é o mesmo, para todos os outros pontos (x_0, y, z) .

O capítulo 4 os sistemas unidimensionais que apresentam dissipação, cujos valores é uma constante intrínseca do material e independente de outros fatores. Neste trabalho, consideramos apenas o caso da dissipação “branca”, onde todas as frequências sofrem a mesma dissipação. A presença da dissipação faz com que o fluido não seja mais ideal, modificando a forma do pacote

de ondas que nele se propaga. Entretanto, a dissipação não é tão forte a ponto de modificar drasticamente as propriedades básicas apresentadas para um fluido ideal.

Capítulo 2

Técnica do Split-Operator aplicada a sistemas clássicos

Neste capítulo, iniciamos nosso estudo das propriedades dinâmica de pacotes de ondas em sistemas acústicos. A seguir, apresentamos os conceitos básicos para o desenvolvimento dos algoritmos numéricos aplicados a sistemas não-dissipativos, baseados na técnica do Split-Operator. No final deste capítulo, efetuamos a simulação numérica de três sistemas unidimensionais, além de comparamos este algoritmo desenvolvido com o do FDTD, comumente utilizado em Acústica.

2.1 Sistemas acústicos lineares e não-dissipativos

Consideremos um sistema formado pela composição de vários meios, cada um deles considerado isotrópico e homogêneo. As moléculas que compõem estes meios sofrem perturbações na presença de uma onda mecânica. Esta onda mecânica, provoca uma variação da pressão interna entre as moléculas $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e um movimento em torno da posição não perturbada, com velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Tanto a pressão quanto esta velocidade, satisfazem as equações de Newton e da continuidade, a saber:

$$\partial_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) + \rho^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.1)$$

$$\partial_t \Phi(\mathbf{r}, t) + \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.2)$$

em que a compressibilidade $\kappa(\mathbf{r})$ se relaciona com a densidade ρ e a velocidade de propagação do som no meio c , por:

$$\kappa^{-1}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) c^2(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

É possível trabalharmos com estas duas últimas equações, de modo a se obter uma expressão somente em termos da pressão, ou somente em termos da velocidade. Estas equações são as denominadas equações de onda. Derivando temporalmente a eq. (2.2), e na seqüência, substituindo $\partial_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ por $-\rho^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t)$, encontramos a equação de onda para $\Phi(\mathbf{r}, t)$. Para a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, deriva-se temporalmente a eq. (2.1), substituindo em seguida $\partial_t \Phi(\mathbf{r}, t)$ por $-\kappa^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Obtemos então duas equações de onda, cada uma delas de segunda ordem no tempo:

$$\partial_t^2 \Phi(\mathbf{r}, t) = \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t) , \quad (2.4)$$

$$\partial_t^2 \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \check{\Gamma}(\mathbf{r}) \times \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) . \quad (2.5)$$

Os operadores $\Gamma(\mathbf{r})$ e $\check{\Gamma}(\mathbf{r})$ contém derivadas espaciais de primeira e segunda ordem, sendo descritos por:

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \left\{ \rho^{-1}(\mathbf{r}) \nabla^2 + \vec{\nabla} \rho^{-1}(\mathbf{r}) \cdot \vec{\nabla} \right\} , \quad (2.6)$$

$$\check{\Gamma}(\mathbf{r}) = \rho^{-1}(\mathbf{r}) \left\{ \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \nabla^2 + \vec{\nabla} \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \cdot \vec{\nabla} \right\} . \quad (2.7)$$

No estudo da evolução temporal das ondas mecânicas movimentando-se no sistema, é possível transformar as equações de onda para $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ em um sistema de duas equações de primeira ordem no tempo. Este abaixamento de ordem é conseguido, introduzindo as quantidades $\Lambda(\mathbf{r}, t) = \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t)$ na equação para a pressão e a aceleração $\mathbf{a}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ na equação para a velocidade:

$$\begin{cases} \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t) = \Lambda(\mathbf{r}, t) \\ \partial_t \Lambda(\mathbf{r}, t) = \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t) \end{cases} , \quad (2.8)$$

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}(\mathbf{r}, t) \\ \partial_t \mathbf{a}(\mathbf{r}, t) = \Upsilon(\mathbf{r}) \times \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \end{cases} . \quad (2.9)$$

Estas equações possuem tratamento matemático semelhante, de modo que centraremos nossas considerações no desenvolvimento para $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$. As eqs. (2.8) e (2.9) são as equações canônicas de movimento, quando utilizamos o formalismo Hamiltoniano. Esta discussão é feita no Apêndice A.

2.2 A equação de Liouville

Passamos agora a estudar a equação de Liouville, que nos fornecerá uma relação conveniente para efetuarmos estudos e simulações numéricas usando algoritmos computacionais. Uma vez que estamos tratando um sistema contínuo, considere a função $\check{\sigma}_\Phi$, que apresenta uma densidade associada $\sigma_\Phi = \sigma(\Phi, \Lambda, t)$, dependente de Φ e Λ . Esta função $\check{\sigma}_\Phi$ é definida pela integral de $\sigma(\Phi, \Lambda, t)$ em todo o espaço:

$$\check{\sigma}_\Phi = \int_V \sigma(\Phi, \Lambda, t) d^3\mathbf{r}. \quad (2.10)$$

A equação de Liouville aparece, quando efetuamos a derivada temporal total $d_t \check{\sigma}_\Phi$, e em seguida, utilizamos a regra da cadeia para $d_t \sigma_\Phi$:

$$d_t \check{\sigma}_\Phi = \int_V \{(\partial_\Phi \sigma_\Phi) \partial_t \Phi + (\partial_\Lambda \sigma_\Phi) \partial_t \Lambda + \partial_t \sigma_\Phi\} d^3\mathbf{r}. \quad (2.11)$$

Se $\check{\sigma}_\Phi$ for uma quantidade independente do tempo, $d_t \check{\sigma}_\Phi = 0$. Com isto, esta densidade será uma distribuição no espaço de fase (Φ, Λ) , de volume total constante. Apesar deste volume ser constante, sua distribuição pode apresentar variações no espaço de fase (Φ, Λ) . Utilizando a eq. (2.8) temos que

$$\partial_t \sigma_\Phi = \{-\Lambda(\mathbf{r}, t) \partial_\Phi + \{\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t)\} \partial_\Lambda\} \sigma_\Phi. \quad (2.12)$$

Escrevendo a eq. (2.12) na forma exponencial, a evolução temporal de σ_Φ no intervalo de tempo $[t_i, t_f]$, onde t_i e t_f são os instantes inicial e final, é dado por:

$$\sigma_\Phi^f = \exp \left\{ \int_{t_i}^{t_f} [A_\Phi(\mathbf{r}, t) + B_\Phi(\mathbf{r}, t)] dt \right\} \times \sigma_\Phi^i. \quad (2.13)$$

sendo

$$A_\Phi(\mathbf{r}, t) = -\Lambda(\mathbf{r}, t) \partial_\Phi, \quad (2.14)$$

$$B_\Phi(\mathbf{r}, t) = [\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t)] \partial_\Lambda. \quad (2.15)$$

Os índices superiores f e i , que aparecem em σ_Φ , representam os instantes de tempo considerado. Deste modo, para um instante de tempo t_k , definimos $\sigma_\Phi^k = \sigma(\Phi, \Lambda, t_k)$. Esta notação será utilizada para todas as quantidades, daqui por diante.

Se os operadores $A_\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $B_\Phi(\mathbf{r}, t)$ forem independentes do tempo, a integral temporal da eq. (2.13) é trivialmente resolvida. Caso contrário, devemos dividir $[t_i, t_f]$ em um número M de sub-intervalos temporais Δt_k (o índice $k = 1, 2, 3, \dots, M$, pois eles não precisam ser necessari-

amente idênticos). Apesar desta não obrigatoriedade com respeito aos incrementos de tempo, é necessário que todos os Δt_k devam ser pequenos o bastante para que as dependências temporais de $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ sejam desprezadas (os critérios para os valores de Δt_k são discutidos no apêndice B).

Seja Δt_k^{cr} , o valor máximo de incremento temporal que se pode adotar no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$. Para valores de $\Delta t_k \leq \Delta t_k^{cr}$, é possível aproximar $\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) \approx \Phi^k(\mathbf{r})$ e $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) \approx \Lambda^k(\mathbf{r})$, pois o integrando da eq. (2.13) pode ser considerado constante. Neste limite, a integral temporal se converte numa somatória:

$$\int_{t_i}^{t_f} [A_{\Phi}(\mathbf{r}, t) + B_{\Phi}(\mathbf{r}, t)] dt = \sum_{k=1}^M \Delta t_k [A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r})]. \quad (2.16)$$

No caso $M = 1$, a evolução temporal da densidade $\sigma_{\Phi}(\Phi, \Lambda, t)$ se resume na aplicação de uma exponencial, contendo $A_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$ e $B_{\Phi}(\mathbf{r}, t)$. Para $M > 1$, a exponencial contendo a somatória situada no argumento da exponencial é reescrita como uma produtória de exponenciais, uma para cada intervalo de tempo t_k , situado entre t_i e t_f :

$$\sigma_{\Phi}^f = \prod_{k=1}^M \left[\exp \left\{ \Delta t_k [A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r})] \right\} \right] \times \sigma_{\Phi}^i. \quad (2.17)$$

Como passo seguinte nesta análise de evolução, consideremos agora a propagação de um sub-intervalo temporal, onde $\sigma_{\Phi}(\Phi, \Lambda, t)$ evolui no tempo entre os instantes $[t_k, t_{k+1}]$:

$$\sigma_{\Phi}^{k+1} = \exp \left\{ \Delta t_k [A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r})] \right\} \times \sigma_{\Phi}^k. \quad (2.18)$$

Esta equação deve ser repetida M vezes, durante todo o intervalo de tempo que se queira determinar a evolução de $\sigma(\Phi, \Lambda, t)$. Os operadores $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$, definidos nas eqs. (2.14) e (2.15), não comutam entre si. Quando isto ocorre não é possível separá-los um em cada exponencial, sem cometer erros. Com o intuito de minimizar os erros de separação destes operadores, adotamos a técnica de separação de operadores diferenciais do Split-Operator (SO), onde o erro cometido nesta separação é da ordem Δt_k^3 .

Para separarmos a soma dos operadores diferenciais situados numa exponencial, cometendo-se um erro de Δt_k^3 , é necessário a divisão de um destes operadores diferenciais. Na equação para $\sigma_{\Phi}(\Phi, \Lambda, t)$, podemos dividir simetricamente tanto $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ quanto o $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$. Como a ordem de aplicação dos operadores é importante, dois esquemas distintos de separação de operadores,

aparecem:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k + O(\Delta t_k^3), \end{aligned} \quad (2.19)$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k + O(\Delta t_k^3). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Estes são os dois possíveis algoritmos do SO para σ_{Φ} , que podem ser utilizados durante todo o intervalo de evolução. Estas expressões, são o ponto de partida: Numa divisão de M sub-intervalos temporais, a eq. (2.19) ou a (2.20) é aplicada M vezes. Uma discussão mais detalhada sobre a partição dos operadores diferenciais situados no argumento de uma exponencial é feita no apêndice C.

2.3 Evolução das variáveis Φ e Λ

Na seção anterior, escrevemos a forma exponencial da equação de Liouville para σ_{Φ} , no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$. Dividindo simetricamente ou o operador $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ ou $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$, e utilizando a técnica do SO para a separação dos operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial, encontramos duas distintas, mas possíveis equações que relacionam σ_{Φ}^k com σ_{Φ}^{k+1} , dados pelas eqs. (2.19) e (2.20). Uma destas equações deve ser escolhida e aplicada M vezes, no intervalo $[t_i, t_f]$.

No caso acústico, estamos interessados em obter a evolução das variáveis internas Φ e Λ . Para isto, é necessário entender como estas variáveis são afetadas, pela aplicação dos operadores diferenciais $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$. Sendo Φ e Λ independentes entre si, temos que:

$$\exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda) = \sigma_{\Phi}^k(\Phi - \Delta t_k \Lambda, \Lambda), \quad (2.21)$$

$$\exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda) = \sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi). \quad (2.22)$$

Estes dois últimos resultados foram conseguidos pela aplicação da propriedade de operadores diferenciais em exponenciais:

$$\exp \{ \vartheta \partial_{\mathbf{x}} \} f(x) = f(x + \vartheta), \quad (2.23)$$

onde ϑ é uma quantidade independente de x . Portanto, o efeito de se aplicar $\exp(\vartheta \partial_x)$ numa função $f(x)$, é o mesmo de se efetuar uma translação, passando de x para $x + \vartheta$.

Fazendo-se uso desta propriedade, analisamos os esquemas de separação de operadores, obtidos pelo SO. Em ambos os casos, aplicamos sequencialmente três operadores exponenciais em σ_{Φ}^k . Consideremos agora a aplicação destas três exponenciais em detalhes, feita para a eq. (2.19). Após a aplicação da primeira exponencial, temos:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \sigma_{\Phi}^k \left(\Phi - \frac{1}{2} \Delta t_k \Lambda, \Lambda \right), \end{aligned} \quad (2.24)$$

ou seja, a aplicação da primeira exponencial provocou uma translação na variável Φ , deixando Λ inalterada. Passando agora para a aplicação da segunda exponencial,

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \sigma_{\Phi}^k \left(\Phi - \frac{1}{2} \Delta t_k (\Lambda + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi), \Lambda + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi \right). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Esta segunda exponencial, provocou alterações em ambas as variáveis, pois $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ realiza translações na variável Λ . Por fim, aplicamos a última exponencial em σ_{Φ}^k , e em seguida, comparamos σ_{Φ}^k e σ_{Φ}^{k+1} . Desta comparação, as relações de recorrência entre $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda^k(\mathbf{r})$, $\Phi^k(\mathbf{r})$ são:

$$\Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = F_{\Phi(1)}^k - \frac{1}{2} \Delta t_k \left[\Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times F_{\Phi(1)}^k \right], \quad (2.26)$$

$$\Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times F_{\Phi(1)}^k, \quad (2.27)$$

em que

$$F_{\Phi(1)}^k = \Phi_{(1)}^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \Delta t_k \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

De modo análogo, a sequência de aplicação de operadores para o esquema de SO proposto pela eq. (2.20), nos fornece a segunda possível relação entre σ_{Φ}^k e σ_{Φ}^{k+1} . Devido a esta analogia, apenas apresentamos as relações de recorrência:

$$\Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi_{(2)}^k - \Delta t_k F_{\Phi(2)}^k, \quad (2.29)$$

$$\Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = F_{\Phi(2)}^k + \frac{1}{2} \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \left[\Phi_{(2)}^k - \Delta t_k F_{\Phi(2)}^k \right], \quad (2.30)$$

onde

$$F_{\Phi(2)}^k = \Lambda_{(2)}^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}). \quad (2.31)$$

O índice (l), com $l = 1, 2$, que aparece nas quantidades $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ diz respeito aos dois possíveis algoritmos de evolução temporal do SO. Para $l = 1$, o algoritmo é o da eq. (2.19), e para $l = 2$, o algoritmo é o da eq. (2.20). Estas relações de recorrência podem ser escritas na forma matricial, cujas propriedades estão discutidas no apêndice D.

2.4 Passagem de um pulso sonoro entre dois meios semi-infinitos

Desenvolvida a teoria necessária para se conseguir as relações de recorrência para meios lineares e isotrópicos, passamos a efetuar simulações numéricas em sistemas simples, para verificar a veracidade dos algoritmos obtidos. Como um primeiro exemplo, consideramos um sistema composto por dois meios semi-infinitos, cuja interface de separação entre estes dois meios se encontra localizada no ponto \mathbf{x}_i . As substâncias que formam o sistema são homogêneas, isotrópicas e uniformes, cujas razões entre densidades, velocidades de propagação do meio e impedâncias acústica característica são dados por

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = 32, \quad \frac{c_2}{c_1} = 0.25 \quad \text{e} \quad \frac{Z_2}{Z_1} = 8,$$

onde a densidade do meio onde o pacote está centrado $\rho_1 = 1.0 \text{ Kg/m}^3$ e a velocidade de propagação do som $c_1 = 375 \text{ m/s}$.

Utilizando uma discretização espacial uniforme, além da aproximação de até primeiros vizinhos para as derivadas espaciais, as eqs. (2.26)–(2.28), são dadas por:

$$\Lambda_i^{k+1} = \Lambda_i^k + \frac{\Delta t_k c_i^2 \rho_i}{2\Delta x^2} \left(\frac{F_{\Phi_{i+1}}^k - F_{\Phi_i}^k}{\rho_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{F_{\Phi_i}^k - F_{\Phi_{i-1}}^k}{\rho_{i-\frac{1}{2}}} \right), \quad (2.32)$$

$$\Phi_i^{k+1} = F_{\Phi_i}^k - \frac{1}{2}\Delta t_k \Lambda_i^{k+1}. \quad (2.33)$$

em que:

$$\frac{1}{\rho_{i\pm\frac{1}{2}}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}} + \frac{1}{\rho_i} \right), \quad (2.34)$$

$$F_{\Phi_i}^k = \Phi_i^k - \frac{1}{2}\Delta t_k \Lambda_i^k. \quad (2.35)$$

Neste sistema, existe um pacote de ondas gaussiano que se encontra completamente no meio

1, centrado em $\mathbf{x}_c = 750$ m, possuindo as seguintes condições iniciais:

$$\Phi_{SO}^i(\mathbf{x}) = 1 + \mathfrak{K} \exp \left\{ -\bar{\alpha} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)^2 \right\}, \quad (2.36)$$

$$\Lambda_{SO}^i(\mathbf{x}) = 0. \quad (2.37)$$

As grandezas $\bar{\alpha} = 0.001$ e \mathfrak{K} são constantes positivas, diferentes de zero. A quantidade $\bar{\alpha}$, representa a taxa de decaimento do pacote. Quanto maior seu valor, mais rapidamente o pacote tende a zero, restringindo sua área de atuação. O parâmetro \mathfrak{K} é a amplitude de variação da pressão, nas partículas do meio. Ele é adimensional, calculado pela razão:

$$\mathfrak{K} = \frac{\Phi_{\max} - \Phi_{normal}}{\Phi_{normal}} = 0.0013. \quad (2.38)$$

A pressão máxima $\Phi_{\max} = 1.0013$ atm, é o máximo valor de pressão provocado pelo pacote, nas partículas que compõem o meio. A pressão normal $\Phi_{normal} = 1$ atm, é o valor da pressão, quando o meio não está sendo perturbado. Nas figuras mostradas a seguir, adotamos uma discretização espacial $\Delta \mathbf{x} = 0.5$ cm e temporal $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ s.

A figura 2-1 representa a simulação numérica da evolução temporal do pacote de ondas neste sistema de dois meios semi-infinitos. No instante inicial, o pacote de ondas esta contido apenas no meio 1, e, devido as condições iniciais de $\Phi(\mathbf{x}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{x}, t)$, o pacote acaba sofrendo uma divisão simétrica de sua forma inicial, de modo que os dois pacotes de ondas resultantes apresentam as mesmas características, mas movimentam-se em direções opostas. Um destes pacotes acaba atingindo uma interface que separa os meios 1 e 2, os dois únicos meios que formam o sistema, sofrendo transmissão e reflexão parciais. A partir do instante de tempo 2.0 s, o pacote de onda refletido e transmitido estão bem delineados.

Podemos comparar os coeficientes de transmissão $\mathbf{T}_{2 \rightarrow 1}$ e reflexão $\mathbf{R}_{2 \rightarrow 1}$ obtidos pela simulação numérica com os valores teóricos destes coeficientes para uma interface simples. Estes coeficientes são obtidos aplicando as condições de contorno da interface, para uma onda monocromática $\phi_k(\mathbf{x}, t)$. Esta onda, pode ser decomposta num produto de dois termos, um contendo a dependência temporal e o outro com a espacial,

$$\phi_k(\mathbf{x}, t) = \tilde{\phi}_k(\mathbf{x}) \exp \{-i \omega t\}, \quad (2.39)$$

onde:

$$\tilde{\phi}_k(\mathbf{x}) = \begin{cases} A \exp \{ik_1 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\} + B \exp \{-ik_1 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\} & \text{para } \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_i, \\ C \exp \{ik_2 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\} & \text{para } \mathbf{x} \geq \mathbf{x}_i, \end{cases} \quad (2.40)$$

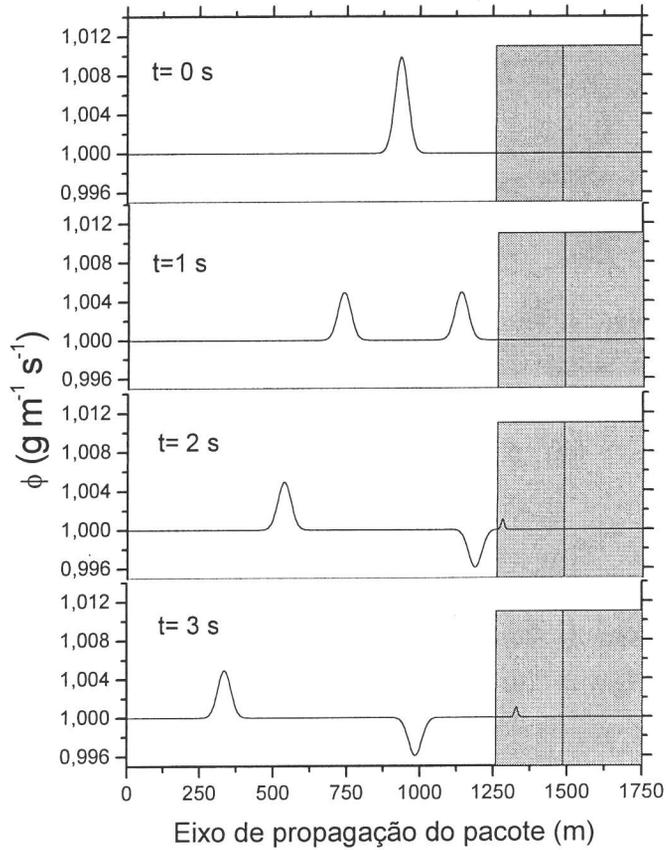


Figura 2-1: Pacote de ondas gaussiano incidindo num meio semi-infinito. O meio 1 contém completamente o pacote de ondas nos instantes iniciais.

em que as amplitudes A , B e C , assumem valores particulares para cada frequência angular ω . Os vetores de onda $k_1 = \omega/c_1$ e $k_2 = \omega/c_2$.

Os coeficientes $\mathbf{T}_{2 \rightarrow 1} = C/A$ e $\mathbf{R}_{2 \rightarrow 1} = B/A$, dependem densidades relativas entre os dois meios, da razão entre as velocidades propagação das ondas em cada meio. Estes coeficientes são obtidos aplicando-se as duas condições de contorno nas interfaces, a saber:

- A continuidade da pressão $\Phi(\mathbf{x}, t)$,
- A continuidade do tensor de stress $\varpi(\mathbf{x}) = \kappa^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x}, t)$.

Sendo \mathbf{x}_i^+ e \mathbf{x}_i^- , os limites à direita e à esquerda da interface entre os meios 1 e 2,

$$\Phi(\mathbf{x}_i^+, t) = \Phi(\mathbf{x}_i^-, t), \quad (2.41)$$

$$\varpi(\mathbf{x}_i^+, t) = \varpi(\mathbf{x}_i^-, t). \quad (2.42)$$

Com estas condições de contorno, obtemos as equações $A + B = C$ e $A - B = (\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1) C$. Com estas igualdades, podemos obter as razões C/A e B/A , a saber:

$$\mathbf{T}_{2 \rightarrow 1} = \frac{2}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 + 1}, \quad (2.43)$$

$$\mathbf{R}_{2 \rightarrow 1} = \frac{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 - 1}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 + 1}. \quad (2.44)$$

Uma vez que a razão $\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 = 8$, os coeficientes de transmissão e reflexão apresentam os valores $\mathbf{T}_{2 \rightarrow 1} = 2/9$ e $\mathbf{R}_{2 \rightarrow 1} = 7/9$. Comparando os valores obtidos numericamente, verificamos uma concordância entre os resultados.

2.5 Passagem de um pulso sonoro por uma parede

Uma vez elaborada a discussão da passagem de um pulso entre dois meios semi-infinitos, considere agora o caso de um pulso atravessando uma parede. O meio 1 é considerado infinito e está livre de qualquer perturbação externa. O meio 2 é finito, de espessura $L = 260$ m, apresentando seu início no ponto $\mathbf{x}_{ib} = 1055$ m e término em $\mathbf{x}_{fb} = 1315$ m. As densidades, velocidades de propagação do som e impedâncias acústica característica são constantes ao longo de cada meio, de razões dadas por:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = 4.5, \quad \frac{c_2}{c_1} = 2 \quad \text{e} \quad \frac{\mathbf{Z}_2}{\mathbf{Z}_1} = 9,$$

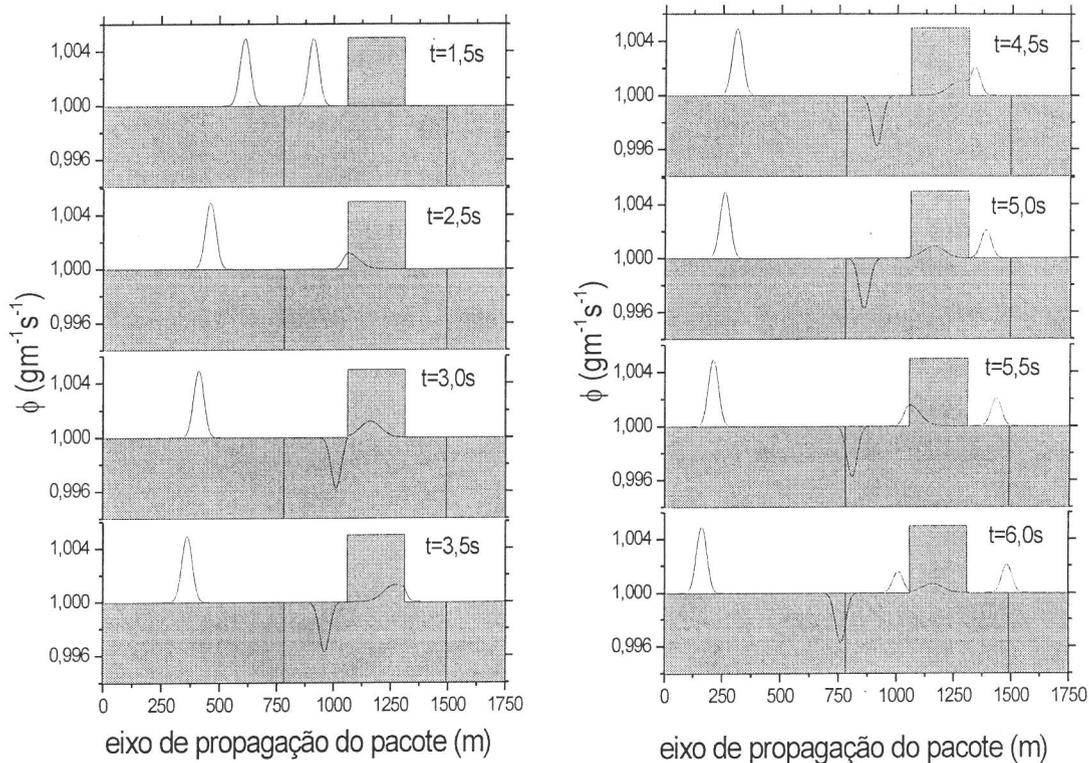


Figura 2-2: *Tunelamento de um pacote de ondas para a pressão numa barreira. A largura da barreira é suficientemente grande para que o fenômeno de reflexão na segunda interface seja desacoplada ao processo de transmissão da primeira interface.*

onde a velocidade de propagação do som do meio onde o pacote está centrado $c_1 = 125 \text{ m/s}$ e a densidade $\rho_1 = 1.0 \text{ Kg/m}^3$.

Neste sistema, existe um pacote de ondas gaussiano que se encontra completamente no meio 1, centrado em $x_c = 750 \text{ m}$, possuindo as mesmas condições iniciais discutidas na seção anterior. Dadas estas condições, vemos que o pacote se divide igualmente, logo depois do instante inicial. Uma das partes caminha no sentido da parede, enquanto que o outro se movimenta na direção oposta. No instante 2.5 s, o pacote de ondas incide na primeira superfície de separação, a qual corresponde a superfície delimitante entre os meios 1 e 2. O pacote então sofrerá reflexão parcial, com inversão na fase. No caso aqui tratado, a espessura da parede que separa dois meios é maior do que a semi-largura do pacote de ondas considerado. Isto nos permite comparar os resultados obtidos numericamente com as expressões teóricas dos coeficientes de transmissão e

reflexão, para meios semi-infinitos. Desta forma, os coeficientes de transmissão e reflexão no ponto $x_{ib} = 1055$ m, $\mathbf{T}_{1 \rightarrow 2}$ e $\mathbf{R}_{1 \rightarrow 2}$, são:

$$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 2} = \frac{2}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 + 1} = 0.2, \quad (2.45)$$

$$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 2} = \frac{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 - 1}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1 + 1} = 0.8. \quad (2.46)$$

No instante 3.0 s, vemos que uma parte do pacote de onda penetra na parede. Esta parcela, caminha no meio 2, sofrendo nova divisão, ao incidir na segunda superfície de separação entre os meios 2 e 1. No instante 4.5 s, vemos as novas parcelas transmitidas e refletidas. Uma vez que $\mathbf{Z}_2 > \mathbf{Z}_1$, os pacotes transmitidos e refletidos não sofrem inversão de fase. A parcela refletida caminha em direção a superfície que separa os meios 1 e 2, alcançando-a no instante 5.5 s. Com isto, os coeficientes totais de transmissão e reflexão pela parede, $\mathbf{T}_{1 \rightarrow 3} = \mathbf{T}_{1 \rightarrow 2} \times \mathbf{T}_{2 \rightarrow 3}$ e $\mathbf{R}_{1 \rightarrow 3} = \mathbf{T}_{1 \rightarrow 2} \times \mathbf{R}_{2 \rightarrow 3}$ são dados por:

$$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 3} = \frac{4\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_1}{(\mathbf{Z}_2 + \mathbf{Z}_1)^2} = 0.36, \quad (2.47)$$

$$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 3} = \frac{2\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_2 - \mathbf{Z}_1)}{(\mathbf{Z}_2 + \mathbf{Z}_1)^2} = 0.16. \quad (2.48)$$

Estes coeficientes são referentes a transmissão e reflexão sofrida pela parcela do pacote de ondas que penetrou no meio 2. Finalmente, as parcelas transmitidas e refletidas são vistas para o instante de tempo 6.0 s. Aqui, os pacotes de onda transmitido e refletido não sofrem mudanças de fase. Toda a dinâmica descrita pode ser vista na figura 2-2. Os coeficientes referentes a segunda transmissão e reflexão, da parcela que inicialmente penetrou na parede, são dados por $\mathbf{T}_{1 \rightarrow 1} = \mathbf{T}_{1 \rightarrow 2} \times \mathbf{R}_{2 \rightarrow 3} \times \mathbf{T}_{2 \rightarrow 1}$ e $\mathbf{R}_{1 \rightarrow 1} = \mathbf{T}_{1 \rightarrow 2} \times \mathbf{R}_{2 \rightarrow 3} \times \mathbf{R}_{2 \rightarrow 1}$. Estes coeficientes, expressos em termos do pacote de onda inicialmente incidente no sistema, são dados pelas seguintes relações:

$$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 1} = \frac{4\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_2 - \mathbf{Z}_1)}{(\mathbf{Z}_2 + \mathbf{Z}_1)^3} = 0.288, \quad (2.49)$$

$$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 1} = \frac{2\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_2 - \mathbf{Z}_1)^2}{(\mathbf{Z}_2 + \mathbf{Z}_1)^3} = 0.128. \quad (2.50)$$

A comparação entre resultados teóricos e numéricos, são fornecidos pela tabela 2.1. Portanto, o algoritmo do SO reproduz os resultados teóricos dos coeficientes de transmissão e reflexão.

Tabela 2.1: Comparação entre os coeficientes de transmissão e reflexão

Coef.	SO	exato	Coef.	SO	exato
$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 2}$	0.2	0.2	$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 3}$	0.16	0.16
$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 2}$	0.8	0.8	$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 1}$	0.28	0.288
$\mathbf{T}_{1 \rightarrow 3}$	0.36	0.36	$\mathbf{R}_{1 \rightarrow 1}$	0.12	0.128

Para finalizar esta discussão, vemos também que a parcela refletida quando o pacote atinge a primeira interface sofre mudança de fase. Já a parte refletida na segunda interface isso não ocorre. Isto porque a parede apresenta maior impedância acústica característica do que o meio externo. Para a parcela do pacote de ondas que incidiu sobre a interface $1 \rightarrow 2$, a parte refletida sofreu uma inversão de fase, o mesmo não ocorreu com a parte refletida pela interface $2 \rightarrow 1$. Também se constata que a parte que foi transmitida ao meio 2 é menor do que o pico do pacote de onda incidente, enquanto que para o meio 1, temos que este pico é maior do que incidente.

2.6 Emissor de pulsos sonoros

Como um terceiro sistema teste, consideremos o algoritmo do SO dados pelas eqs. (2.26) e (2.27), no estudo da evolução temporal de um pacote de ondas para a pressão, que apresenta as mesmas condições iniciais dadas pela eqs. (2.36) e (2.37), da seção anterior. Entretanto, este pacote de ondas se encontra em um sistema formado por três meios de distintas impedâncias acústicas características \mathbf{Z}_1 , \mathbf{Z}_2 e \mathbf{Z}_3 . O segundo meio está situado entre os meios 1 e 3, ambos considerados semi-infinitos. Estes meios apresentam mesma densidade, mas velocidades de propagação da onda c_1 , c_2 e c_3 diferentes, obedecendo as razões:

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{c_2}{c_3} = 0.5 \quad (2.51)$$

Uma vez que as densidades são todas iguais, razões idênticas à das velocidades se observam para as impedâncias acústicas características. Neste sistema, o pacote de ondas gaussiano encontra-se centrado na metade do meio 2, no instante inicial. Devido a diferenças nas impedâncias acústicas características, este pacote será parcialmente transmitido ao incidir nas interfaces do sistema.

Este sistema foi escolhido por apresentar uma gama de fenômenos passíveis de observação:

- i) Para os meios semi-infinitos, o meio 2, age como se fosse um emissor de pulsos sonoros, de igual intervalo de tempo mas de intensidades que decaem com o tempo;
- ii) Pelo fato de que $\mathbf{Z}_1 > \mathbf{Z}_2 > \mathbf{Z}_3$, dois fenômenos diferentes ocorrerão: Na interface $2 \rightarrow 1$,

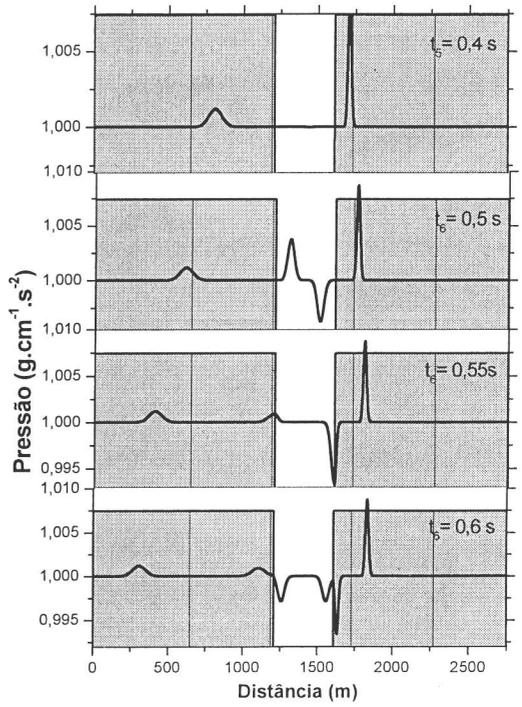
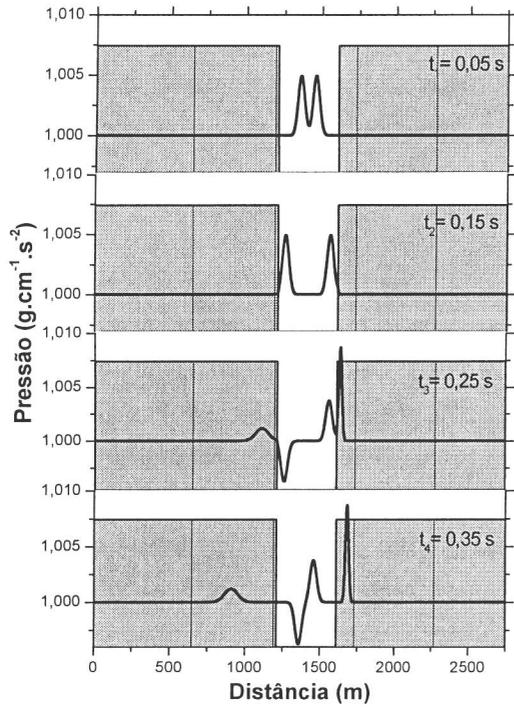


Figura 2-3: *Evolução temporal de um pacote de ondas para a pressão. O pacote parte do centro do sistema, no meio 2.*

temos que $Z_2 < Z_1$, e o pacote de ondas irá passar para um meio de maior impedância acústica característica. Nesta situação, uma inversão de fase irá ocorrer na parte refletida e a parte transmitida do pacote de ondas possuirá um pico menor do que o da onda incidente. Na interface $2 \rightarrow 3$, o pacote passará para um meio de menor impedância acústica característica. Neste caso, não haverá inversão de fase na parte refletida e a parte transmitida terá um pico maior do que o pico do pacote de onda incidente;

- iii) Devido a estes valores específicos de impedâncias acústicas características, observa-se internamente ao meio 2, os fenômenos de interferência destrutiva e construtiva (alternadas), devido a inversões de fase em apenas uma das duas interfaces. Estas interferências ocorrem sempre na metade do meio 2;
- iv) Uma vez que podemos acompanhar a evolução temporal do pacote de ondas, determinamos de quanto o máximo da pressão caminha entre dois instantes de tempo, possibilitando medir a velocidade de grupo. Como os meios são homogêneos, as velocidades de fase e de grupo coincidem.

As impedâncias acústicas características determinam os valores dos coeficientes de transmissão e reflexão \mathbf{T} e \mathbf{R} , para cada meio semi-infinito:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{2 \rightarrow 1} &= \frac{2}{Z_1/Z_2+1} = \frac{2}{3}, & \mathbf{R}_{2 \rightarrow 1} &= \frac{Z_1/Z_2-1}{Z_1/Z_2+1} = \frac{1}{3}, \\ \mathbf{T}_{2 \rightarrow 3} &= \frac{2}{Z_3/Z_2+1} = \frac{4}{3}, & \mathbf{R}_{2 \rightarrow 3} &= \frac{Z_3/Z_2-1}{Z_3/Z_2+1} = -\frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Em ambas interfaces, a condição $\mathbf{T} + \mathbf{R} = 1$ é verificada, porém o sinal negativo para o coeficiente \mathbf{R} indica que o coeficiente de transmissão é maior do que 1.

Conforme pode ser visto na figura 2-3, devido às condições iniciais do pacote, ele sofre uma divisão igualitária. Cada uma destas partes, assumem direções opostas. No instante 0.1 s, o pacote de onda total incide nas interfaces do sistema. No instante 0.25 s, podemos ver as partes refletidas e transmitidas do pacote de onda inicial para cada um dos meios. Para a parcela do pacote de ondas que incidiu sobre a interface $2 \rightarrow 1$, a parte refletida sofreu uma inversão de fase, o mesmo não ocorrendo com a parte refletida pela interface $2 \rightarrow 3$. Neste mesmo instante, também se constata que a parte que foi transmitida ao meio 1 é menor do que o pico do pacote de onda incidente, enquanto que para o meio 3, temos que este pico é maior do que o incidente. No instante 0.4 s, uma interferência destrutiva total ocorre no meio 2. Isto ocorre porque os coeficientes de reflexão são iguais para estas duas interfaces. Finalmente, no instante 0.6 s, novamente os pacotes de ondas chegam as interfaces, sofrendo novas transmissões e reflexões.

Tabela 2.2: Coeficientes de transmissão e reflexão exatos e via Split-Operator

Coeficientes	Numérico	Exato
$\mathbf{T}_{2 \rightarrow 1}$	0.646	0.667
$\mathbf{T}_{2 \rightarrow 3}$	1.354	1.333
$\mathbf{R}_{2 \rightarrow 1}$	0.354	0.333
$\mathbf{R}_{2 \rightarrow 3}$	0.354	0.333

Tabela 2.3: Valor esperado da posição para os pacotes transmitido e refletido

$t(s)$	$\langle x_R(t) \rangle_{2 \rightarrow 1}$	$\langle x_T(t) \rangle_{2 \rightarrow 1}$	$\langle x_R(t) \rangle_{2 \rightarrow 3}$	$\langle x_T(t) \rangle_{2 \rightarrow 3}$
0, 25	1260	1100	1560	1610
0, 35	1360	900	1460	1660
0, 4	1410	800	1410	1685
0, 5	1510	600	1310	1735

Uma vez que todos os três meios são homogêneos, as velocidades de fase e de grupo coincidem. Denotando o valor esperado da posição do pacote de ondas transmitido e refletido por $\langle x_R(t) \rangle$ e $\langle x_T(t) \rangle$, respectivamente, podemos construir a tabela 2.2. Através desta, encontramos que o módulo das velocidades de grupo refletida, para ambas as interfaces são $|V_{gR}(2 \rightarrow 1)| = |V_{gR}(2 \rightarrow 3)| = 1000$ m/s. Para as velocidades de grupo transmitida, temos que $|V_{gT}(2 \rightarrow 1)| = 2000$ m/s, e $|V_{gT}(2 \rightarrow 3)| = 500$ m/s. Os resultados obtidos para a velocidade de grupo são iguais às velocidades de fase c_1 , c_2 e c_3 , definidas anteriormente.

Com estes exemplos simples, verificamos a confiabilidade do método do Split-Operator, aplicado a sistemas acústicos.

2.7 Split-Operator e Método tradicional (FDTD)

A técnica do SO, não é a única maneira possível para se estudar a evolução temporal de um pacote de ondas. Existem outros métodos computacionais, a maioria mais antigos do que ele. Um em particular, é muito utilizado em diversas partes da Física, incluindo a Acústica. Ele é denominado método das diferenças finitas em domínio temporal (FDTD), sigla inglesa de *finite difference time-domain method*. Ele foi inicialmente desenvolvido para estudar ondas eletromagnéticas[13], sendo hoje utilizado em telecomunicações[37]. Mais recentemente, métodos de diferenças finitas baseados na discretização de equações de segunda ordem no tempo tem sido desenvolvidos e aplicados no estudo de propagação de ondas sísmicas [38].

2.7.1 Método do FDTD aplicado a sistemas acústicos lineares

Para sistemas acústicos lineares e homogêneos, o FDTD trabalha simultaneamente com as equações de Newton e da continuidade. Nestas expressões, a pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ estão inter-relacionadas, constituindo-se neste caso o par de variáveis que o FDTD utiliza no estudo da evolução temporal de um pacote de ondas. Para isto, devemos efetuar uma discretização temporal e outra espacial nas eqs. (2.1) e (2.2):

- Para a discretização temporal no ponto $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$, a derivada temporal $\partial_t \Phi_i^k$ é obtida pela subtração dos valores da pressão nos instantes t_k e t_{k+1} , dividido pelo incremento temporal Δt_k :

$$\partial_t \Phi_i^k = \frac{\Phi_i^{k+1} - \Phi_i^k}{\Delta t_k}. \quad (2.53)$$

- Para a discretização espacial, adotaremos um espaçamento uniforme de pontos, $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = cte$, com a aproximação de até segundos vizinhos para as derivadas espaciais de primeira e segunda ordem:

$$\partial_{\mathbf{x}} \Phi_i^k = \frac{1}{12\Delta \mathbf{x}} [\Phi_{i-2}^k - \Phi_{i+2}^k] + \frac{8}{12\Delta \mathbf{x}} [\Phi_{i+1}^k - \Phi_{i-1}^k], \quad (2.54)$$

$$\partial_{\mathbf{x}}^2 \Phi_i^k = \frac{1}{12\Delta \mathbf{x}^2} [\Phi_{i-2}^k - \Phi_{i+2}^k] + \frac{4}{3\Delta \mathbf{x}^2} [\Phi_{i+1}^k - \Phi_{i-1}^k] - \frac{5}{2\Delta \mathbf{x}^2} \Phi_i^k. \quad (2.55)$$

Utilizando as eqs (2.53)–(2.55), as eqs. (2.1) e (2.2) discretizadas são dadas por:

$$\frac{\mathbf{v}_i^{k+1} - \mathbf{v}_i^k}{\Delta t_k} + \frac{\rho_i^{-1}}{12\Delta \mathbf{x}} \left\{ \Phi_{i-2}^k - \Phi_{i+2}^k + 8 \left(\Phi_{i+1}^k - \Phi_{i-1}^k \right) \right\} = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{\Phi_i^{k+1} - \Phi_i^k}{\Delta t_k} + \frac{\kappa_i^{-1}}{12\Delta \mathbf{x}} \left\{ \mathbf{v}_{i-2}^k - \mathbf{v}_{i+2}^k + 8 \left(\mathbf{v}_{i+1}^k - \mathbf{v}_{i-1}^k \right) \right\} = 0, \quad (2.57)$$

cujo erro esta na ordem Δt_k^2 . As relações de recorrência entre $\Phi^{k+1}(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x})$ e $\Phi^k(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}^k(\mathbf{x})$, são:

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \mathbf{v}_i^k - \frac{\Delta t_k}{12\Delta \mathbf{x} \rho_i} \left[\Phi_{i-2}^k - \Phi_{i+2}^k + 8 \left(\Phi_{i+1}^k - \Phi_{i-1}^k \right) \right], \quad (2.58)$$

$$\Phi_i^{k+1} = \Phi_i^k - \frac{\Delta t_k}{12\Delta \mathbf{x} \kappa_i} \left[\mathbf{v}_{i-2}^k - \mathbf{v}_{i+2}^k + 8 \left(\mathbf{v}_{i+1}^k - \mathbf{v}_{i-1}^k \right) \right]. \quad (2.59)$$

2.7.2 Método do SO de ordem Δt_k^2 , aplicado a sistemas acústicos lineares

Para compararmos o método do Split-Operator com o FDTD, é necessário a utilização do algoritmo do Split-Operator que apresenta a mesma ordem no erro numérico. Por isto,

apresentamos nesta seção uma breve discussão deste outro algoritmo numérico, que é obtido quando simplesmente ignoramos a não-comutabilidade dos operadores $A_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = -\Lambda(\mathbf{r}, t) \partial_{\Phi}$ e $B_{\Phi}(\mathbf{r}, t) = [\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t)] \partial_{\Lambda}$.

Iniciaremos agora o estudo do algoritmo de evolução temporal do SO com erros de ordem Δt_k^2 . Para isto, consideramos a forma exponencial da equação de Liouville a para a densidade $\sigma_{\Phi}^k = \sigma(\Lambda, \Phi, t_k)$, entre os instantes de tempo t_k e $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$. A ordem de aplicação ainda continua importante, fornecendo dois algoritmos de evolução distintos:

$$\sigma_{\Phi}^{k+1} = \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k, \quad (2.60)$$

e

$$\sigma_{\Phi}^{k+1} = \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k. \quad (2.61)$$

A aplicação dos operadores diferenciais, situados no argumento das exponenciais, em σ_{Φ}^k , se processa de maneira idêntica aos algoritmos do SO, discutidos anteriormente. As variáveis Φ e Λ são independentes entre si, continuando válidas as propriedades vistas nas eqs. (2.21) e (2.22). Após a aplicação do último operador, igualamos as variáveis internas da função σ_{Φ}^{k+1} , no instante t_{k+1} , com as variáveis de σ_{Φ}^k , as quais sofreram a ação dos operadores $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$. Através desta igualdade, obtemos as relações de recorrência para estes dois possíveis e distintos algoritmos:

$$\Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi_{(1)}^k(\mathbf{r}) - \Delta t_k \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}), \quad (2.62)$$

$$\Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) - \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}). \quad (2.63)$$

e

$$\Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda_{(2)}^k(\mathbf{r}) - \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}), \quad (2.64)$$

$$\Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}) - \Delta t_k \Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}). \quad (2.65)$$

Para diferenciar as quantidades $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ obtidas por estes dois distintos algoritmos, adotaremos o índice (l), com $l = 1, 2$. Quando $l = 1$, nos referimos a partição dos operadores $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ dada na eq. (2.60). Para $l = 2$, a partição se refere a eq. (2.61). Cumpre ressaltar que, mesmo que as condições iniciais sejam idênticas, $\Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) \neq \Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) \neq \Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r})$. Este dois possíveis algoritmos podem ser reescritos sob a forma matricial, cujas propriedades são discutidas no apêndice D.

Vamos agora discretizar as eqs. (2.62) e (2.63), referente ao primeiro algoritmo possível.

Para o caso onde não haja variações nos valores da densidade, $\partial_{\mathbf{x}} [\ln(\rho_i)] = 0$, e consequentemente:

$$\Phi_i^{k+1} = \Phi_i^k - \Delta t_k \Lambda_i^k, \quad (2.66)$$

$$\Lambda_i^{k+1} = \Lambda_i^k - \frac{\Delta t_k c_i^2}{12\Delta \mathbf{x}^2} \left[16 \left(\Phi_{i+1}^k - \Phi_{i-1}^k \right) - \left(\Phi_{i+2}^k + \Phi_{i-2}^k \right) - 30\Phi_i^k \right]. \quad (2.67)$$

Apresentadas as relações no caso unidimensional, passamos a descrever o sistema, onde será feita a evolução temporal de um pacote de onda através dos dois métodos. Considere um meio infinito, uniforme, isotrópico e homogêneo, de densidade 1 kg/m^3 e velocidade de propagação do som igual a 1250 m/s . Um pacote de ondas gaussiano, centrado no ponto \mathbf{x}_c sofrerá uma evolução temporal, apresentando as seguintes condições iniciais:

Passamos a descrever a dinâmica do sistema: O pacote de ondas é livre para movimentar-se ao longo do eixo \mathbf{x} . As condições iniciais dadas pelas eqs. (2.36) e (2.37), fazem com que o pacote seja dividido, sendo que cada parte movimenta-se em uma direção. Enquanto o pacote de onda viaja, os erros numéricos começam a aparecer. Fixemos agora no instante $t = 3 \text{ s}$, na figura 2-4. Elas mostram que a não-unitariedade da matriz evolução temporal do método FDTD, provoca um ruído em seus resultados. Um erro equivalente não aparece para o método do SO. Portanto, o SO apresenta maior estabilidade numérica que o FDTD, produzindo resultados mais confiáveis para a evolução temporal das grandezas a se medir, para as mesmas condições utilizadas.

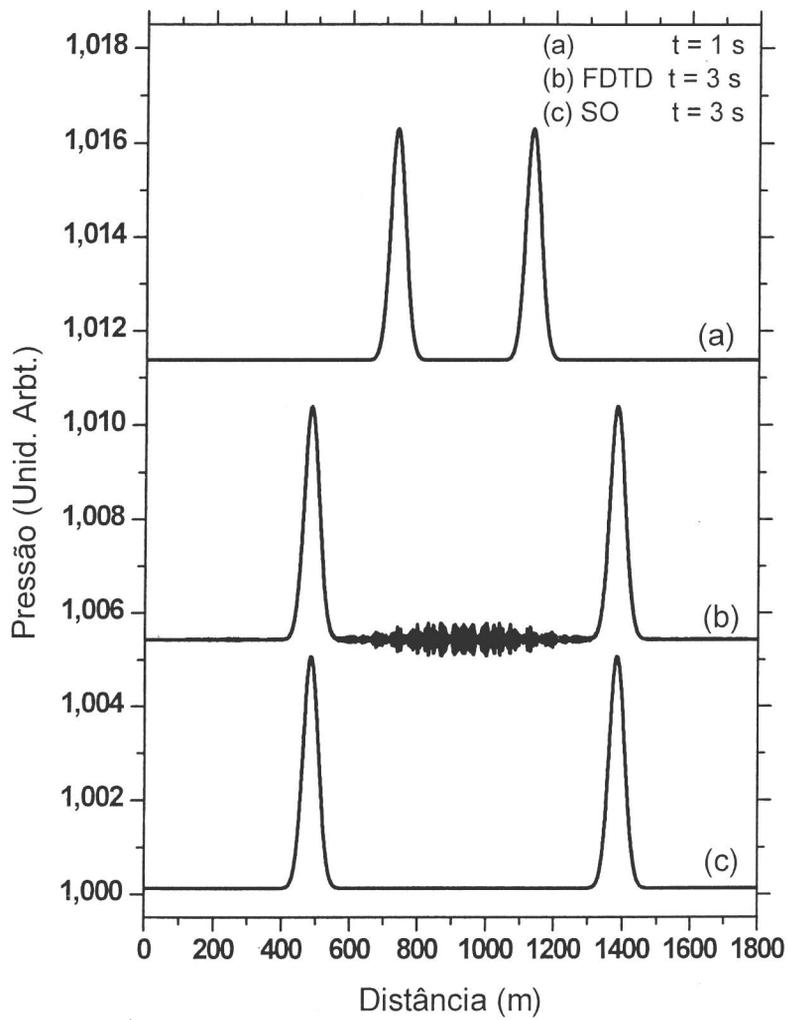


Figura 2-4: Comparação entre os algoritmos FDTD e o Split-Operator para um pacote de onda sendo evoluído no tempo.

Capítulo 3

O Método do Split-Operator

Modificado

No capítulo 2 estudamos o comportamento de um pacote de ondas acústico, propagando-se em meios lineares. Para isto, utilizamos as relações de recorrência explícitas entre $\Phi^{k+1}(\mathbf{x})$, $\Lambda^{k+1}(\mathbf{x})$ e $\Phi^k(\mathbf{x})$, $\Lambda^k(\mathbf{x})$, calculadas em todos os pontos do espaço. Estas relações foram obtidas após a utilização da técnica do Split-Operator para a separação dos operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial. Os erros cometidos na utilização desta técnica são da ordem de Δt^3 , desprezíveis no limite em que o incremento temporal entre dois instantes consecutivos Δt satisfaçam os critérios de estabilidade deduzidos no apêndice B. As relações de recorrência obtidas via SO conservam a área do espaço de fase e são temporalmente inversíveis, algo que não ocorre com técnicas mais tradicionais, como a do FDTD.

Vamos agora discutir um algoritmo alternativo, mas também baseado na técnica do SO para separar os operadores diferenciais situados no argumento de uma exponencial. Este algoritmo, o qual denominaremos de Split-Operator Modificado (MSO), apresenta algumas vantagens frente ao anterior, como uma maior estabilidade numérica, além de consumir um tempo computacional menor, para sistemas equivalentes.

Analogamente ao SO tradicional, partimos da equação de Liouville para a função $\sigma_{\Phi}^k = \sigma(\Phi, \Lambda, t_k)$, reescrevendo-a na forma exponencial. Nesta forma exponencial, existe uma integral temporal, cujos limites de integração são t_i (tempo inicial), e t_f o final. A integral total pode ser transformada numa somatória de M integrais temporais,

$$\int_{t_i}^{t_f} [A_{\Phi}(\mathbf{x}, t) + B_{\Phi}(\mathbf{x}, t)] dt = \sum_{k=1}^M \int_{t_k}^{t_{k+1}} [A_{\Phi}(\mathbf{x}, t) + B_{\Phi}(\mathbf{x}, t)] dt, \quad (3.1)$$

onde $t_{k+1} = t_k + \Delta t$, e os operadores $A_\Phi(\mathbf{x}, t)$ e $B_\Phi(\mathbf{x}, t)$ definidos no capítulo anterior. A somatória dentro do argumento da exponencial se converte numa produtória de exponenciais,

$$\sigma_\Phi^f = \prod_{k=1}^M \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+1}} [A_\Phi(\mathbf{x}, t) + B_\Phi(\mathbf{x}, t)] dt \right\} \times \sigma_\Phi^i, \quad (3.2)$$

Adicionalmente a este procedimento, consideramos sucessivas aplicações de um mesmo tipo de esquema de SO em σ_Φ^k , relacionando o último operador exponencial de uma aplicação, com o primeiro da aplicação seguinte. Para expor melhor esta idéia, considere duas aplicações sucessivas da forma exponencial da equação de Liouville:

$$\begin{aligned} \sigma_\Phi^{k+2} = & \exp \left\{ \int_{t_{k+1}}^{t_{k+2}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \exp \left\{ \int_{t_{k+1}}^{t_{k+2}} B_\Phi(\mathbf{x}, t) dt \right\} \times \\ & \exp \left\{ \int_{t_{k+1}}^{t_{k+2}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \\ & \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+1}} B_\Phi(\mathbf{x}, t) dt \right\} \times \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \sigma_\Phi^k. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Analisando a eq. (3.3), vemos a possibilidade de unir as integrais temporais para $A_\Phi(\mathbf{x}, t)$, que aparecem consecutivamente. Este fato a princípio, pode parecer irrelevante, porém, quando consideramos um grande número de exponenciais, esta redução passa a ser significativa. Levando em conta todos os M passos temporais entre $[t_i, t_f]$, vemos que existem $3M$ operadores exponenciais no SO tradicional, mas apenas $2M + 1$, no MSO. A redução de $M - 1$ exponenciais, para um mesmo intervalo de evolução temporal constitui-se numa das vantagens deste novo esquema do Split-Operator. A parte da economia de tempo de processamento, nós também evitamos os erros numéricos, referentes a aplicação das exponenciais em $\sigma_\Phi(\Phi, \Lambda, t)$.

Assim como no SO tradicional, o algoritmo MSO também conserva a área total do espaço de fase, e apresenta erros na ordem Δt^3 . Entretanto, vemos que o MSO apresenta a primeira e a última sequência de aplicação de operadores diferente das demais:

$$\begin{aligned} \sigma_\Phi^f = & \exp \left\{ \int_{t_{M-1}}^{t_M} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \\ & \prod_{k=1}^{M-1} \left[\exp \left\{ \int_{t_{k+1}}^{t_{k+2}} B_\Phi(\mathbf{x}, t) dt \right\} \times \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+2}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \right] \times \\ & \exp \left\{ \int_{t_I}^{t_{I+1}} B_\Phi(\mathbf{x}, t) dt \right\} \times \exp \left\{ \int_{t_I}^{t_{I+1}} \frac{A_\Phi(\mathbf{x}, t)}{2} dt \right\} \times \sigma_\Phi^i. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Os operadores A_Φ e B_Φ apresentam dependências temporais. Isto faz com que seja necessário

adotar critérios, quando tratamos as integrais temporais. Para a integral temporal do operador $B_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$, a análise é idêntica à efetuada no SO tradicional. Consideramos este operador no instante de tempo que estiver no limite inferior da integral temporal, ou seja,

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} B_{\Phi}(\mathbf{x}, t) dt = \Delta t B_{\Phi}(\mathbf{x}, t_k). \quad (3.5)$$

A análise da integral temporal do operador $A_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$ é mais complexa. Nos instantes inicial e final, este operador será considerado no limite inferior de integração. Para os outros instantes, $A_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$ é considerado no instante temporal médio entre o intervalo $[t_{k+2}, t_k]$:

$$\int_{t_k}^{t_{k+2}} A_{\Phi}(\mathbf{x}, t) dt = 2\Delta t A_{\Phi}(\mathbf{x}, t_{k+1}). \quad (3.6)$$

Adotadas estas aproximações, a eq. (3.4), é reescrita como:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^f = & \exp \left\{ \frac{\Delta t}{2} A_{\Phi}^{M-1}(\mathbf{x}) \right\} \times \\ & \prod_{k=2}^{M-1} \left[\exp \left\{ \Delta t B_{\Phi}^k(\mathbf{x}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t A_{\Phi}^k(\mathbf{x}) \right\} \right] \times \\ & \exp \left\{ \Delta t B_{\Phi}^i(\mathbf{x}) \right\} \times \exp \left\{ \frac{\Delta t}{2} A_{\Phi}^i(\mathbf{x}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^i. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Desejamos agora estudar a evolução temporal das variáveis internas de σ_{Φ}^k , ou seja, determinar como a pressão $\Phi(\mathbf{x}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{x}, t) = \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t)$ variam com o decorrer do tempo. Por isto, aplicamos certas propriedades de operadores diferenciais, situados no argumento de exponenciais. Uma vez que o MSO não modifica a estrutura dos operadores $A_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$ e $B_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$, as mesmas propriedades usadas no SO tradicional continuam válidas. Utilizando estas propriedades, as relações de recorrência para o MSO são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_{(1)}^{i+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_{(1)}^i(\mathbf{x}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_{(1)}^i(\mathbf{x}), \\ \Phi_{(1)}^{i+1}(\mathbf{x}) = \Phi_{(1)}^i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_{(1)}^{i+1}(\mathbf{x}), \\ \Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_{(1)}^k(\mathbf{x}), \\ \Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{x}) = \Phi_{(1)}^k(\mathbf{x}) - \Delta t \Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{x}), \\ \Lambda_{(1)}^f(\mathbf{x}) = \Lambda_{(1)}^{f-1}(\mathbf{x}), \\ \Phi_{(1)}^f(\mathbf{x}) = \Phi_{(1)}^{f-1}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_{(1)}^f(\mathbf{x}). \end{array} \right. \quad (3.8)$$

A eq. (3.8) mostra as relações de recorrência para o MSO obtido, quando dividimos simetricamente o operador $A_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$, mantendo $B_{\Phi}(\mathbf{x}, t)$. Evidentemente, também é possível fazer o

contrário, obtendo o segundo algoritmo possível do MSO. Uma vez que as discussões são as mesmas, apresentamos somente as relações de recorrência para este outro caso:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{(2)}^{i+1}(\mathbf{x}) = \Phi_{(2)}^i(\mathbf{x}) - \Delta t \Lambda_{(2)}^i(\mathbf{x}), \\ \Lambda_{(2)}^{i+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_{(2)}^i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_{(2)}^{i+1}(\mathbf{x}), \\ \Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{x}) = \Phi_{(2)}^k(\mathbf{x}) - \Delta t \Lambda_{(2)}^k(\mathbf{x}), \\ \Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_{(2)}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{x}), \\ \Phi_{(2)}^f(\mathbf{x}) = \Phi_{(2)}^{f-1}(\mathbf{x}), \\ \Lambda_{(2)}^f(\mathbf{x}) = \Lambda_{(2)}^{f-1}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_{(2)}^f(\mathbf{x}). \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Na eq. (3.8), devemos conhecer primeiramente o valor de $\Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{x})$ para, em seguida, determinarmos $\Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{x})$. Nas relações de recorrência obtidas pelo segundo algoritmo, a sequência é invertida. Comparando as eqs. (3.8) e (3.9), vemos que o primeiro conjunto de equações é mais simples do que o segundo e, por isso, utilizado nos exemplos unidimensionais a serem mostrados nas próximas seções.

3.1 MSO em sistemas não-homogêneos

Nos sistemas unidimensionais simulados com o SO tradicional, os valores da densidade e velocidade de propagação do som no meio, eram constantes ao longo de cada material. Suas variações apenas ocorriam nas interfaces de cada sistema. Entretanto, os nossos algoritmos nos permitem tratar casos mais complexos que isto, como o sistema a seguir.

Considere um meio infinito, de densidade e velocidade de propagação do som que apresenta valores constantes e iguais respectivamente a ρ_1 e c_1 . Este meio será denominado de meio externo (ME). Imerso no meio externo, se encontra um outro meio, de características diferentes ao anterior. Este outro meio se encontra centrado no ponto $\mathbf{x}_c = 1300$ m do sistema e possui uma largura $\Delta L = 500$ m entre suas extremidades. Conseqüentemente, este sistema apresenta duas interfaces, que ocorrem nos pontos $\mathbf{x}_a = 1050$ m e $\mathbf{x}_b = 1550$ m.

Ao contrário do que ocorre no ME, tanto a densidade quanto a velocidade, são dependentes da posição, ou seja, $\rho_2 \rightarrow \rho(\mathbf{x})$ e $c_2 \rightarrow c(\mathbf{x})$. Este outro meio será denominado de meio não-uniforme (MNU). Apesar deste segundo meio ser não-uniforme em relação a ρ_2 e c_2 , vamos considerar o caso particular no qual estas duas quantidades são inversamente proporcionais. Além disso, existe um perfeito casamento entre as impedâncias acústicas do ME e deste MNU.

Sendo \mathbf{Z} a impedância acústica característica do sistema total, temos que

$$\mathbf{Z} = \rho_1 c_1 = \rho(\mathbf{x}) c(\mathbf{x}) = cte. \quad (3.10)$$

No meio não-uniforme, a velocidade de propagação do som apresenta a forma de uma função Lorentziana centrada na metade do MNU,

$$c(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{Z}}{\rho(\mathbf{x})} = \frac{800}{1 + 0.05 (\mathbf{x} - 1300)^2}, \quad (3.11)$$

A velocidade máxima ocorre no centro da barreira, sendo oito vezes o valor da velocidade nas interfaces. Uma análise inversa se aplica para a densidade $\rho(\mathbf{x})$, para este mesmo meio.

Para efetuar a evolução temporal de $\Phi(\mathbf{x}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{x}, t)$, utilizamos a eq. (3.8), do MSO, discutido na seção anterior. Adotando o índice inferior $j = 1, 2, \dots, \mathbf{N}_x$, para a localização espacial dos pontos que compõem o sistema, as relações de recorrência discretizadas são dadas por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_j^{i+1} = \Lambda_j^i + \Delta t c_i^2 \left\{ \partial_x^2 \Phi_j^i - (\partial_x \ln \rho_i) \partial_x \Phi_j^i \right\}, \\ \Phi_j^{i+1} = \Phi_j^i - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_j^{i+1}, \\ \Lambda_j^{k+1} = \Lambda_j^k + \Delta t c_i^2 \left\{ \partial_x^2 \Phi_j^k - (\partial_x \ln \rho_i) \partial_x \Phi_j^k \right\}, \\ \Phi_j^{k+1} = \Phi_j^k - \Delta t \Lambda_j^{k+1}, \\ \Lambda_j^f = \Lambda_j^{f-1}, \\ \Phi_j^f = \Phi_j^{f-1} - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_j^f. \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Analogamente ao SO tradicional, adotamos uma malha não-uniforme de pontos, e consideramos a aproximação de segundos vizinhos nas derivadas espaciais de primeira e segunda ordem, presentes na eq. (3.12). Para os pontos fora do MNU, $\partial_x [\ln \rho_i] = 0$ e $c_i = c_1 = cte$, e as relações de recorrência são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_j^{i+1} = \Lambda_j^i + \Delta t c_1^2 \partial_x^2 \Phi_j^i, \\ \Phi_j^{i+1} = \Phi_j^i - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_j^{i+1}, \\ \Lambda_j^{k+1} = \Lambda_j^k + \Delta t c_1^2 \partial_x^2 \Phi_j^k, \\ \Phi_j^{k+1} = \Phi_j^k - \Delta t \Lambda_j^{k+1}, \\ \Lambda_j^f = \Lambda_j^{f-1}, \\ \Phi_j^f = \Phi_j^{f-1} - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_j^f. \end{array} \right. \quad (3.13)$$

Discutidas as relações de recorrência do MSO para ME e MNU, considere um pacote de ondas de pressão, que possui a forma de uma Gaussiana, e se encontra completamente no ME.

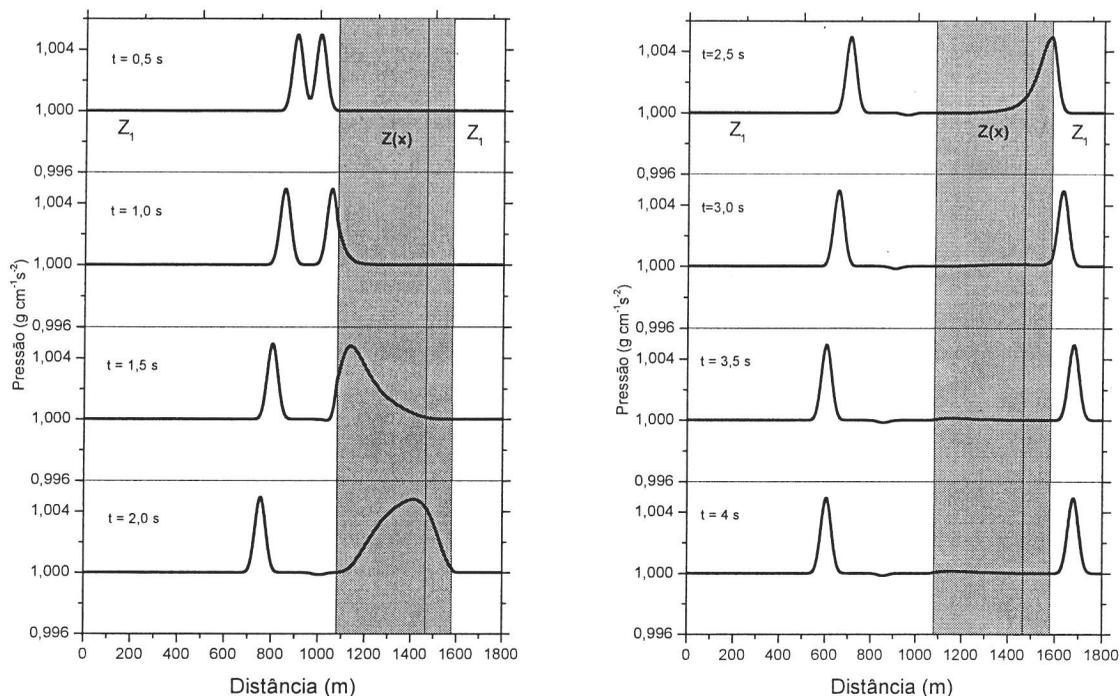


Figura 3-1: Propagação de um pulso acústico num meio não homogêneo.

No instante inicial, a derivada temporal deste pacote de ondas é zero em todos os pontos do espaço. Com estas condições iniciais, o pacote de ondas sofre uma divisão simétrica em sua forma inicial, sendo que suas pressões máximas são exatamente a metade da pressão máxima inicial. Cada um destes pacotes assume uma direção de movimento: A parte que se move no sentido a se afastar do MNU, servirá de referência para observar os efeitos que acontecem no pacote que incide e penetra no MNU. Uma vez que existe um casamento perfeito de impedâncias acústicas, não haverá pacotes de ondas refletidos nas interfaces deste sistema.

Na evolução temporal vista na fig. 3-1, vemos que um dos pacotes de onda gaussiano, penetra no meio não-uniforme, decorrido 1 s após o início de sua propagação pelo sistema. Uma vez dentro do MNU, o pacote sofre uma distorção em sua forma inicial. Esta distorção varia ao longo do tempo, estando conectada com as mudanças nos valores de $\rho(\mathbf{x})$ e $c(\mathbf{x})$. O pacote apresenta sua forma alterada, em virtude da dependência espacial da densidade e velocidade de propagação, que faz com que diferentes partes do pacote trafeguem no MNU

com diferentes velocidades. Como não existem dissipação ou forças externas, o pacote recupera sua forma inicial, próximo da interface \mathbf{x}_b . No instante 4 s, ele continua seu movimento com a mesma forma inicial, ao voltar para o ME.

Se compararmos o pacote de ondas que saiu do MNU com o que simplesmente caminhou livremente pelo ME, percebemos que o pacote de ondas que incidiu no MNU se propagou mais rapidamente do que o outro, sem sofrer nenhuma perda apreciável de sua forma original.

3.1.1 Condição de não-reflexão para o MNU

Podemos provar matematicamente que em um meio não-uniforme (MNU), que apresenta a condição de perfeito casamento entre impedâncias acústicas, apresenta coeficiente de transmissão igual a 1. Para isto, consideramos o MNU como sendo o produto de uma somatória de \mathbf{W} pequenos meios uniformes, cada um apresentando uma espessura $\varepsilon \rightarrow 0$. Em cada um destes meios infinitesimais, a densidade e velocidade de propagação do som são constantes e iguais a $\rho(\mathbf{x}) = \rho_n$ e $c(\mathbf{x}) = c_n$, onde o índice n é um número natural $n = 0, 1, \dots, \mathbf{W}$. Aparecem deste modo, $\mathbf{W} + 1$ interfaces, cada uma delas localizadas em:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_a + n \varepsilon, \quad (3.14)$$

onde $\mathbf{x}_a = 1050$, é o ponto onde se inicia o MNU.

Vamos agora calcular os coeficientes de transmissão e reflexão para cada frequência angular ω_ℓ . Para isto, resolvemos a equação de onda da pressão independente do tempo,

$$\{\partial_{\mathbf{x}}^2 + \mathbf{k}_n^2(\omega_\ell)\} \tilde{\phi}^\ell(\mathbf{x}) = 0, \quad \text{para } \mathbf{x}_{n-1} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_n \quad (3.15)$$

onde $\tilde{\phi}^\ell(\mathbf{x}) = \tilde{\phi}(\mathbf{x}, \omega_\ell)$, e o vetor de ondas $\mathbf{k}_n(\omega_\ell) = \omega_\ell/c_n$, assume valores distintos para cada um destes meios infinitesimais.

A solução da eq. (3.15) apresenta-se como uma soma de duas exponenciais de sinais opostos, multiplicadas pelas amplitudes $a_n(\omega_\ell)$ e $b_n(\omega_\ell)$. Atribuindo um índice superior ℓ , à dependência com relação a frequência, temos:

$$\tilde{\phi}^\ell(\mathbf{x}) = \begin{cases} a_0^\ell \exp\{-ik_0^\ell \overline{\Delta \mathbf{x}_1}\} + b_0^\ell \exp\{ik_0^\ell \overline{\Delta \mathbf{x}_1}\} , & \text{para } n = 0 \\ a_n^\ell \exp\{ik_n^\ell \overline{\Delta \mathbf{x}_n}\} + b_n^\ell \exp\{-ik_n^\ell \overline{\Delta \mathbf{x}_n}\} , & \text{para } n \geq 1 \end{cases}, \quad (3.16)$$

onde

$$\overline{\Delta \mathbf{x}_n} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n.$$

Aplicando as condições de contorno em cada interface \mathbf{x}_n , relacionamos as amplitudes de interfaces vizinhas. Elas podem ser agrupadas sob a forma de uma equação matricial,

$$\begin{pmatrix} a_n^\ell \\ b_n^\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_n^{11}(\omega_\ell) & \zeta_n^{12}(\omega_\ell) \\ \zeta_n^{21}(\omega_\ell) & \zeta_n^{22}(\omega_\ell) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{n+1}^\ell \\ b_{n+1}^\ell \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

onde os elementos da matriz 2×2 são

► Elementos entre Interfaces Vizinhas ◀

$$\mathbf{n} = 1$$

$$\begin{aligned} \zeta_1^{11}(\omega_\ell) &= \zeta_1^{22}(\omega_\ell) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathbf{Z}_1}{\mathbf{Z}_0} \right) \\ \zeta_1^{12}(\omega_\ell) &= \zeta_1^{21}(\omega_\ell) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mathbf{Z}_1}{\mathbf{Z}_0} \right) \end{aligned}$$

$$\mathbf{n} \geq 2$$

$$\begin{aligned} \zeta_n^{11}(\omega_\ell) &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathbf{Z}_n}{\mathbf{Z}_{n-1}} \right) \exp \{ -i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}, \\ \zeta_n^{12}(\omega_\ell) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mathbf{Z}_n}{\mathbf{Z}_{n-1}} \right) \exp \{ -i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}, \\ \zeta_n^{21}(\omega_\ell) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mathbf{Z}_n}{\mathbf{Z}_{n-1}} \right) \exp \{ +i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}, \\ \zeta_n^{22}(\omega_\ell) &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathbf{Z}_n}{\mathbf{Z}_{n-1}} \right) \exp \{ +i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Uma vez que as impedâncias acústicas são sempre as mesmas, temos que $1 + \mathbf{Z}_n/\mathbf{Z}_{n-1} = 2$ e $1 - \mathbf{Z}_n/\mathbf{Z}_{n-1} = 0$. Com isto, os elementos de matriz não-diaconais se anulam. Já os termos diaconais, temos que $\zeta_1^{11}(\omega_\ell) = \zeta_1^{22}(\omega_\ell) = 1$, $\zeta_n^{11}(\omega_\ell) = \exp \{ -i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}$ e $\zeta_n^{22}(\omega_\ell) = \exp \{ +i\mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \}$. Se todas as matrizes de interfaces vizinhas forem multiplicadas, obtemos uma produtória de matrizes, cuja matriz resultante também é uma matriz 2×2 . Esta matriz resultante é diaconal e relaciona as amplitudes a_0^ℓ, b_0^ℓ com $a_{\mathbf{W}+1}^\ell$ e $b_{\mathbf{W}+1}^\ell$:

$$\begin{pmatrix} a_0^\ell \\ b_0^\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_t(\omega_\ell) & 0 \\ 0 & \zeta_t^*(\omega_\ell) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{\mathbf{W}+1}^\ell \\ b_{\mathbf{W}+1}^\ell \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde

$$\zeta_t(\omega_\ell) = \exp \left\{ -i \sum_{n=2}^{\mathbf{W}} \mathbf{k}_n^\ell \varepsilon \right\}. \quad (3.20)$$

De posse destes resultados, podemos calcular os coeficientes de transmissão e reflexão, $\mathbf{T}(\omega_\ell)$ e

$\mathbf{R}(\omega_\ell)$:

$$\mathbf{T}(\omega_\ell) = \left| \frac{a_{\mathbf{W}+1}^\ell}{a_0^\ell} \right|^2 = \zeta_{\mathbf{t}}(\omega_\ell) \zeta_{\mathbf{t}}^*(\omega_\ell) = 1, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{R}(\omega_\ell) = \left| \frac{b_0^\ell}{a_0^\ell} \right|^2 = 0, \quad (3.22)$$

não existindo reflexão de ondas para nenhuma frequência. Deste modo, um pacote de ondas que incidir no MNU com perfeito casamento de impedâncias acústicas, passará por ele sem sofrer perdas, ainda que possa ser distorcido de forma transiente, devido aos valores distintos para a densidade e velocidade, existentes para cada ponto deste meio.

3.2 Cristal acústico unidimensional

O sistema periódico mais simples que pode ser construído é formado por uma sequência de camadas de materiais, com diferentes parâmetros intrínsecos. Avanços na tecnologia de crescimento de cristais, especialmente a técnica do MBE (*Molecular Beam Epitaxy*), fizeram ser possível o crescimento de meios periódicos com precisão até de camadas atômicas. Uma vez bem que a construção de meios periódicos é algo bem controlado nos dias de hoje, muitos pesquisadores já estudaram tanto experimental quanto teoricamente suas propriedades[26]. Soluções exatas da equação de ondas para uma determinada frequência angular ω podem ser encontradas utilizando o método da matriz de transferência.

Considere um cristal acústico, inserido em um meio infinito, homogêneo, isotrópico e linear. Este cristal acústico é formado por uma série de meios idênticos, todos apresentando a mesma espessura $\varepsilon = 0.0072$ m, e espaçamento $d = 0.1368$ m entre si. Seja \mathbf{x}_o , o ponto onde se encontra a primeira das N interfaces deste cristal. Devido a periodicidade de espaçamento entre interfaces, estas se encontram localizadas nos seguinte pontos do sistema:

$$\mathbf{x}_n = \begin{cases} \mathbf{x}_o + n(\varepsilon + d) \rightarrow n = 0, 2, 4, \dots \\ \mathbf{x}_o + n(\varepsilon + d) + \varepsilon \rightarrow n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (3.23)$$

O índice n é um número natural que indica as sequências destas interfaces e pode assumir os valores $n = 0, 1, 2, \dots, 19$. O meio externo (meio 1) e o cristal acústico (meio 2), possuem densidade

e velocidade de propagação do som constantes, cujos valores são apresentados a seguir:

	ρ (Kg/m ³)	c (m/s)	Z (Kg/(m ² .s))
Meio 1	1.10 ³	375	3,75.10 ⁵
Meio 2	2.10 ³	375	7,50.10 ⁵

Uma vez que não existe casamento de impedâncias acústicas, as interfaces atuam como centros espalhadores. Este é o caso que será abordado agora.

Um pacote de ondas inicial que apresenta as mesmas condições das eqs. (2.36) e (2.37), com $x_c = 1335$ m e $\bar{\alpha} = 0.001$. Utilizando o MSO, estudamos a evolução temporal deste pacote de onda, visto na figura 3-2. No instante 0,002 s, o pacote já sofreu a principal reflexão ao encontrar a primeira interface, no ponto $x_o = 1075$ m. Nos instantes seguintes, o pacote de ondas sofre espalhamento porém uma parte consegue transpassar o cristal, no instante 0,006 s. Devido aos espalhamentos das interfaces, existem uma série de pacotes refletidos e transmitidos que saem do cristal, nos instantes seguintes. Estes outros pacotes, possuem uma intensidade bem menor do que os pacotes de reflexão e transmissão iniciais, tendendo a zero, no limite em que o instante de tempo $t \rightarrow \infty$.

As formas dos pacotes de ondas transmitido e refletido diferem da forma do pacote incidente. Este fato pode ser confirmado captando o sinal produzido pelos múltiplos espalhamentos, em dois pontos específicos: x_R e x_T . Estes dois pontos atuam como se fossem dois detectores não-interagentes com o sistema. Eles captam os valores da pressão $\Phi_T(t) = \Phi_T(x_T, t)$ e $\Phi_R(t) = \Phi(x_R, t)$, a cada passo de evolução temporal (o índice **T** denota a pressão transmitida através do cristal acústico, enquanto que **R** é utilizado para a parte refletida).

Os detectores armazenam os sinais depois que os valores da pressão passam a ser relevantes. O detector da parte transmitida esta localizado depois do cristal acústico enquanto que o refletido se encontra antes, como visto na fig. 3-3.

Estes sinais armazenados são posteriormente comparados com o sinal captado com o sistema sem o cristal acústico $\Phi_L(t) = \Phi_L(x_T, t)$, por três motivos: i) o sinal livre pode ser usado para filtrar possíveis erros numéricos do sistema, melhorando os resultados obtidos; ii) no caso de se efetuar uma análise espectral, a soma das grandezas obtidas pela transmissão e reflexão devem reproduzir o sinal do sistema sem o cristal acústico; iii) com este sinal, é possível calcular a diferença de fase sofrida pelo pacote de ondas que penetrou no cristal, o que permite obter as velocidades de fase e de grupo.

A teoria de como se obter estas quantidades, e os resultados para o cristal acústico simulado nesta seção, são mostrados nas seções subsequentes.

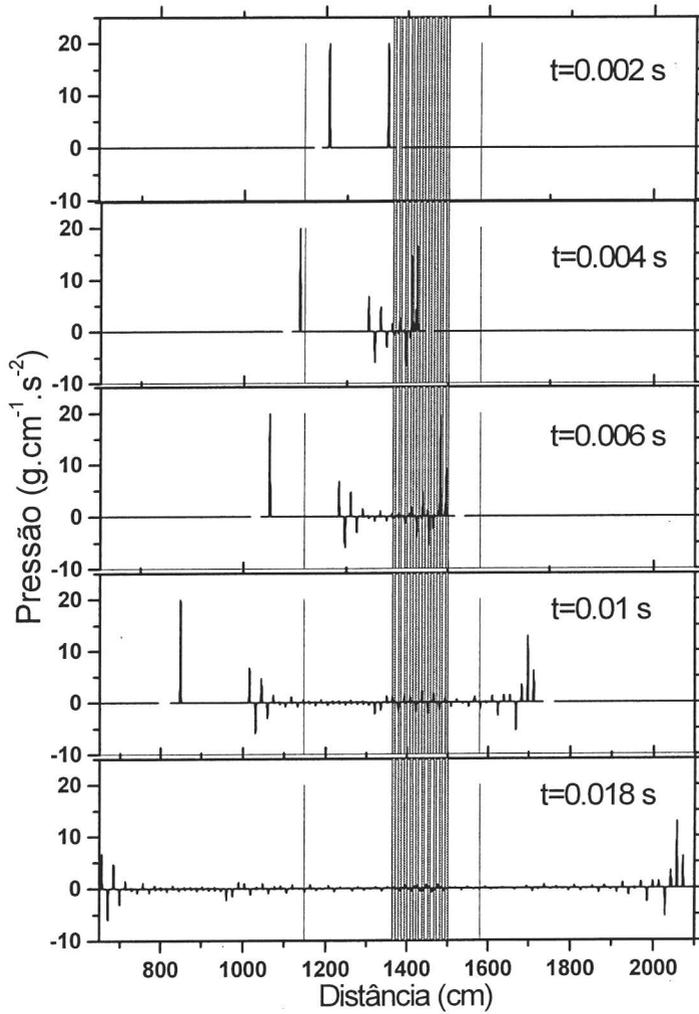


Figura 3-2: Propagação do pulso na estrutura periódica. Comparação para vários instantes de tempo.

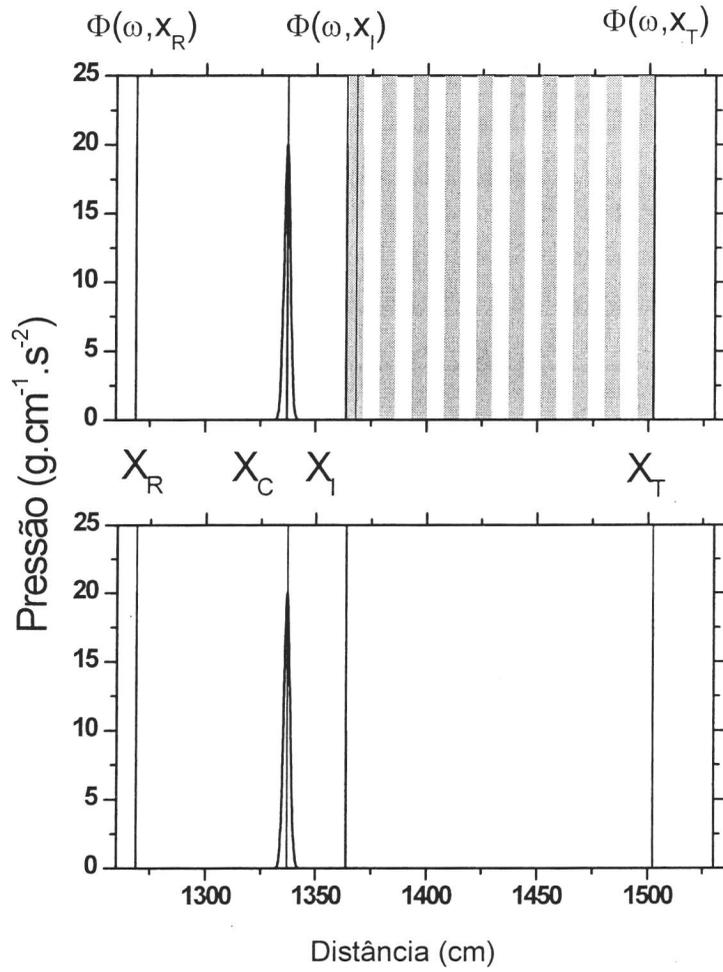


Figura 3-3: Posição dos detetores no sistema.

3.3 Diferença de fase $\Delta\phi$, velocidades de fase e de grupo

Conforme discutido na seção anterior, através do uso de detectores não-interagentes, situados em pontos estratégicos do sistema, é possível obter os valores da pressão transmitida e refletida por um cristal acústico. Posicionando dois detectores, situados antes e depois da heteroestrutura nos pontos \mathbf{x}_T e \mathbf{x}_R , obtemos $\Phi_T(t)$ e $\Phi_R(t)$, a cada intervalo de tempo Δt , durante todo o intervalo de evolução $[t_i, t_f]$.

Uma vez conhecidos estes valores, aplicamos a Transformada de Fourier (TF), calculando as componentes transmitidas e refletidas da pressão, em função da frequência angular ω :

$$\Phi_T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i\omega t\} \Phi_T(t) dt, \quad (3.24)$$

$$\Phi_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i\omega t\} \Phi_R(t) dt. \quad (3.25)$$

Apesar da pressão ser real, sua TF é complexa. A quantidade $\Phi_T(\omega)$ pode ser reescrita como a soma das partes real e imaginária $\mathcal{C}_T(\omega) + i\mathcal{D}_T(\omega)$. De modo análogo, definimos $\mathcal{C}_R(\omega)$, $\mathcal{D}_R(\omega)$ e $\mathcal{C}_L(\omega)$, $\mathcal{D}_L(\omega)$ para $\Phi_R(\omega)$ e $\Phi_L(\omega)$, respectivamente.

Sendo $\phi_T(\omega)$ e $\phi_L(\omega)$, as fases transmitida e livre, calculada no ponto \mathbf{x}_T , temos que a diferença de fase no ponto \mathbf{x}_T , $\Delta\phi_T(\omega) = \phi_T(\omega) - \phi_L(\omega)$, provocada pela presença do cristal acústico é dada por

$$\Delta\phi_T(\omega) = \arctan\left[\frac{\mathcal{D}_T(\omega)}{\mathcal{C}_T(\omega)}\right] - \arctan\left[\frac{\mathcal{D}_L(\omega)}{\mathcal{C}_L(\omega)}\right], \quad (3.26)$$

$$= \arctan\{\Omega_T(\omega)\}, \quad (3.27)$$

sendo

$$\Omega_T(\omega) = \frac{\mathcal{C}_L(\omega) \mathcal{D}_T(\omega) - \mathcal{C}_T(\omega) \mathcal{D}_L(\omega)}{\mathcal{C}_L(\omega) \mathcal{C}_T(\omega) + \mathcal{D}_L(\omega) \mathcal{D}_T(\omega)}. \quad (3.28)$$

Se $\mathcal{C}_T(\omega) = \mathcal{C}_L(\omega)$ e $\mathcal{D}_T(\omega) = \mathcal{D}_L(\omega)$, o numerador da eq. (3.27) se anula e $\Delta\phi_T(\omega) = 0$. Isto acontece quando existe o casamento de impedâncias acústica entre o cristal e o meio externo.

Definindo-se a espessura total do cristal por η , determinada pela subtração da posição da primeira e última interfaces, escrevemos $\Delta\phi_T(\omega)$ como:

$$\Delta\phi_T(\omega) = [k_T(\omega) - k_L(\omega)] \eta, \quad (3.29)$$

sendo desta forma, proporcional à diferença dos vetores de onda com e sem o cristal. Para o sistema sem o cristal, a velocidade de propagação do som c_L é constante e vetor de ondas

$k_{\mathbf{L}}(\omega)$, é determinado pela razão:

$$k_{\mathbf{L}}(\omega) = \frac{\omega}{c_{\mathbf{L}}} . \quad (3.30)$$

Para o sistema com o cristal, o vetor de ondas $k_{\mathbf{T}}(\omega)$ apresenta duas expressões: Na região fora do cristal, o vetor de ondas é definido como $k_{\mathbf{L}}(\omega)$. Dentro do cristal, o vetor de ondas apresenta uma forma complicada, pois os espalhamentos que se processam dependem da frequência das ondas. Definindo uma velocidade efetiva $v_f(\omega)$, referente à propagação do pacote de ondas na região do cristal, temos:

$$k_{\mathbf{T}}(\omega) = \begin{cases} \frac{\omega}{v_f(\omega)} & \text{para } \mathbf{x}_0 \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_N, \\ \frac{\omega}{c_{\mathbf{L}}} & \text{para } \mathbf{x} > \mathbf{x}_N \text{ e } \mathbf{x} < \mathbf{x}_0. \end{cases} \quad (3.31)$$

Utilizando as eqs. (3.29) e (3.31), a velocidade de fase $v_f(\omega)$ pode ser obtida através da expressão:

$$v_f(\omega) = \frac{\omega \eta c_{\mathbf{L}}}{\omega \eta + c_{\mathbf{L}} \Delta\phi_{\mathbf{T}}(\omega)} , \quad (3.32)$$

e a velocidade de grupo $v_g(\omega) = (dk_{\mathbf{T}}(\omega)/d\omega)^{-1}$, é conseguida por:

$$v_g(\omega) = \frac{\eta c_{\mathbf{L}}}{\eta + c_{\mathbf{L}} \left(\frac{d_{\omega} \Omega_{\mathbf{T}}(\omega)}{1 + \Omega_{\mathbf{T}}^2(\omega)} \right)} . \quad (3.33)$$

3.4 Análise espectral do cristal acústico

Conforme visto na fig. 3-4, o pacote de onda incidente se transforma numa série de pacotes transmitidos e refletidos, após atingir o cristal acústico. Esta sequência de pacotes foi estocada nos detectores situados antes e depois do cristal. Após o término da simulação numérica, encontramos um número total de $N_t = 2^{20}$ pontos em cada detector. O incremento temporal entre dados consecutivos $\Delta t = 1.8 \cdot 10^{-6} s$, e o tempo total armazenado em ambos os detectores foi $T_t = N_t \Delta t = 1.8874 s$. Com estes parâmetros de entrada, o incremento de frequência angular $\Delta\omega = 2\pi/T_t = 3.33 Hz$, e a frequência de Nyquist $\omega_q = \pi/\Delta t = 1.7453296 GHz$.

Usando o algoritmo de Cooley-Tukey para a TF, obtemos $\Phi_{\mathbf{L}}(\omega)$, $\Phi_{\mathbf{T}}(\omega)$ e $\Phi_{\mathbf{R}}(\omega)$. Conseguimos estes valores, encontramos os coeficientes de transmissão e reflexão em função da frequência angular $\mathbf{T}(\omega) = |\Phi_{\mathbf{T}}(\omega)|/|\Phi_{\mathbf{L}}(\omega)|$ e $\mathbf{R}(\omega) = |\Phi_{\mathbf{R}}(\omega)|/|\Phi_{\mathbf{L}}(\omega)|$. Em seguida, obtemos a densidade de potência espectral (PSD do inglês *power spectral density*) para as pressões. O PSD revela o quanto de potência existe em alguma quantidade física entre ω e $\omega + \Delta\omega$. Denotando o número total de pontos existente em cada detector por N_t , o PSD da pressão

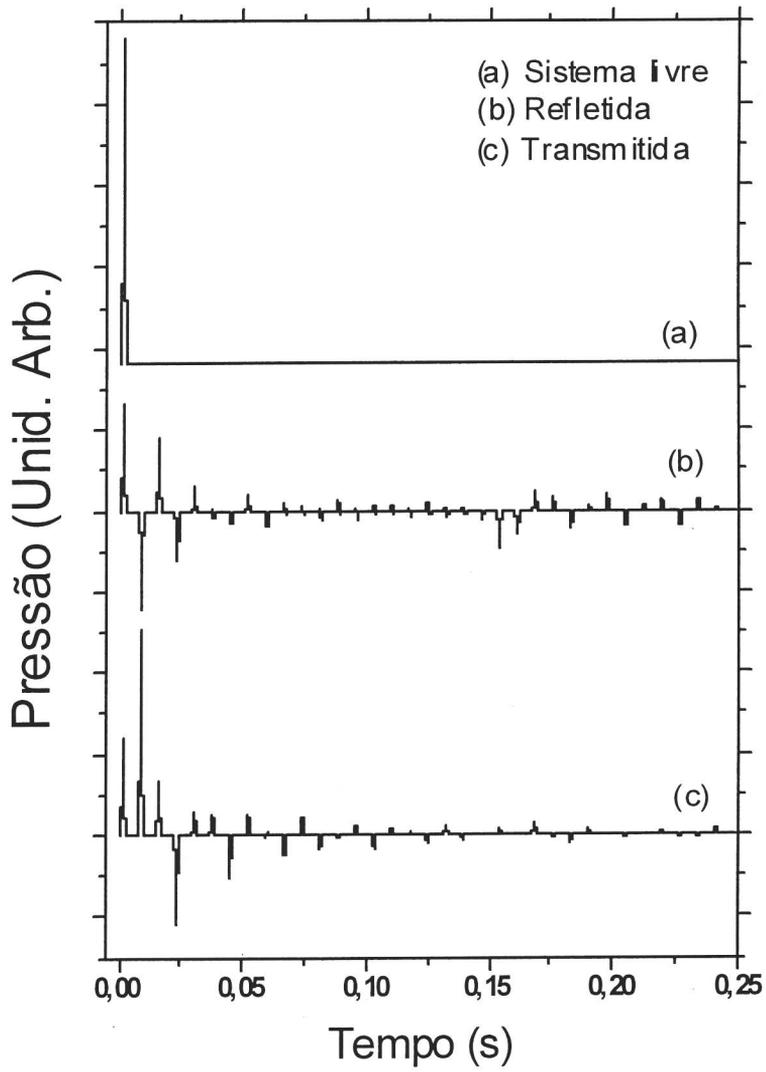


Figura 3-4: Sinal de pressão nos detetores.

transmitida $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega)$ é definida por:

$$\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega) = \frac{|\Phi_T(\omega)|^2}{2N_t^2}. \quad (3.34)$$

Definições semelhantes seguem para o PSD da pressão refletida $\mathbf{P}_{\Phi_R}(\omega)$ e livre $\mathbf{P}_{\Phi_L}(\omega)$. Em seguida, calculamos a diferença de fase, $v_f(\omega)$ e $v_g(\omega)$, aplicando as definições discutidas na seção anterior. Estas quantidades estão mostradas nas figuras a seguir. Nelas, comparamos distintas quantidades, em um mesmo intervalo de frequência.

Na figura 3-5, podemos ver para o intervalo 0 – 1000 Hz, os gráficos comparativos entre os coeficientes $\mathbf{T}(\omega)$, $\mathbf{R}(\omega)$, e as densidades de potência espectral $\mathbf{P}_{\Phi_L}(\omega)$, $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega)$ e $\mathbf{P}_{\Phi_R}(\omega)$. Através de simples inspeção, podemos verificar a correspondência entre as bandas permitidas e proibidas com os comportamentos de $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega)$ e $\mathbf{P}_{\Phi_R}(\omega)$. Observe o decaimento de $\mathbf{P}_{\Phi_R}(\omega)$ nas regiões onde $\mathbf{T}(\omega) \sim 1$ e o análogo para $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega)$ quando $\mathbf{R}(\omega) \sim 1$. Deste modo, é possível determinar as bandas permitidas e refletidas do cristal, tomando-se o $\mathbf{P}_{\Phi_L}(\omega)$ como referência e analisando os decaimentos de $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega)$: Quando $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega) \sim \mathbf{P}_{\Phi_L}(\omega)$, estamos numa região de banda permitida. Se $\mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega) \ll \mathbf{P}_{\Phi_L}(\omega)$, estamos numa região de banda proibida.

Uma outra quantidade que podemos obter através da análise espectral é a denominada função amplitude espectral (ASF do inglês *amplitude spectral function*). Para a pressão transmitida, a ASF é definida por:

$$\mathbf{A}_{\Phi_T}(\omega) = 2N_t^2 \mathbf{P}_{\Phi_T}(\omega) = |\Phi_T(\omega)|^2. \quad (3.35)$$

Definições similares existem para a ASF refletida $\mathbf{A}_{\Phi_R}(\omega)$, bem como para o sistema livre $\mathbf{A}_{\Phi_L}(\omega)$. Comparando estas quantidades com a velocidade de fase, vemos que esta grandeza existe apenas nas regiões onde $\mathbf{A}_{\Phi_T}(\omega)$ é aproximadamente igual a $\mathbf{A}_{\Phi_L}(\omega)$, decaindo a zero quando $\mathbf{A}_{\Phi_R}(\omega) \sim \mathbf{A}_{\Phi_L}(\omega)$. Esta região é denominada de *gap* sônico, (ver figura 3-6).

Comportamento similar se verifica entre a $v_g(\omega)$ e $\Delta\phi_T(\omega)$ (ver fig. 3-7). No intervalo de frequência 0 – 500 Hz, encontramos quatro bandas permitidas. Podemos ver que a velocidade de grupo tende a zero na região das bandas proibidas. Concomitantemente ao comportamento de $v_g(\omega)$, verificamos a perda de coerência de $\Delta\phi_T(\omega)$ nas regiões de *gap*. Nas regiões permitidas, $\Delta\phi_T(\omega)$ apresenta um comportamento coerente, cujos valores variam linearmente com a frequência.

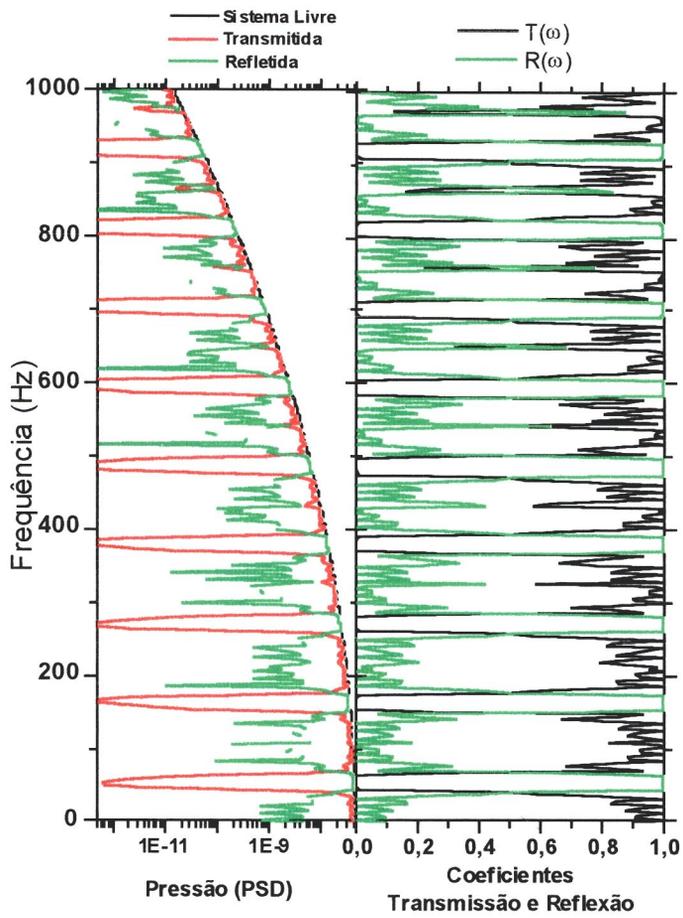


Figura 3-5: Comparação entre PSD da pressão e os coeficientes de transmissão e reflexão.

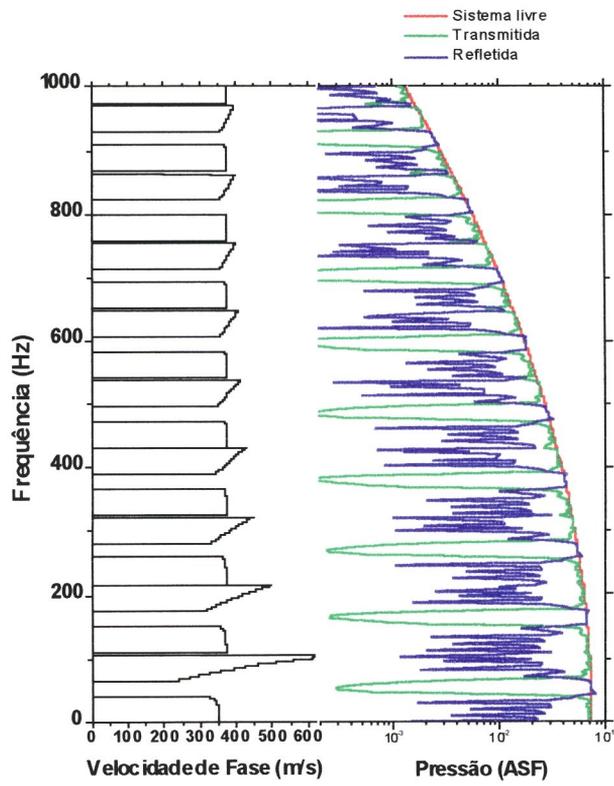


Figura 3-6: Comparação entre ASF da pressão e a velocidade de fase.

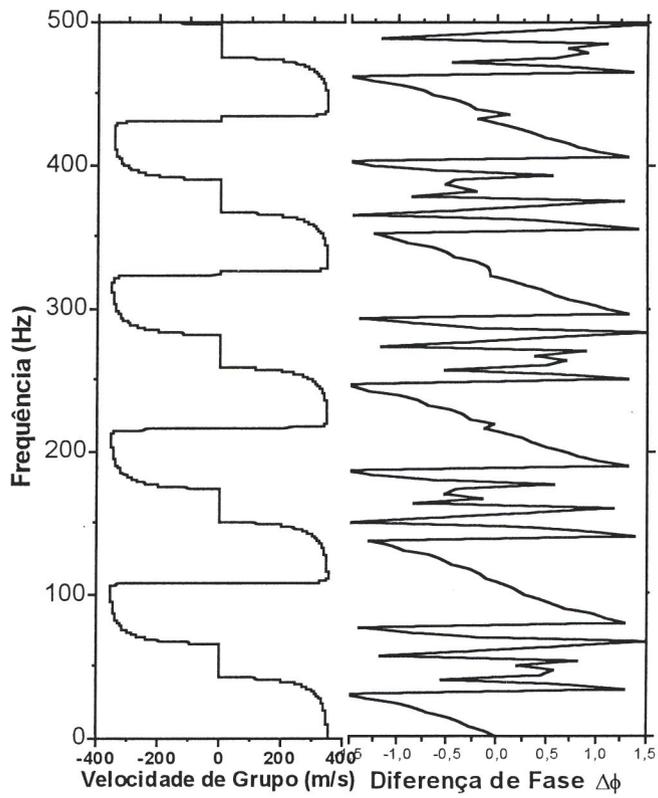


Figura 3-7: Comparação entre a diferença de fase e velocidade de grupo.

Capítulo 4

Efeitos de dissipação e não-linearidade

Neste capítulo, vamos generalizar nosso estudo de propagação de ondas acústicas unidimensionais, incluindo alguns efeitos que foram antes desprezados. Nas primeiras seções deste capítulo, será feito um estudo dos efeitos de forças dissipativas na equação de onda. Verificamos as modificações necessárias para incluir forças de atrito e de viscosidade. Encontramos relações de recorrência implícitas e explícitas, bem como um exemplo de simulação numérica para um caso simples.

Nas seções finais, consideraremos a propagação de uma onda acústica em meios não-lineares. Esta onda acústica sofrerá distorções, que são proporcionais ao grau de não-linearidade do sistema, determinado pela razão entre os calores específicos a pressão e a volume constante, quando o meio em questão se comporta adiabaticamente.

4.1 Meios dissipativos

Em muitos casos, a evidência experimental exige a inclusão de forças de dissipação ou de termos que descrevem a injeção ou ejeção de energia/matéria no sistema. Enquanto as fontes podem ser incluídas em problemas pertencentes a emissão de radiação, as forças de dissipação podem ocorrer devido a choques inelásticos ou parcialmente elásticos entre moléculas do sistema, além de forças de atrito entre superfícies ou regiões circunvizinhas ao ponto considerado. Na prática, o que usualmente se faz é uma modelagem matemática destas injeções/dissipações, adotando coeficientes que são ajustados experimentalmente.

No caso unidimensional, as equações que determinam o movimento de um pacote de ondas

de pressão, num certo sistema são dadas por:

$$\partial_{\mathbf{x}}\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) + \kappa(\mathbf{x})(\xi(\mathbf{x}) + \partial_t)\Phi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.1)$$

$$\partial_{\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x})(\mu(\mathbf{x}) + \partial_t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.2)$$

em que $\rho(\mathbf{x})$ é a densidade linear, $\kappa(\mathbf{x})$ é a compressibilidade, $\mu(\mathbf{x})$ é o coeficiente de atrito unidimensional e $\xi(\mathbf{x})$ é o coeficiente de viscosidade do sistema. Da mesma forma que no caso ideal, queremos obter uma equação diferencial somente em termos da pressão $\Phi(\mathbf{x}, t)$. Isto será feito inicialmente considerando apenas um termo dissipativo e, em seguida, no caso geral.

4.1.1 Sistema sem atrito

Consideremos inicialmente o caso em que existe somente a força de viscosidade agindo no sistema. Neste caso, a eq. (4.1) permanece inalterada. Sendo o coeficiente $\mu = 0$, a eq. (4.2) pode ser reescrita como:

$$\rho^{-1}(\mathbf{x})\partial_{\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x}, t) + \partial_t\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (4.3)$$

As eqs. (4.1) e (4.3) podem ser combinadas, de forma a eliminar os termos referentes as velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Procedendo desta maneira, obtemos a equação da onda para a pressão:

$$\partial_t^2\Phi(\mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{x})\partial_t\Phi(\mathbf{x}, t) - \kappa^{-1}(\mathbf{x})\partial_{\mathbf{x}}[\rho^{-1}(\mathbf{x})\partial_{\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x}, t)] = 0. \quad (4.4)$$

No limite em que o coeficiente de viscosidade $\xi \rightarrow 0$, a eq. (4.4) é idêntica a equação da onda sem amortecimentos. Cabe ressaltar que, para o caso inverso, ou seja, onde exista a força de atrito, mas não a força de viscosidade, encontramos equações análogas às discutidas nesta seção, permutando-se a pressão pela velocidade.

A partir deste ponto, seguimos o mesmo procedimento feito para o caso ideal. Por isto, decomparamos a eq. (4.4), num sistema de duas equações de primeira ordem no tempo:

$$\Lambda_{\xi}(\mathbf{x}, t) = \partial_t\Phi(\mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}, t), \quad (4.5)$$

$$\partial_t\Lambda_{\xi}(\mathbf{x}, t) = \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi(\mathbf{x}, t). \quad (4.6)$$

A variável $\Lambda_{\xi}(\mathbf{x}, t)$ tende para $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ do caso ideal, quando $\xi(\mathbf{x}) = 0$. Estes dois últimos

resultados são utilizados, na equação de Liouville para uma função $\sigma_\xi = \sigma(\Phi, \Lambda_\xi, t)$:

$$\begin{aligned} d_t \sigma_\xi = & \partial_t \sigma_\xi + \\ & [\xi(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}, t) - \Lambda_\xi(\mathbf{x}, t)] \partial_\Phi \sigma_\xi + \\ & [\Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi(\mathbf{x}, t)] \partial_{\Lambda_\xi} \sigma_\xi. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Dada a distribuição no instante inicial σ_ξ^i , deseja-se conhecer esta mesma função no instante final. Para isto, reescrevemos a equação de Liouville na forma exponencial, fraccionando o intervalo total de evolução $[t_i, t_f]$, em M sub-intervalos temporais Δt , onde $t_f = t_i + M \Delta t$. A integral temporal total se converte numa produtória de exponenciais, cada uma contendo uma integral temporal parcial:

$$\sigma_\xi^f = \prod_{k=1}^M \exp \left[\int_{t_k}^{t_{k+1}} A_\xi(\mathbf{x}, t) + B_\xi(\mathbf{x}, t) dt \right] \times \sigma_\xi^i, \quad (4.8)$$

em que

$$A_\xi(\mathbf{x}, t) = [\xi(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}, t) - \Lambda_\xi(\mathbf{x}, t)] \partial_\Phi, \quad (4.9)$$

$$B_\xi(\mathbf{x}, t) = [\Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi(\mathbf{x}, t)] \partial_{\Lambda_\xi}. \quad (4.10)$$

Os instantes t_k e t_{k+1} estão contidos dentro de $[t_i, t_f]$. Cada uma destas M exponenciais evolui $\sigma_\xi(\Phi, \Lambda_\xi, t)$, entre dois instantes de tempo consecutivos. Aplicando a técnica do SO, temos dois algoritmos possíveis:

$$\begin{aligned} \sigma_\Phi^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t A_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t B_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t A_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \sigma_\Phi^k + O(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (4.11)$$

ou

$$\begin{aligned} \sigma_\Phi^{k+1} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t B_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t A_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t B_\xi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \sigma_\Phi^k + O(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (4.12)$$

As eqs. (4.11) e (4.12) podem ser utilizadas para se estudar a evolução temporal de σ_ξ durante o intervalo temporal $[t_i, t_f]$. Isto é conseguido de ambas as equações, após a aplicação das $3M$ exponenciais que existem durante todo este intervalo.

Entretanto, desejamos obter a evolução temporal das variáveis internas, que compõem σ_ξ . Deste modo, é necessário utilizarmos certas propriedades de operadores diferenciais, situados no argumento de exponenciais. Para este caso, em particular, utilizamos:

$$\exp \{ \Delta t B_\xi (\mathbf{x}, t) \} \times \sigma_\xi (\Phi, \Lambda_\xi) = \sigma_\xi (\Phi, \Lambda_\xi + \Delta t [\Gamma (\mathbf{x}) \times \Phi (\mathbf{x}, t)]), \quad (4.13)$$

$$\exp \{ \frac{1}{2} \Delta t A_\xi (\mathbf{x}, t) \} \times \sigma_\xi (\Phi, \Lambda_\xi) = \sigma_\xi (\alpha (\mathbf{x}) \Phi + \beta (\mathbf{x}) \Lambda_\xi, \Lambda_\xi), \quad (4.14)$$

com

$$\alpha (\mathbf{x}) = \exp \{ \frac{1}{2} \Delta t \xi (\mathbf{x}) \}, \quad (4.15)$$

$$\beta (\mathbf{x}) = \frac{1 - \alpha (\mathbf{x})}{\xi (\mathbf{x})}. \quad (4.16)$$

Vamos nos ater à eq. (4.11), pois ela nos fornecerá uma relação de recorrência para $\Lambda_\xi^{k+1} (\mathbf{x})$ e $\Phi^{k+1} (\mathbf{x})$ mais simples do que a eq. (4.12). As relações explícitas são mais simples e necessitam de menor tempo computacional para obter os resultados. Entretanto, ela é mais instável do que as implícitas. Portanto, as primeiras são mais aconselháveis quando a diferença entre impedâncias acústicas são pequenas, enquanto que as segundas devem ser utilizadas para grandes diferenças de impedâncias entre os materiais considerados. Em ambos os casos, definiremos a quantidade $F_\xi^k (\mathbf{x})$, que é uma combinação linear entre $\Phi^k (\mathbf{x})$ e $\Lambda_\xi^k (\mathbf{x})$, dada por:

$$F_\xi^k (\mathbf{x}) = \alpha (\mathbf{x}) \Phi^k (\mathbf{x}) + \beta (\mathbf{x}) \Lambda_\xi^k (\mathbf{x}). \quad (4.17)$$

- **Relações de recorrência explícitas:** Obtemos estas relações quando consideramos os operadores $A_\xi (\mathbf{x}, t)$ e $B_\xi (\mathbf{x}, t)$ no instante t_k , ao efetuarmos as integrais temporais:

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} A_\xi (\mathbf{x}, t) dt \approx \Delta t A_\xi^k (\mathbf{x}) \partial_\Phi, \quad (4.18)$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} B_\xi (\mathbf{x}, t) dt \approx \Delta t B_\xi^k (\mathbf{x}) \partial_{\Lambda_\xi}. \quad (4.19)$$

Deste modo, após a aplicação da última exponencial da eq. (4.11), obtemos:

$$\Lambda_\xi^{k+1} (\mathbf{x}) = \Lambda_\xi^k (\mathbf{x}) + \Delta t [\Gamma (\mathbf{x}) \times F_\xi^k (\mathbf{x})], \quad (4.20)$$

$$\Phi^{k+1} (\mathbf{x}) = \alpha (\mathbf{x}) F_\xi^k (\mathbf{x}) + \beta (\mathbf{x}) \Lambda_\xi^{k+1} (\mathbf{x}). \quad (4.21)$$

e da eq. (4.12), temos que:

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{x}) = \alpha^2(\mathbf{x}) \Phi_\xi^k(\mathbf{x}) + \frac{1 - \alpha^2(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} \left[\Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \Phi_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) \right], \quad (4.22)$$

$$\Lambda_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \left[\Phi_\xi^k(\mathbf{x}) + \Phi_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) \right]. \quad (4.23)$$

- **Relações de recorrência implícitas:** Esta relação de recorrência é obtida, quando a dependência temporal dos operadores é considerada no instante $t_{k+\frac{1}{2}}$, instante este, intermediário entre t_k e t_{k+1} :

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} A_\xi(\mathbf{x}, t) dt \approx \Delta t A_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \partial_\Phi, \quad (4.24)$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} B_\xi(\mathbf{x}, t) dt \approx \Delta t B_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \partial_{\Lambda_\xi}, \quad (4.25)$$

obtendo, após a aplicação da última exponencial:

$$\Lambda_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) = \Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) + \Delta t \left[\Gamma(\mathbf{x}) \times F_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \right], \quad (4.26)$$

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{x}) = \alpha(\mathbf{x}) F_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) + \beta(\mathbf{x}) \left[\Lambda_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) + \Lambda_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) - \Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) \right]. \quad (4.27)$$

Em seguida, aproximamos as quantidades centradas no instante $t_{k+\frac{1}{2}}$, como uma média aritmética dos valores destas mesmas quantidades nos instantes t_k e t_{k+1} . Deste modo, $\Lambda_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[\Lambda_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) + \Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) \right]$, e

$$F_\xi^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[F_\xi^{k+1}(\mathbf{x}) + F_\xi^k(\mathbf{x}) \right], \quad (4.28)$$

$$= \alpha^2(\mathbf{x}) \Phi^k(\mathbf{x}) - \varsigma_\xi(\mathbf{x}) \Lambda_\xi^k(\mathbf{x}) + \eta_\xi(\mathbf{x}) \Lambda_\xi^{k+1}(\mathbf{x}), \quad (4.29)$$

com

$$\varsigma_\xi(\mathbf{x}) = \beta(\mathbf{x}) \alpha(\mathbf{x}) \left[\frac{1 - \alpha(\mathbf{x})}{2} \right], \quad (4.30)$$

$$\eta_\xi(\mathbf{x}) = \beta(\mathbf{x}) \left\{ 1 + \alpha(\mathbf{x}) \left[\frac{3 + \alpha(\mathbf{x})}{2} \right] \right\}. \quad (4.31)$$

Após esta aproximação, as relações de recorrência implícitas são:

$$\Lambda_{\xi}^{k+1}(\mathbf{x}) = D_{\xi}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \left[\eta_{\xi}(\mathbf{x}) \Lambda_{\xi}^{k+1}(\mathbf{x}) \right], \quad (4.32)$$

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{x}) = \alpha^2(\mathbf{x}) \Phi^k(\mathbf{x}) - \frac{\varsigma_{\xi}(\mathbf{x})}{\alpha(\mathbf{x})} \Lambda_{\xi}^k(\mathbf{x}) + \frac{\eta_{\xi}(\mathbf{x}) - \beta(\mathbf{x})}{\alpha(\mathbf{x})} \Lambda_{\xi}^{k+1}(\mathbf{x}), \quad (4.33)$$

onde

$$D_{\xi}^k(\mathbf{x}) = \Lambda_{\xi}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{x}) \times \left[\alpha^3(\mathbf{x}) \Phi^k(\mathbf{x}) - \varsigma_{\xi}(\mathbf{x}) \Lambda_{\xi}^k(\mathbf{x}) \right]. \quad (4.34)$$

A eq. (4.33), que nos permite conhecer o valor da pressão no instante t_{k+1} , é determinada diretamente, após o conhecimento do valor de $\Lambda^{k+1}(\mathbf{x})$. Esta última entretanto, deve ser conseguida mediante a aplicação de algoritmos de diagonalização de matrizes, algoritmos estes que dependem de quantos vizinhos são considerados, no cálculo numérico das derivadas espaciais. Considerando apenas a aproximação de primeiros vizinhos, e, agrupando os termos em $\Lambda^{k+1}(\mathbf{x})$ encontrados na eq. (4.32), obtemos, para o ponto de coordenadas $x = x_i$:

$$\mathbf{a}_{\xi}(\mathbf{x}_i) \Lambda_{\xi, i+1}^{k+1} + \mathbf{b}_{\xi}(\mathbf{x}_i) \Lambda_{\xi, i}^{k+1} + \mathbf{c}_{\xi}(\mathbf{x}_i) \Lambda_{\xi, i-1}^{k+1} = D_{\xi}^k(\mathbf{x}_i), \quad (4.35)$$

sendo

$$\mathbf{a}_{\xi}(\mathbf{x}_i) = \frac{\Delta t c_i^2}{4\Delta x^2} \left(1 + \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} \right) \eta(\mathbf{x}_{i+1}), \quad (4.36)$$

$$\mathbf{b}_{\xi}(\mathbf{x}_i) = 1 - \frac{\Delta t c_i^2}{4\Delta x^2} \left(2 + \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} + \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}} \right) \eta(\mathbf{x}_i), \quad (4.37)$$

$$\mathbf{c}_{\xi}(\mathbf{x}_i) = \frac{\Delta t c_i^2}{4\Delta x^2} \left(1 + \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}} \right) \eta(\mathbf{x}_{i-1}), \quad (4.38)$$

e $D_{\xi}^k(\mathbf{x}_i)$ é a quantidade definida na eq. (4.34), calculada no ponto x_i ,

$$D_{\xi}^k(\mathbf{x}_i) = \Lambda_{\xi, i}^k + \frac{\Delta t c_i^2}{2\Delta x^2} \left\{ \left(1 + \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} \right) \left[\alpha_{i+1}^3 \Phi_{i+1}^k - \varsigma_{\xi}(\mathbf{x}_{i+1}) \Lambda_{\xi, i+1}^k \right] \right\} \\ + \frac{\Delta t c_i^2}{2\Delta x^2} \left\{ \left(1 + \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}} \right) \left[\alpha_{i-1}^3 \Phi_{i-1}^k - \varsigma_{\xi}(\mathbf{x}_{i-1}) \Lambda_{\xi, i-1}^k \right] \right\} \\ - \frac{\Delta t c_i^2}{2\Delta x^2} \left\{ \left(2 + \frac{\rho_i}{\rho_{i+1}} + \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}} \right) \left[\alpha_i^3 \Phi_i^k - \varsigma_{\xi}(\mathbf{x}_i) \Lambda_{\xi, i}^k \right] \right\}. \quad (4.39)$$

Para resolvermos a eq. (4.35), podemos aplicar o algoritmo de resolução de matrizes tri-diagonais, proposto por Thomas e mostrado no apêndice E.

No limite $\xi(\mathbf{x}) \rightarrow 0$, as quantidades $\alpha(\mathbf{x}) = 1$, e $\beta(\mathbf{x}) = -\Delta t/2$. Com isto, as relações de

recorrência implícita e explícita, tendem para as mesmas relações encontradas para o caso ideal.

4.1.2 Meios com atrito e viscosidade

Consideremos agora o caso geral, onde os coeficientes de atrito e viscosidade são diferentes de zero. Apesar de ambos serem não nulos, seus valores são pequenos e suas variações ao longo de um meio são suaves o bastante para que suas derivadas espaciais $\partial_{\mathbf{x}}\xi(\mathbf{x}) \approx 0$ e $\partial_{\mathbf{x}}\mu(\mathbf{x}) \approx 0$. Como no caso discutido na seção anterior, desejamos achar a equação da onda para a pressão. Desta forma, efetuamos a derivada temporal na eq. (4.1) e espacial na eq. (4.2),

$$\partial_t \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) + \kappa(\mathbf{x}) (\xi(\mathbf{x}) + \partial_t^2) \Phi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.40)$$

$$\partial_{\mathbf{x}} [\rho^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x}, t)] + (\mu(\mathbf{x}) + \partial_t) \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (4.41)$$

Com estes dois resultados, conseguimos eliminar $\partial_t \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, e utilizando novamente a eq. (4.1), conseguimos uma equação de segunda ordem no tempo, apenas na variável $\Phi(\mathbf{x}, t)$:

$$\partial_t^2 \Phi(\mathbf{x}, t) + \tilde{\xi}(\mathbf{x}) \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) - \tilde{\Gamma}(\mathbf{x}) \times \Phi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.42)$$

em que

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{x}) = \Gamma(\mathbf{x}) - \xi(\mathbf{x}) \mu(\mathbf{x}), \quad (4.43)$$

$$\tilde{\xi}(\mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x}) + \lambda(\mathbf{x}) \quad (4.44)$$

A eq. (4.42) pode ser decomposta em duas equações de primeira ordem. Para isto, definimos a variável $\Lambda_{\mu}(\mathbf{x}, t)$, de modo que:

$$\Lambda_{\mu}(\mathbf{x}, t) = \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) + \tilde{\xi}(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}, t), \quad (4.45)$$

$$\partial_t \Lambda_{\mu}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\Gamma}(\mathbf{x}) \times \Phi(\mathbf{x}, t). \quad (4.46)$$

As eqs. (4.45) e (4.46) são utilizadas na equação de Liouville de uma função $\sigma_{\mu} = \sigma(\Phi, \Lambda_{\mu}, t)$. Comparando-se as eqs. (4.45), (4.46) com (4.5), (4.6), vemos que todo o procedimento efetuado anteriormente pode ser aproveitado para este caso geral. Deste modo, as relações de recorrência implícitas e explícitas são as mesmas da seção anterior, permutando-se $\xi(\mathbf{x})$ por $\tilde{\xi}(\mathbf{x})$, e o operador $\Gamma(\mathbf{x})$ por $\tilde{\Gamma}(\mathbf{x})$. As quantidades $\alpha(\mathbf{x})$ e $\beta(\mathbf{x})$ devem, desta forma, serem corrigidas

para

$$\tilde{\alpha}(\mathbf{x}) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t \tilde{\xi}(\mathbf{x}) \right\}, \quad (4.47)$$

$$\tilde{\beta}(\mathbf{x}) = \frac{1 - \tilde{\alpha}(\mathbf{x})}{\tilde{\xi}(\mathbf{x})}, \quad (4.48)$$

Novamente, no limite em que $\tilde{\xi}(\mathbf{x}) \rightarrow 0$, as quantidades $\tilde{\alpha}(\mathbf{x}) = 1$, e $\tilde{\beta}(\mathbf{x}) = -\Delta t/2$. Com isto, as relações de recorrência implícita e explícita, tendem para o caso ideal.

4.2 Aplicação: Parede dupla com revestimento acústico

Nas seções anteriores, desenvolvemos o método do Split-Operator aplicado a sistemas acústicos, quando estes apresentam termos dissipativos. No caso em que os coeficientes de atrito μ e viscosidade ξ tenderem a zero, as relações de recorrência obtidas, tendem para o caso ideal, discutido no capítulo 2. Como aplicação dos conceitos desenvolvidos, considere um sistema contendo dois meios finitos e ideais, de mesmas características (densidade, velocidade de propagação do som, espessura, etc), no qual exista um meio dissipativo situado entre estes meios. Esta situação é a que acontece quando se deseja fazer um isolamento acústico entre dois ambientes, muito requisitado na construção civil, principalmente na construção de edifícios e habitações coletivas de modo geral.

O problema do isolamento acústico está assim caracterizado: Existe uma transmissão de ondas sonoras em um determinado ambiente, que desejamos que não se transmita para o ambiente seguinte. Estes dois ambientes são vizinhos e existe apenas uma divisória que os separa. Em geral, a parte externa desta divisória se refere ao acabamento do ambiente, que não apresenta boas propriedades de isolamento acústico. Situação idêntica existe também para o material usual na confecção das paredes: tijolo, cimento, argamassas em geral. Deste modo, não esperaríamos uma atenuação muito apreciável de um pacote de ondas, quando penetrasse nesta divisória e, em seguida, emergisse no recinto vizinho. Além disso, em um ambiente fechado com baixo poder de atenuação do som, o mesmo é refletido milhares de vezes pelas paredes, podendo até multiplicar o nível de ruído com grande quantidade de reverberação (eco). A reverberação também influi na qualidade acústica do ambiente, atrapalhando a perfeita audição, pois o indivíduo recebe sons que não são desejáveis e prejudica a inteligibilidade da palavra falada.

Como solução a este problema, costuma-se fazer a divisória entre dois ambientes como sendo a soma de uma parede dupla feita de maneira tradicional, de características idênticas (mesmo material, espessura, etc), as quais estão separadas por um outro material de alto

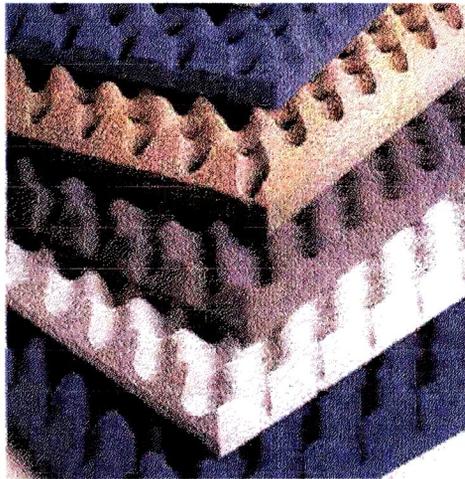


Figura 4-1: A espuma acústica ESPUMEX exibida ao lado, é de alta eficiência, baixo custo, ótimo aspecto e auto extingüível (não propaga o fogo). Como pode-se notar, o ESPUMEX possui o desenho na forma de "mamilos" os quais aumentam a área absorção acústica.

poder de isolamento acústico. Em geral, costuma-se colocar isopor por possuir grande poder de atenuação acústica e também térmica. Para casos onde se deseja apenas reduzir o nível de ruído que passa entre as paredes, a melhor solução é a aplicação de espuma acústica ou jateamento acústico, os quais não permitem que o som seja refletido por superfícies (veja fig. 4-1). Esta situação é a que discutimos nesta seção.

Considere então um meio externo apresentando os mesmos valores de densidade e velocidade de propagação do som que o meio dissipativo. Esta simplificação foi efetuada apenas para simplificar a interpretação dos resultados obtidos numericamente. As paredes apresentam o mesmo valor da velocidade, mas com valor de densidade cinco vezes maior, cujos valores são vistos a seguir:

	ρ (Kg/m ³)	c (m/s)	Z (Kg/ (m ² .s))
Meio Externo	1.10 ³	320	3, 20.10 ⁵
Parede	5.10 ³	320	1, 60.10 ⁶

Neste sistema, as paredes não são dissipativas, de 21 cm de espessura cada uma. O meio isolante possui 40 cm de largura, sendo o único meio com coeficientes de viscosidade e atrito diferentes de zero (Adotamos valores constantes e idênticos para ξ e μ , sendo $\mu = 0.005$).

Um pacote de ondas gaussiano para a pressão, movimenta-se livremente no meio externo,

até atingir uma das paredes do sistema. Este pacote é parcialmente transmitido, obedecendo aos valores teóricos para os coeficientes de transmissão e reflexão:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{2 \rightarrow 1} &= \frac{2}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1+1} = \frac{1}{3}, & \mathbf{R}_{2 \rightarrow 1} &= \frac{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1-1}{\mathbf{Z}_2/\mathbf{Z}_1+1} = \frac{2}{3}, \\ \mathbf{T}_{2 \rightarrow 3} &= \frac{2}{\mathbf{Z}_3/\mathbf{Z}_2+1} = \frac{5}{3}, & \mathbf{R}_{2 \rightarrow 3} &= \frac{\mathbf{Z}_3/\mathbf{Z}_2-1}{\mathbf{Z}_3/\mathbf{Z}_2+1} = -\frac{2}{3}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

A evolução temporal deste pacote de ondas se encontra na figura 4-2, e apresenta as seguintes características: Decorridos $2,5 \times 10^{-3}$ s após o início da sua evolução, o pacote de ondas sofreu uma reflexão com inversão de fase quando chocou-se com a parede. A parcela que penetrou na primeira parede sofreu nova divisão, sendo que o pacote de ondas refletido apresenta a mesma fase do pacote de ondas incidente. A não inversão de fase deste segundo pacote refletido se deve a maior impedância acústica da parede. O pacote transmitido no início do meio dissipativo, o qual começa a sofrer uma atenuação. Esta atenuação pode ser vista nos instantes 3×10^{-3} s e $3,5 \times 10^{-3}$ s. O pacote de ondas que reflete na primeira parede sofre novas transmissões parciais em ambas as interfaces da parede, fornecendo outros pacotes de onda, com intensidades menores. Como a parede apresenta sempre o mesmo valor de velocidade de propagação do som, os pulsos que saem são igualmente espaçados entre si.

Nos instantes posteriores, a parte do pacote de ondas inicial que começa a movimentar-se no meio isolante, sofre gradual amortecimento, e nova reflexão ao incidir na segunda parede. Entretanto, estes pacotes de onda refletidos são muito débeis e desaparecem no interior do meio dissipativo. No instante 4.10^{-3} s, apenas uma pequena parcela pode ser vista, transmitida para o ambiente vizinho. A forma do pacote de ondas que consegue passar por este isolamento acústico apresenta a mesma forma do pacote de ondas original, pois o amortecimento não modifica a forma do pacote de ondas, apenas diminui sua intensidade ao longo do tempo.

4.3 Meios não-lineares: Considerações iniciais

Passaremos agora a considerar a propagação de ondas acústicas em meios não-lineares. Para isto, utilizamos o conceito de fluido ideal, cujas propriedades foram detalhados no capítulo 1. Tendo por objetivo determinar a equação da onda para o caso não-linear, passamos a dedução de três relações entre as variáveis $\Phi(\mathbf{x}, t)$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\chi(\mathbf{x}, t)$, definidas como sendo a pressão, a densidade e o deslocamento do fluido ideal, frente à sua posição normal de equilíbrio. Começaremos então pela equação de conservação da massa da partícula de fluido. Sejam t_1 e t_2 dois instantes de tempo: No primeiro, a partícula de fluido se encontra na sua posição normal de equilíbrio, no ponto $(\mathbf{x}_0, 0, 0)$. Em t_2 , esta partícula é perturbada pela presença da onda acústica, encontrando-se fora de sua posição de equilíbrio. Em ambos os casos, a massa \mathbf{M} da

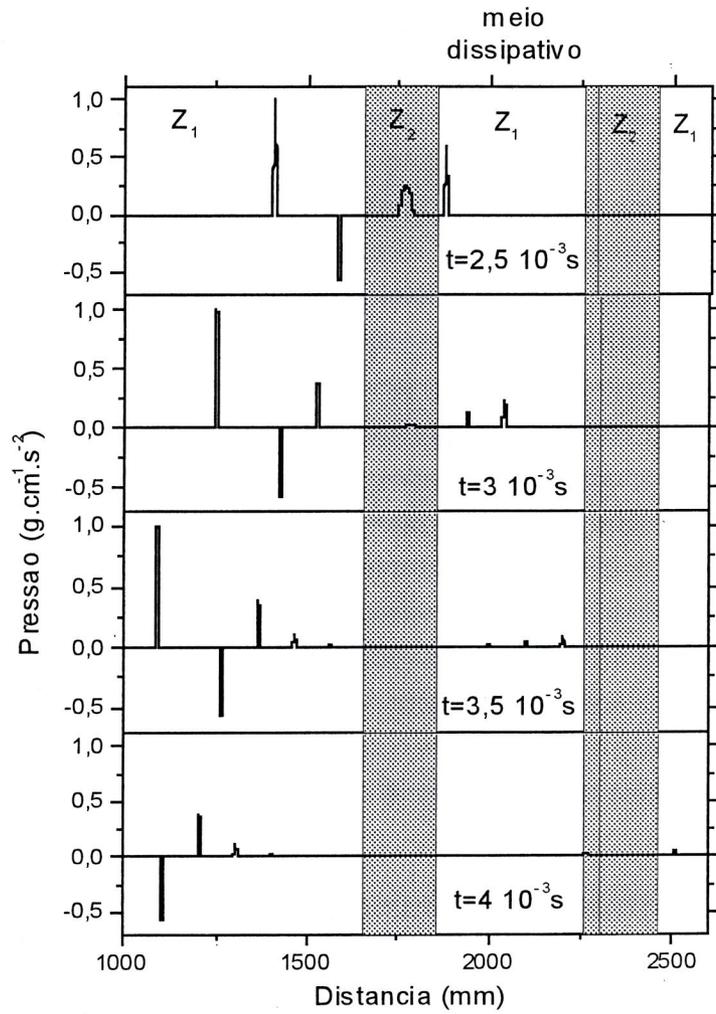


Figura 4-2: Parede dupla, com um meio isolante em seu centro.

partícula não se altera, apesar da densidade e elemento de volume serem diferentes, como visto pela figura 4-3.

Sejam $\rho(\mathbf{x}_o, t_1)$ e $\rho(\mathbf{x}_o, t_2)$, as densidades desta partícula de fluido, nos instantes t_1 e t_2 . Os respectivos elementos de volume nestes instantes são definidos por $dV(\mathbf{x}_o, t_1)$ e $dV(\mathbf{x}_o, t_2)$, onde

$$dV(\mathbf{x}_o, t_1) = \mathbf{A}_{yz} \Delta \mathbf{x}, \quad (4.50)$$

$$dV(\mathbf{x}_o, t_2) = \mathbf{A}_{yz} [\chi(\mathbf{x}_o + \Delta \mathbf{x}, t) - \chi(\mathbf{x}_o, t) + \Delta \mathbf{x}]. \quad (4.51)$$

Nestas equações, \mathbf{A}_{yz} é a área do plano perpendicular ao eixo \mathbf{x} . Uma vez que a massa se conserva,

$$\rho(\mathbf{x}_o, t_1) dV(\mathbf{x}_o, t_1) = \rho(\mathbf{x}_o, t_2) dV(\mathbf{x}_o, t_2). \quad (4.52)$$

Substituindo as eqs. (4.50) e (4.51) na eq. (4.52), vemos que, ao contrário do caso linear, a densidade do fluido varia com a passagem da onda acústica. Entretanto, esta variação é supostamente pequena e local. Ela é proporcional ao inverso da derivada espacial do deslocamento de sua posição normal, que perturba o valor da densidade do fluido não-perturbado $\check{\rho}$:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{\check{\rho}}{1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)}, \quad (4.53)$$

onde

$$\check{\rho} = \frac{M}{\mathbf{A}_{yz} \Delta \mathbf{x}}. \quad (4.54)$$

Como uma segunda equação que relaciona $\chi(\mathbf{x}, t)$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\Phi(\mathbf{x}, t)$, consideremos a terceira lei de Newton, aplicado ao elemento de volume perturbado pela presença da onda acústica:

$$\mathbf{F}_r(\mathbf{x}, t) = M \partial_t^2 \chi(\mathbf{x}, t). \quad (4.55)$$

A força \mathbf{F}_r , é a resultante da subtração das forças que atuam nas interfaces da partícula de fluido. No equilíbrio, estas forças se equivalem e $\mathbf{F}_r = 0$. Quando a partícula não está em equilíbrio, a força \mathbf{F}_r é proporcional a subtração dos valores das pressões nas interfaces, que estavam originalmente nos pontos \mathbf{x}_o e $\mathbf{x}_o + \Delta \mathbf{x}$ (veja figura 4-4):

$$\mathbf{F}_r(\mathbf{x}_o, t_2) = -\mathbf{A}_{yz} [\Phi(\mathbf{x}_o + \Delta \mathbf{x} + \chi(\mathbf{x}_o + \Delta \mathbf{x}, t), t_2) - \Phi(\mathbf{x}_o + \chi(\mathbf{x}_o, t), t_2)], \quad (4.56)$$

$$\cong -\mathbf{A}_{yz} \Delta \mathbf{x} \partial_{\mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x}, t_2). \quad (4.57)$$

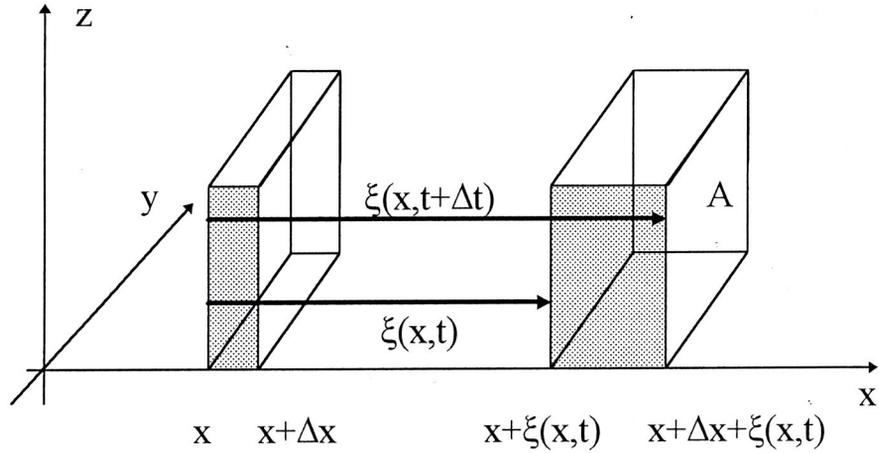


Figura 4-3: Deslocamento de uma partícula de fluido de sua posição de equilíbrio.

Este último resultado é conseguido, expandindo-se $\Phi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x} + \chi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t), t_2)$ em série de Taylor, em torno de $\Phi(\mathbf{x} + \chi(\mathbf{x}, t), t_2)$. Utilizando as eqs. (4.54) e (4.57), a eq. (4.55) é escrita em termos do gradiente de pressão e da derivada temporal do deslocamento da posição normal de equilíbrio do fluido:

$$-\partial_{\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x}, t) = \check{\rho} \partial_t^2 \chi(\mathbf{x}, t). \quad (4.58)$$

Por fim, a última relação entre $\chi(\mathbf{x}, t)$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\Phi(\mathbf{x}, t)$ é uma equação de estado, geralmente empírica, e que depende da substância a ser considerada. No caso deste fluido ser um gás, que apresenta contrações e expansões adiabáticas, esta equação de estado é:

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\Phi}_o(\mathbf{x}, t) \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_o} \right)^\gamma, \quad (4.59)$$

onde $\gamma = C_\Phi/C_V$, é a razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes. Abaixo listamos alguns valores de γ , e também de sua respectiva densidade, medidos a uma temperatura

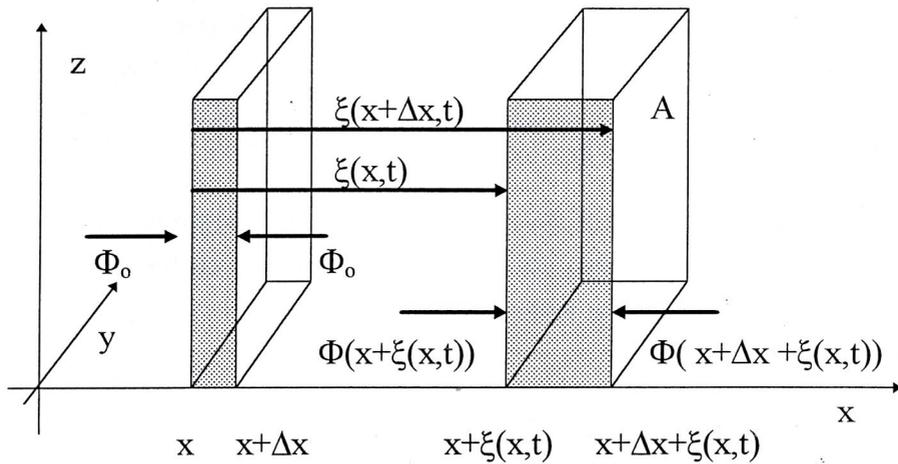


Figura 4-4: Subtração dos valores da pressão nas faces da partícula de fluido.

de 0 °C. e a pressão de 1 atm ($1.013 \times 10^5 \text{ N/m}^2$) :

Substância	$\check{\rho}$ em Kg/m ³	$\gamma = C_{\Phi}/C_V$
Ar	1.293	1.40
CO ₂	1.977	1.30
He	0.1785	1.66
H ₂	0.0899	1.41
N ₂	1.251	1.40
O ₂	1.429	1.40

Nestes meios adiabáticos, a velocidade de propagação da onda acústica depende da derivada da pressão com relação a densidade:

$$c(\mathbf{x}) = \sqrt{\partial_{\rho} \Phi(\mathbf{x}, t)} = \check{c}(\mathbf{x}) \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\check{\rho}} \right)^{\frac{\gamma-1}{2}}, \quad (4.60)$$

onde $\check{c}(\mathbf{x})$ é a velocidade do som de referência, calculada quando a densidade não é perturbada $\check{\rho}$. Utilizando a equação de Claperyon para os gases ideais, podemos exprimir a pressão $\Phi(x, t)$ como:

$$\Phi(x, t) = \rho(x) \frac{R T}{mol}, \quad (4.61)$$

onde $R = 8.32 \text{ J/mol.K}$ é a constante universal dos gases perfeitos e T é a temperatura em graus Kelvin. Desta forma, a velocidade de referência é dada por:

$$\check{c}(\mathbf{x}) = \sqrt{\partial_\rho \Phi(\mathbf{x}, t)|_{\check{\rho}}} = \sqrt{\frac{R T}{mol}}. \quad (4.62)$$

Deduzidas as relações entre $\chi(\mathbf{x}, t)$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\Phi(\mathbf{x}, t)$, passaremos a determinar a equação de onda para um meio não-linear, utilizando-a no estudo da evolução temporal de um pacote de ondas movimentando-se neste meio.

4.4 Equação da onda no caso não-linear

Na seção anterior, deduzimos as equações necessárias para se obter a equação da onda acústica, para um meio não-linear. Com o auxílio das eqs. (4.53), (4.58), (4.59) e (4.60), obtemos a equação de movimento para $\chi(\mathbf{x}, t)$. Considere então a lei de Newton, onde existe um termo proporcional ao gradiente da pressão. Reescrevendo esta derivada espacial como:

$$\partial_{\mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x}, t) = (\partial_{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, t)) (\partial_\rho \Phi(\mathbf{x}, t)), \quad (4.63)$$

$$= - \left[\frac{\check{\rho}}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^2} \partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) \right] c^2(\mathbf{x}, t), \quad (4.64)$$

onde utilizamos a eq. (4.53) para $\partial_{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, t)$, e a eq. (4.60) para $\partial_\rho \Phi(\mathbf{x}, t)$. Exprimindo $c^2(\mathbf{x}, t)$ em termos do deslocamento do fluido em relação a sua posição de equilíbrio, temos que

$$\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) = \check{c}^2(\mathbf{x}) [1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{-(1+\gamma)} \partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t). \quad (4.65)$$

Esta é a equação de onda para $\chi(\mathbf{x}, t)$, movimentando-se em um meio homogêneo, adiabático e não-linear. Vamos de momento, considerar dois casos: O termo não-linear agindo como uma perturbação, e na subseção seguinte, o tratamento geral para os casos de densidade constante e variável ao longo do sistema.

4.4.1 Termo não-linear agindo como uma perturbação

Primeiramente, vamos tratar o caso em que o termo não-linear apenas modifica ligeiramente a equação de onda linear. Neste limite, podemos aproximar

$$[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{-(1+\gamma)} \cong 1 - (1 + \gamma) \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t). \quad (4.66)$$

Assim, a eq. (4.65) pode ser escrita como

$$\partial_t^2 \chi(\mathbf{x}, t) = \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \left[\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) - \frac{(1+\gamma)}{2} \partial_{\mathbf{x}} (\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t))^2 \right]. \quad (4.67)$$

A equação de onda anterior pode ser decomposta em duas equações de primeira ordem. Para isso, definimos a velocidade do pacote de ondas $\mathbf{v}_\chi(\mathbf{x}, t)$, movimentando-se neste meio adiabático:

$$\mathbf{v}_\chi(\mathbf{x}, t) = \partial_t \chi(\mathbf{x}, t), \quad (4.68)$$

$$\partial_t \mathbf{v}_\chi(\mathbf{x}, t) = \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \left[\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) - \frac{(1+\gamma)}{2} \partial_{\mathbf{x}} (\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t))^2 \right]. \quad (4.69)$$

A partir daqui, seguimos os mesmos passos descritos para o caso linear. Deste modo, a evolução temporal para a densidade $\sigma_\chi = \sigma(\mathbf{v}_\chi, \chi, t)$, no intervalo $[t_i, t_f]$ é dada por:

$$\sigma_\chi^f = \exp \left\{ \int_{t_i}^{t_f} [\mathbf{A}_\chi(\mathbf{x}, t) + \mathbf{B}_\chi(\mathbf{x}, t)] dt \right\} \times \sigma_\chi^i, \quad (4.70)$$

sendo

$$\mathbf{A}_\chi(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{v}_\chi(\mathbf{x}, t) \partial_\chi, \quad (4.71)$$

$$\mathbf{B}_\chi(\mathbf{x}, t) = \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \left[\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) - \frac{(1+\gamma)}{2} \partial_{\mathbf{x}} (\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t))^2 \right] \partial_{\mathbf{v}_\chi}, \quad (4.72)$$

onde substituímos os termos equivalentes a $\partial_t \chi(\mathbf{x}, t)$ e $\partial_t \mathbf{v}_\chi(\mathbf{x}, t)$, dados pelas eqs. (4.68) e (4.69):

Esta integral temporal total pode ser particionada em M integrais temporais parciais. Cada uma destas, efetua a evolução de $\sigma_\chi(\mathbf{v}_\chi, \chi, t)$ entre dois instantes consecutivos t_k e t_{k+1} . Utilizando a técnica de separação de variáveis do Split-Operator, dividimos esta integral num produto de três exponenciais:

$$\begin{aligned} \sigma_\chi^{k+1}(\mathbf{v}, \chi) = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{A}_\chi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t \mathbf{B}_\chi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{A}_\chi(\mathbf{x}, t) \right\} \times \sigma_\chi^k(\mathbf{v}, \chi) \end{aligned} \quad (4.73)$$

ou

$$\begin{aligned} \sigma_{\chi}^{k+1}(\mathbf{v}, \chi) &= \exp\left\{\frac{1}{2}\Delta t \mathbf{B}_{\chi}(\mathbf{x}, t)\right\} \times \\ &\quad \exp\left\{\Delta t \mathbf{A}_{\chi}(\mathbf{x}, t)\right\} \times \\ &\quad \exp\left\{\frac{1}{2}\Delta t \mathbf{B}_{\chi}(\mathbf{x}, t)\right\} \times \sigma_{\chi}^k(\mathbf{v}, \chi) \end{aligned} \quad (4.74)$$

A primeira destas duas possíveis equações nos fornece relações de recorrência mais simples entre $\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x})$, $\chi^{k+1}(\mathbf{x})$ e $\mathbf{v}^k(\mathbf{x})$, $\chi^k(\mathbf{x})$, sendo assim, adotado em nossos cálculos computacionais. Conforme discutido anteriormente, os esquemas de maior estabilidade numérica são os esquemas semi-implícitos. Nestes esquemas, as integrais temporais de $\mathbf{A}_{\chi}(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{B}_{\chi}(\mathbf{x}, t)$, são centradas no instante $t_{k+\frac{1}{2}}$, considerado o ponto médio entre os instantes t_k e t_{k+1} :

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathbf{A}_{\chi}(\mathbf{x}, t) dt = \Delta t \mathbf{A}_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}), \quad (4.75)$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathbf{B}_{\chi}(\mathbf{x}, t) dt = \Delta t \mathbf{B}_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}), \quad (4.76)$$

de modo que as relações de recorrência são dadas por:

$$\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \left[\partial_{\mathbf{x}}^2 F_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) - \frac{(1+\gamma)}{2} \partial_{\mathbf{x}} \left(\partial_{\mathbf{x}} F_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \right)^2 \right], \quad (4.77)$$

$$\chi^{k+1}(\mathbf{x}) = \chi^k(\mathbf{x}) - \Delta t \mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}). \quad (4.78)$$

onde

$$F_{\chi}^k(\mathbf{x}) = \chi^k(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^k(\mathbf{x}). \quad (4.79)$$

Expressando $F_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x})$ em termos de $F_{\chi}^k(\mathbf{x})$ e $F_{\chi}^{k+1}(\mathbf{x})$, temos que

$$F_{\chi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[F_{\chi}^k(\mathbf{x}) + F_{\chi}^{k+1}(\mathbf{x}) \right], \quad (4.80)$$

$$= \frac{1}{2} \left[F_{\chi}^k(\mathbf{x}) + F_{\chi}^k(\mathbf{x}) + \frac{\partial F_{\chi}^k(\mathbf{x})}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 F_{\chi}^k(\mathbf{x})}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \dots \right], \quad (4.81)$$

$$= \chi^k(\mathbf{x}) + O(\Delta t^3) \quad (4.82)$$

E conseqüentemente

$$\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^k(\mathbf{x}) + \Delta t \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \Upsilon_{\chi}^k, \quad (4.83)$$

$$\chi^{k+1}(\mathbf{x}) = \chi^k(\mathbf{x}) - \Delta t \mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}), \quad (4.84)$$

onde

$$\Upsilon_{\chi}^k = \partial_{\mathbf{x}}^2 \chi^k(\mathbf{x}) - \frac{(1+\gamma)}{2} \partial_{\mathbf{x}} \left(\partial_{\mathbf{x}} \chi^k(\mathbf{x}) \right)^2. \quad (4.85)$$

Estas são as relações de recorrência, quando a não-linearidade se comporta apenas como uma perturbação ao caso linear.

4.4.2 Tratamento geral do termo não-linear

No caso onde $\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t) \sim 1$, a aproximação feita na eq. (4.66) não é válida, pois o termo não age apenas como uma perturbação. Se optarmos ainda pela expansão de $[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{-(1+\gamma)}$, uma somatória de termos referentes às ordens de $\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)$ aparece na equação de onda para $\chi(\mathbf{x}, t)$:

$$\partial_{\mathbf{t}}^2 \chi(\mathbf{x}, t) = \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \tilde{a}_n [\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^n \right\}. \quad (4.86)$$

onde os coeficientes \tilde{a}_n são:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1 &= 1, \\ \tilde{a}_2 &= (1+\gamma) = \tilde{a}_1 (1+\gamma), \\ \tilde{a}_3 &= (1+\gamma)(2+\gamma) = \tilde{a}_2 (2+\gamma), \\ &\vdots \\ \tilde{a}_n &= \tilde{a}_{n-1} (n-1+\gamma), \end{aligned} \quad (4.87)$$

O procedimento a partir daqui é análogo ao efetuado na subseção anterior. Deste modo, apresentaremos apenas as relações de recorrência, para o algoritmo semi-implícito:

$$\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^k(\mathbf{x}) - \tilde{c}^2(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} [1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{-(1+\gamma)}, \quad (4.88)$$

$$\chi^{k+1}(\mathbf{x}) = \chi^k(\mathbf{x}) - \Delta t \mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}). \quad (4.89)$$

Estas relações de recorrência são válidas para o caso geral, quando o sistema apresenta densidade constante. Quando os meios apresentam diferenças nos valores da densidade não perturbada $\check{\rho}$, esta passa a sofrer a ação da derivada espacial. Deste modo, o gradiente da pressão é dado por:

$$\partial_{\mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x}, t) = \frac{\tilde{c}^2(\mathbf{x})}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{\gamma}} \left\{ \partial_{\mathbf{x}} \check{\rho}(\mathbf{x}) - \frac{\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t)}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]} \right\}. \quad (4.90)$$

Como a densidade não é mais constante ao longo de todo o sistema, acrescenta-se um termo a

mais na equação da onda para $\chi(\mathbf{x}, t)$:

$$\partial_t^2 \chi(\mathbf{x}, t) = \frac{\check{c}^2(\mathbf{x})}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^\gamma} \left\{ \frac{\partial_{\mathbf{x}}^2 \chi(\mathbf{x}, t)}{1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)} - \partial_{\mathbf{x}} \ln [\check{\rho}(\mathbf{x})] \right\}. \quad (4.91)$$

O tratamento deste termo adicional é idêntico ao realizado anteriormente para $[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^{-(1+\gamma)}$. Deste modo, definindo-se os coeficientes \check{b}_n , onde:

$$\begin{aligned} \check{b}_1 &= 1, \\ \check{b}_2 &= \gamma = \check{b}_1 \gamma, \\ \check{b}_3 &= \gamma (1 + \gamma) = \check{b}_2 (1 + \gamma), \\ &\vdots \\ \check{b}_n &= \check{b}_{n-1} (n - 1 + \gamma), \end{aligned} \quad (4.92)$$

a equação da onda torna-se um produto de duas somatórias:

$$\partial_t^2 \chi(\mathbf{x}, t) = \check{c}^2(\mathbf{x}) \left\{ \partial_{\mathbf{x}} \left[\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\check{a}_n}{n!} [\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^n \right] - \left[\sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\check{b}_m}{m!} [\partial_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{x}, t)]^m \right] \partial_{\mathbf{x}} \ln [\check{\rho}(\mathbf{x})] \right\}. \quad (4.93)$$

O procedimento de se partir a equação da onda em duas, utilizar a equação de Liouville na forma exponencial e depois aplicar as propriedades de operadores diferenciais em exponenciais, a fim de obter as relações de recorrência é novamente repetida. Após todo este procedimento, obtemos as relações de recorrência para o algoritmo semi-implícito:

$$\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^k(\mathbf{x}) + \frac{\check{c}^2(\mathbf{x})}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi^k(\mathbf{x}, t)]^\gamma} \check{\Upsilon}_\chi^k, \quad (4.94)$$

$$\chi^{k+1}(\mathbf{x}) = \chi^k(\mathbf{x}) - \Delta t \mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x}), \quad (4.95)$$

onde:

$$\check{\Upsilon}_\chi^k = \frac{(1 + \gamma)}{[1 + \partial_{\mathbf{x}} \chi^k(\mathbf{x}, t)]^2} \partial_{\mathbf{x}}^2 \chi^k(\mathbf{x}, t) - \partial_{\mathbf{x}} \ln [\check{\rho}(\mathbf{x})]. \quad (4.96)$$

Quando $\partial_{\mathbf{x}} \check{\rho}(\mathbf{x}) = 0$, obtemos as mesmas relações de recorrência anteriores. Discutida a teoria para as equações não-lineares, passamos a apresentar um exemplo de simulação numérica.

4.5 Pacote de ondas penetrando em um meio não-linear

Como exemplo de aplicação da teoria aqui construída, consideremos um sistema composto por um meio não-linear (MNL), envolto por outro linear. A espessura do MNL é de 800 mm enquanto que o meio linear (ML) é considerado infinito. Os materiais que formam o sistema são homogêneos, isotrópicos e uniformes, constantes ao longo de cada meio. Os valores das densidades, velocidades de propagação do som e impedâncias acústicas são dados por:

Meio	ρ (Kg/m ³)	c (m/s)	Z (Kg/(m ² .s))
Externo	1.10 ³	400	4.10 ⁵
Não - Linear	5.10 ²	400	2.10 ⁵

A impedância acústica característica Z do MNL é a metade do ML, e o valor do parâmetro $\gamma = C_{\Phi}/C_V = 10$. Uma vez que o material não-linear apresenta uma densidade distinta do meio externo, as relações de recorrência discretizadas, que devem ser utilizadas são:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}_i^{k+1} &= \mathbf{v}_i^k + \frac{\check{c}_i^2}{\Delta \mathbf{x}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{a_n}{n!} \left\{ \left[\frac{\chi_{i+1}^k - \chi_i^k}{\Delta \mathbf{x}} \right]^n - \left[\frac{\chi_i^k - \chi_{i-1}^k}{\Delta \mathbf{x}} \right]^n \right\} \\
 &\quad + \frac{\check{c}_i^2}{\Delta \mathbf{x}} \check{\Psi}_i \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{b_m}{m!} \left[\frac{\chi_{i+1}^k - \chi_{i-1}^k}{2\Delta \mathbf{x}} \right]^m, \\
 \chi_i^{k+1} &= \chi_i^k - \Delta t \mathbf{v}_i^{k+1}.
 \end{aligned} \tag{4.97}$$

onde

$$\check{\Psi}_i = \frac{\check{\rho}_{i+1} - \check{\rho}_{i-1}}{\check{\rho}_i} \tag{4.98}$$

No limite em que a parte não-linear atua apenas como uma perturbação ao termo linear, apenas os dois primeiros termos de cada somatória são importantes, e as relações de recorrência podem ser aproximadas por:

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \mathbf{v}_i^k + \frac{\check{c}_i^2}{2\Delta \mathbf{x}^2} \Delta \zeta_i^k, \tag{4.99}$$

$$\chi_i^{k+1} = \chi_i^k - \Delta t \mathbf{v}_i^{k+1}, \tag{4.100}$$

onde

$$\begin{aligned}
 \Delta \zeta_i^k &= 4\chi_i^k + (\check{\Psi}_i - 2)\chi_{i-1}^k - (\check{\Psi}_i + 2)\chi_{i+1}^k + \check{\Psi}_i^a (\chi_{i+1}^k)^2 + \check{\Psi}_i^b (\chi_{i-1}^k)^2 + \\
 &\quad 2(1 + \gamma_i)\chi_i^k (\chi_{i-1}^k - \chi_{i+1}^k) - \frac{1}{2}\gamma_i \check{\Psi}_i \chi_{i+1}^k \chi_{i-1}^k.
 \end{aligned} \tag{4.101}$$

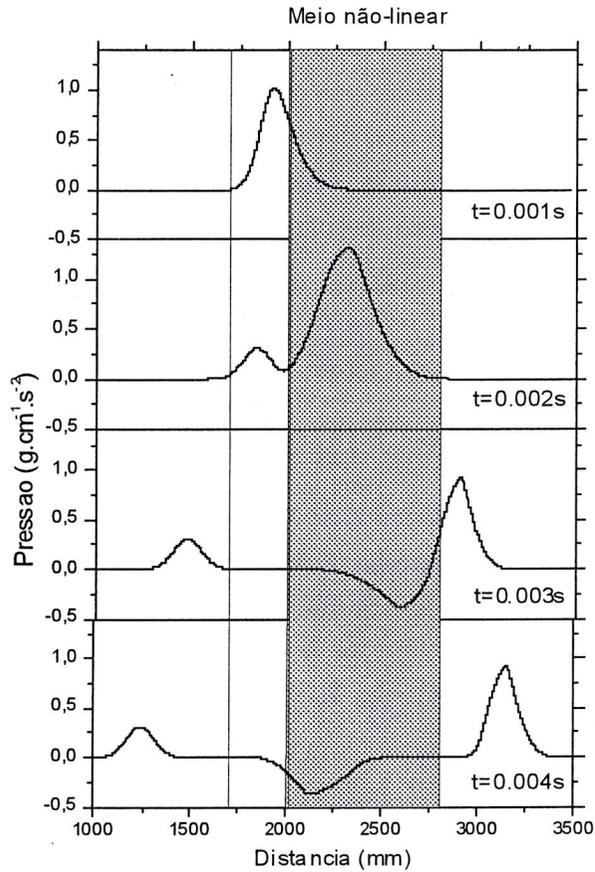


Figura 4-5: Evolução temporal para um pulso, penetrando num meio não-linear.

e

$$\Psi_i^a = 1 + \gamma_i + \frac{\gamma_i}{4} \Psi_i, \quad (4.102)$$

$$\Psi_i^b = 1 + \gamma_i - \frac{\gamma_i}{4} \Psi_i. \quad (4.103)$$

Seja um pacote de ondas gaussiano, que apresenta as condições iniciais dadas pelas eqs. (2.36) e (2.37). No instante inicial, este pacote se encontra completamente no ML, sofrendo divisão em partes iguais, logo em seguida. Uma das partes do pacote apresenta o sentido de movimento que se aproxima do MNL, enquanto que o outro se movimenta na direção oposta.

Pela figura 4-5, vemos que no instante 0.001 s, o pacote de ondas incide na interface de

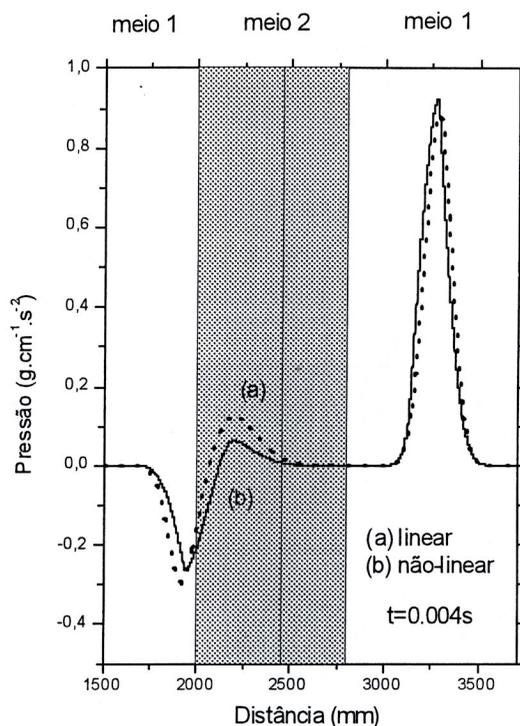


Figura 4-6: Comparação entre os pulsos de onda movimentando-se num meio (a) linear e (b) não-linear.

separação entre os meios linear e não-linear. Uma vez que a impedância do MNL é menor do que a do linear, o pacote de ondas refletido não sofre inversão de fase. Além disso, o coeficiente de transmissão é maior do que 1, de forma que o valor máximo de pressão transmitida é maior do que a do pacote incidente. No instante 0.003 s, o pulso está sofrendo nova transmissão parcial, sendo que o pacote de onda refletido apresenta fase invertida. No instante 0.004 s o pacote já está novamente no meio linear, porém com a forma distorcida (veja a comparação com o caso linear na fig. 4-6).

Discutido o que acontece para um sistema que apresenta apenas um meio não-linear, repetimos esta análise, agora para um cristal acústico não-linear. Este cristal é formado por dez meios não-lineares, de 50 mm de espessura cada um. Estes meios apresentam os mesmos parâmetros utilizados no caso anterior e a separação entre meios não-lineares vizinhos também é de 50 mm.

Conforme fig.4-7, o pacote de ondas penetra no cristal no instante 0.001 s, e gradualmente vai distorcendo sua forma, enquanto movimenta-se no interior deste cristal. Devido a diferenças entre as impedâncias dos materiais que formam os meios não-lineares e lineares, as interfaces

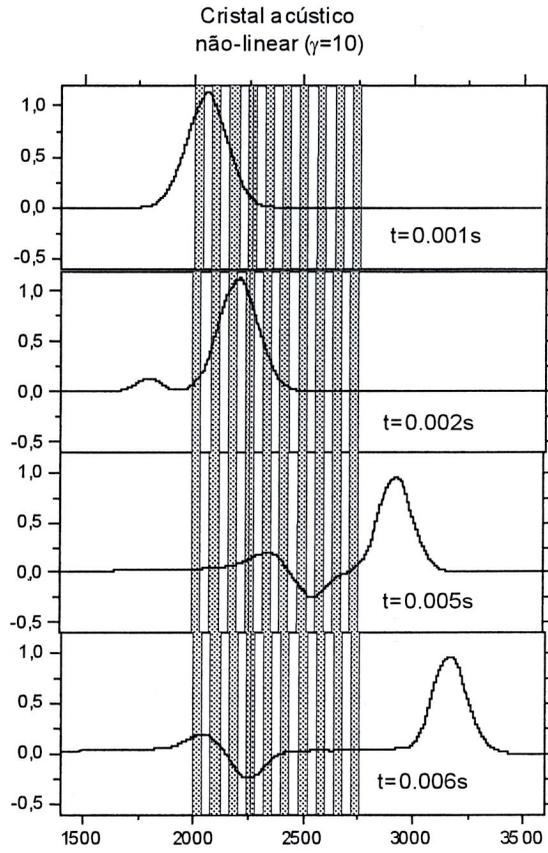


Figura 4-7: Evolução do pacote de ondas em um cristal acústico não-linear

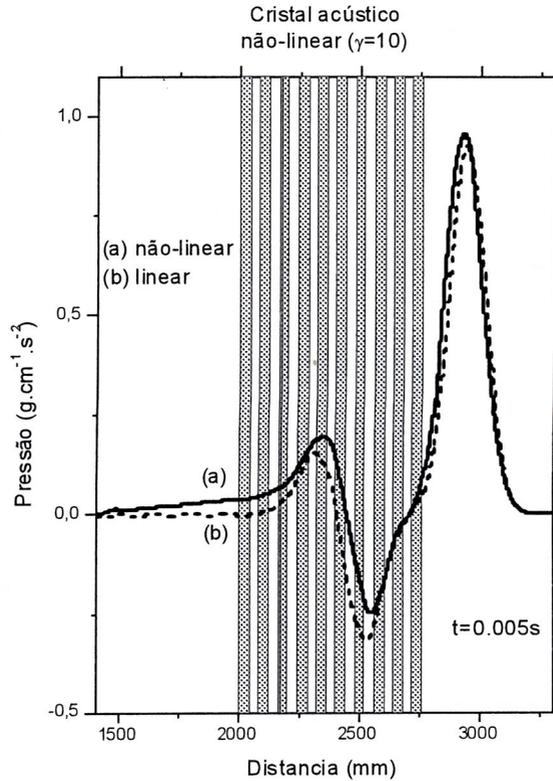


Figura 4-8: Comparação entre os pacotes de onda da pressão para os cristais acústicos linear e não-linear.

que delimitam cada meio agem como centros espalhadores. O pacote de onda incidente se divide em uma série de pacotes transmitido e refletido que gradualmente vão saindo do cristal acústico, com intensidades que decaem conforme o tempo avança. No instante 0.005 s, o pacote está saindo deste cristal, com a forma de onda diferente da que teria se o cristal fosse linear (comparação com o sistema linear é visto na fig. 4-8). Deste modo, ao contrário do caso dissipativo, o termo não-linear presente na equação da onda modifica a forma do pacote de ondas para a pressão.

Capítulo 5

Sistemas Acústicos Bidimensionais

Nos capítulos anteriores, estudamos a evolução temporal de pacotes de ondas acústicas, propagando-se ao longo de sistemas unidimensionais. Para isto, foram desenvolvidos dois algoritmos computacionais distintos, apresentando uma relação de recorrência entre a pressão, $\Phi(\mathbf{x}, t)$, e taxa de variação, $\Lambda(\mathbf{x}, t) = \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t)$. Estas relações de recorrências, relacionam a pressão e sua derivada temporal entre dois instantes temporais consecutivos t_k e t_{k+1} , que, para o caso tridimensional, são dadas por:

$$\Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \left[\Phi_{(1)}^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \Delta t \Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) \right], \quad (5.1)$$

$$\Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi_{(1)}^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \Delta t \left[\Lambda_{(1)}^k(\mathbf{r}) + \Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r}) \right], \quad (5.2)$$

e

$$\Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}) - \Delta t \left[\Lambda_{(2)}^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}) \right], \quad (5.3)$$

$$\Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda_{(2)}^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \left[\Phi_{(2)}^k(\mathbf{r}) + \Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r}) \right]. \quad (5.4)$$

Com as relações de recorrência expressas desta maneira, o valor de uma das variáveis deve ser conhecida no instante t_{k+1} , para podermos determinar o valor da outra. No primeiro algoritmo, devemos conhecer $\Lambda_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r})$ para calcularmos $\Phi_{(1)}^{k+1}(\mathbf{r})$. No segundo algoritmo, o conhecimento de $\Phi_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r})$ é um pré-requisito indispensável para que possamos saber o valor de $\Lambda_{(2)}^{k+1}(\mathbf{r})$. O primeiro par de equações é bem mais simples de ser implementado que o segundo e, por este motivo, foi utilizado no capítulo 2. Entretanto, quando estudamos um sistema bidimensional, estas relações explícitas se tornam muito instáveis numericamente, e portanto muito restritivas. Por este motivo, foi necessário desenvolver algoritmos mais estáveis, o que será discutido neste

5.1 Relações de recorrência para sistemas bidimensionais

Nesta seção, desenvolveremos as relações de recorrência implícitas e semi-implícitas, que apresentam muito estabilidade numérica maior do que as explícitas, mostradas nas eqs. (5.1) e (5.2). Estas duas representações se mostram muito mais apropriadas para o estudo dos casos bidimensionais. Nossas discussões aqui se restringirão apenas ao primeiro dos dois possíveis algoritmos. Isto pois as eqs. (5.1) e (5.2) são mais simples de serem implementadas que as eqs. (5.3) e (5.4). A partir daqui, omitiremos o sub-índice (1), pois apenas nos referiremos ao primeiro algoritmo.

Voltemos de momento à forma exponencial da equação de Liouville, entre os instantes de tempo t_k e t_{k+1} . Nesta equação, a função $\sigma_{\Phi}^{k+1}(\Phi, \Lambda)$ está relacionada com $\sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda)$ por:

$$\sigma_{\Phi}^{k+1}(\Phi, \Lambda) = \exp \left\{ \int_{t_k}^{t_{k+1}} [A_{\Phi}(\mathbf{r}, t) + B_{\Phi}(\mathbf{r}, t)] dt \right\} \times \sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda). \quad (5.5)$$

Ao contrário das relações explícitas, onde a dependência temporal é tomada no instante t_k , centramos no instante $t_{k+\frac{1}{2}}$, o valor das integrais temporais dos operadores situados nas exponenciais a serem aplicadas em $\sigma_{\Phi}(\Phi, \Lambda, t)$. Aplicando-se a técnica de separação dos operadores diferenciais situados no argumento de uma exponencial, temos então que

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{k+1}(\Phi, \Lambda) = & \exp \left\{ \frac{\Delta t}{2} A_{\Phi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t B_{\Phi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{\Delta t}{2} A_{\Phi}^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda). \end{aligned} \quad (5.6)$$

As propriedades dos operadores diferenciais, quando aplicadas em $\sigma_{\Phi}^k(\Phi, \Lambda)$, são as mesmas que foram utilizadas para o caso unidimensional. Aplicando-se sequencialmente as três exponenciais mostradas na eq. (5.6), e, em seguida, comparando os dois lados desta equação, obtemos as seguintes relações de recorrência entre $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$, e $\Phi^k(\mathbf{r})$, $\Lambda^k(\mathbf{r})$, que são escritas na forma:

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \left[F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r}) + F_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right], \quad (5.7)$$

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi^k(\mathbf{r}) - \Delta t \Lambda^{k+1}(\mathbf{r}), \quad (5.8)$$

onde definimos:

$$F_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = \Phi^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}\Delta t \Lambda^k(\mathbf{r}). \quad (5.9)$$

Podemos comparar as eqs. (5.7) e (5.8) com as relações de recorrência explícitas, dadas pelas eqs. (5.1) e (5.2): Enquanto a equação para $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$ praticamente não sofreu nenhuma alteração, surgiu a quantidade $F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r})$ na equação para $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$. Esta última quantidade apresenta a mesma forma da eq. (5.9), porém sendo calculada no instante t_{k+1} . Uma vez que tanto $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$ quanto $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$ não são desconhecidos em t_k , dois procedimentos podem ser efetuados para se resolver a eq. (5.7).

- **Caso 1 - Relações de recorrência semi-implícitas:** Para se obter estas relações, expandimos $F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r})$ em série de Taylor em torno de $F_{\Phi}^k(\mathbf{r})$, de modo que:

$$F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r}) + F_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = 2F_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + \frac{\partial F_{\Phi}^k(\mathbf{r})}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 F_{\Phi}^k(\mathbf{r})}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \dots, \quad (5.10)$$

$$= 2\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) + O(\Delta t^3). \quad (5.11)$$

Deste modo, a eq. (5.7) será modificada para a seguinte expressão:

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^{k+1}(\mathbf{r}). \quad (5.12)$$

As eqs. (5.8) e (5.12) formarão o par das relações de recorrência semi-implícitas para se estudar um sistema bidimensional. O nome semi-implícito surge do fato de que os operadores diferenciais situados no argumento das exponenciais estão situados no instante t_{k+1} , mas, através da expansão em série de Taylor de $F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r})$, as equações finais apresentam as mesmas características que as das eqs (5.1) e (5.2), que são as relações de recorrência explícitas. Para os sistemas simulados e aqui apresentados, estas relações apresentaram uma boa estabilidade numérica.

- **Caso 2 - Relações de recorrência implícitas-explícitas-alternadas:** Estas relações de recorrência são ainda mais estáveis do que as relações anteriores, porém, como esperado, requerem um maior tempo de CPU para serem obtidas. São, entretanto, recomendadas para sistemas onde a razão entre as impedâncias acústicas entre os meios é muito grande (da ordem de 1000). Para obtermos estas relações, voltemos a eq. (5.7). Utilizando a substituição da eq. (5.8) na eq. (5.9), a quantidade $F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r})$ pode ser reescrita como

$$F_{\Phi}^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi^k(\mathbf{r}) - \frac{3}{2}\Delta t \Lambda^{k+1}(\mathbf{r}), \quad (5.13)$$

de modo que

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \left\{ \Phi^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{4} \Delta t \left[\Lambda^k(\mathbf{r}) + 3\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (5.14)$$

Certamente, podemos agrupar todos os termos contendo $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$, de um mesmo lado da equação. Nestes termos, aparecem somente as derivadas espaciais, aplicadas em $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$, o que nos permite escrever uma equação implícita, na forma:

$$\left[1 + \frac{3}{4} \Delta t^2 \Gamma(\mathbf{r}) \right] \times \Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \check{D}^k(\mathbf{r}), \quad (5.15)$$

em que:

$$\check{D}^k(\mathbf{r}) = \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t \Gamma(\mathbf{r}) \times \left[\Phi^k(\mathbf{r}) - \frac{1}{4} \Delta t \Lambda^k(\mathbf{r}) \right]. \quad (5.16)$$

O operador $\Gamma(\mathbf{r})$ apresenta derivadas nas variáveis espaciais \mathbf{x} e \mathbf{y} . Adotamos, desta forma, o seguinte procedimento para se resolver a eq. (5.15): i) Para o primeiro passo temporal, o termo contendo as derivadas espaciais em relação a \mathbf{x} serão escritas no instante de tempo t_{k+1} , enquanto que os termos com as derivadas espaciais em \mathbf{y} serão escritos no instante de tempo t_k . ii) Para o passo temporal seguinte, invertemos o processo, efetuando a aproximação na outra variável. Após uma longa manipulação algébrica, obtém-se:

$$\Lambda^{2k+2}(\mathbf{r}) + \frac{3}{4} \Delta t^2 \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{x}} \left[\rho^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{x}} \Lambda^{2k+2}(\mathbf{r}) \right] = \check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}(\mathbf{r}), \quad (5.17)$$

$$\Lambda^{2k+3}(\mathbf{r}) + \frac{3}{4} \Delta t^2 \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{y}} \left[\rho^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{y}} \Lambda^{2k+3}(\mathbf{r}) \right] = \check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}(\mathbf{r}), \quad (5.18)$$

para $k = 0, 1, 2, 3, \dots$. As quantidades $\check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}(\mathbf{r})$ e $\check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}(\mathbf{r})$ são dadas por:

$$\check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}(\mathbf{r}) = \check{D}^{2k+1}(\mathbf{r}) - \frac{3}{4} \Delta t^2 \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{y}} \left[\rho^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{y}} \Lambda^{2k+1}(\mathbf{r}) \right], \quad (5.19)$$

$$\check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}(\mathbf{r}) = \check{D}^{2k+2}(\mathbf{r}) - \frac{3}{4} \Delta t^2 \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{x}} \left[\rho^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{x}} \Lambda^{2k+2}(\mathbf{r}) \right]. \quad (5.20)$$

Este é o algoritmo do Split-Operator implícito-explicito-alternado (SOIEA) bidimensional. Nos instantes ímpares, a relação de recorrência é implícita na direção \mathbf{x} e explícita na direção \mathbf{y} ; nos instantes pares, a relação de recorrência é explícita na direção \mathbf{x} e implícita na direção \mathbf{y} . Efetuando a aproximação de primeiros vizinhos, temos que, na eq. (5.17) aparecerão três valores de $\Lambda(\mathbf{r}, t)$, no instante de tempo t_{2k+2} . Analogamente, para a eq.

(5.18), no instante t_{2k+3} . Em resumo, termos:

$$\begin{aligned} \text{passos pares} \quad & ax_{i,j} \Lambda_{i+1,j}^{2k+2} + bx_{i,j} \Lambda_{i,j}^{2k+2} + cx_{i,j} \Lambda_{i-1,j}^{2k+2} = \check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}{}_{i,j} \\ \text{passos ímpares} \quad & ay_{i,j} \Lambda_{i,j+1}^{2k+3} + by_{i,j} \Lambda_{i,j}^{2k+3} + cy_{i,j} \Lambda_{i,j-1}^{2k+3} = \check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}{}_{i,j} \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde

$$ax_{i,j} = \frac{3\Delta t^2}{8\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i+1,j}} \right), \quad (5.22)$$

$$bx_{i,j} = 1 - \frac{3\Delta t^2}{8\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(2 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i+1,j}} + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i-1,j}} \right), \quad (5.23)$$

$$cx_{i,j} = \frac{3\Delta t^2}{8\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i-1,j}} \right), \quad (5.24)$$

$$ay_{i,j} = \frac{3\Delta t^2}{8\Delta y^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j+1}} \right), \quad (5.25)$$

$$by_{i,j} = 1 - \frac{3\Delta t^2}{8\Delta y^2} c_{i,j}^2 \left(2 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j+1}} + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j-1}} \right), \quad (5.26)$$

$$cy_{i,j} = \frac{3\Delta t^2}{8\Delta y^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j-1}} \right). \quad (5.27)$$

Devemos ressaltar que as quantidades $\check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}{}_{i,j}$ e $\check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}{}_{i,j}$ são conhecidas em todos os pontos do espaço, e apresentam as seguintes expressões numéricas:

$$\check{D}_{\mathbf{x}}^{2k+1}{}_{i,j} = \check{D}_{i,j}^{2k+1} - \left[ay_{i,j} \Lambda_{i,j+1}^{2k+1} + (by_{i,j} - 1) \Lambda_{i,j}^{2k+1} + cy_{i,j} \Lambda_{i,j-1}^{2k+1} \right], \quad (5.28)$$

$$\check{D}_{\mathbf{y}}^{2k+2}{}_{i,j} = \check{D}_{i,j}^{2k+2} - \left[ax_{i,j} \Lambda_{i+1,j}^{2k+2} + (bx_{i,j} - 1) \Lambda_{i,j}^{2k+2} + cx_{i,j} \Lambda_{i-1,j}^{2k+2} \right]. \quad (5.29)$$

e utilizando a expressão para $F_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ dada na eq. (5.9), escrevemos a expressão para $\check{D}_{i,j}^{2k+1}$ como

$$\begin{aligned} \check{D}_{i,j}^{2k+1} = \Lambda_{i,j}^{2k+1} & + \widetilde{a}x_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i+1,j} - \widetilde{b}x_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i,j} + \widetilde{c}x_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i-1,j} \\ & + \widetilde{a}y_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i,j+1} - \widetilde{b}y_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i,j} + \widetilde{c}y_{i,j} F_{\Phi}^{2k+1}{}_{i,j-1} \end{aligned} \quad (5.30)$$

onde

$$\widetilde{a}x_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i+1,j}} \right), \quad (5.31)$$

$$\widetilde{b}x_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(2 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i+1,j}} + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i-1,j}} \right), \quad (5.32)$$

$$\widetilde{cx}_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i-1,j}} \right), \quad (5.33)$$

$$\widetilde{ay}_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j+1}} \right), \quad (5.34)$$

$$\widetilde{by}_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(2 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j+1}} + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j-1}} \right), \quad (5.35)$$

$$\widetilde{cy}_{i,j} = \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left(1 + \frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i,j-1}} \right). \quad (5.36)$$

Os termos referentes à parte implícita devem ser resolvidos, através do algoritmo de Thomas para uma matriz tridiagonal, cujo detalhes de resolução são fornecidos no apêndice F.

5.2 Tratamento das interfaces

Passemos agora a apresentar o tratamento que deve ser feito nas interfaces, no estudo dos casos bidimensionais. Para os valores de impedâncias acústicas utilizados em nossas simulações, os dois algoritmos propostos na seção anterior não diferem significativamente de valores, de modo que restringiremos nossa discussão aqui apenas ao algoritmo semi-implícito bidimensional, dados pelas eqs. (5.8) e (5.12). Adotamos uma malha uniforme e homogênea de pontos, que pode ser vista na figura 5-1. Para simplicidade, usaremos uma malha quadrada, ou seja, os incrementos espaciais entre pontos vizinhos nas variáveis \mathbf{x} e \mathbf{y} são iguais:

$$\Delta \mathbf{x} = \Delta \mathbf{y}. \quad (5.37)$$

Outros casos podem ser implementados de forma idêntica, com os incrementos diferentes. Aqui, temos N_x pontos no eixo \mathbf{x} e N_y pontos em \mathbf{y} . Deste modo, a área total do sistema pode ser obtida, multiplicando-se $N_x N_y \Delta x^2$. Para um ponto de coordenadas (x_i, y_i) , os índices variam na forma: $i = 1, 2, \dots, N_x$, e $j = 1, 2, \dots, N_y$.

Em todos estes sistemas que estudaremos, ocorrerá a seguinte situação: Uma onda de forma gaussiana bidimensional se encontra inicialmente situada dentro de um meio externo, cujo material apresenta velocidade c_1 e densidade ρ_1 , constantes. Nesta região teremos o operador $\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c_1^2 [\partial_x^2 + \partial_y^2]$. A onda sofrerá uma divisão igualitária e após certo tempo, dois pacotes distintos poderão ser vistos, caminhando em direções opostas. Uma parte da onda atingirá um ou mais objetos no percurso, que apresentam velocidade c_2 e densidade ρ_2 , também constantes. Na região interior de cada objeto temos outro operador $\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = c_2^2 [\partial_x^2 + \partial_y^2]$. Tanto no meio externo, quanto para o(s) interior(es) dos objetos, a densidade não aparece nas equações. Seu efeito apenas será relevante nos pontos das interfaces, onde existirão as mudanças de densidade.

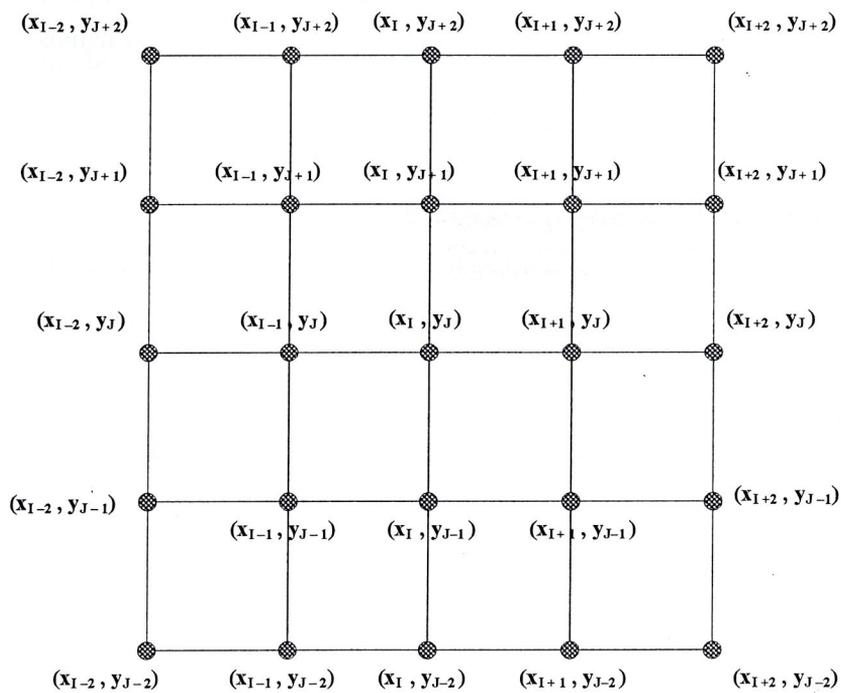


Figura 5-1: Malha homogênea bidimensional

A forma particular do operador $\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ faz com que a eq. (5.12) seja dada por:

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t c_1^2 [\partial_{\mathbf{x}}^2 \Phi^k(\mathbf{r}) + \partial_{\mathbf{y}}^2 \Phi^k(\mathbf{r})], & \text{região externa,} \\ \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t \kappa^{-1} \partial_{\mathbf{x}} [\rho^{-1} \partial_{\mathbf{x}} \Phi^k(\mathbf{r})] & \text{interfaces,} \\ \quad + \Delta t \kappa^{-1} \partial_{\mathbf{y}} [\rho^{-1} \partial_{\mathbf{y}} \Phi^k(\mathbf{r})], & \\ \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t c_2^2 [\partial_{\mathbf{x}}^2 \Phi^k(\mathbf{r}) + \partial_{\mathbf{y}}^2 \Phi^k(\mathbf{r})], & \text{região interna.} \end{cases} \quad (5.38)$$

Passamos agora a mostrar as formas das relações de recorrência discretizadas. Utilizando novamente a aproximação de primeiros vizinhos, as expressões para as derivadas espaciais de segunda ordem, em \mathbf{x} e em \mathbf{y} , são calculadas através das definições usuais:

$$\partial_{\mathbf{x}}^2 \Phi_{i,j}^k = \frac{\Phi_{i+1,j}^k - 2\Phi_{i,j}^k + \Phi_{i-1,j}^k}{\Delta \mathbf{x}^2}, \quad (5.39)$$

$$\partial_{\mathbf{y}}^2 \Phi_{i,j}^k = \frac{\Phi_{i,j+1}^k - 2\Phi_{i,j}^k + \Phi_{i,j-1}^k}{\Delta \mathbf{x}^2}. \quad (5.40)$$

Conforme pode ser visto na eq. (5.12), para os termos de interfaces, será necessário primeiramente calcular as derivadas espaciais de primeira ordem em \mathbf{x} e em \mathbf{y} , para a pressão. Entretanto, ao aplicarmos novamente a derivada espacial, o inverso da densidade aparecerá multiplicando tanto $\partial_{\mathbf{x}} \Phi_{i,j}^k$, como $\partial_{\mathbf{y}} \Phi_{i,j}^k$. Esta mistura de valores de funções em regiões distintas obrigará a definição de uma média aritmética do inverso da densidade para uma passagem suave através dos pontos da interface,

$$\frac{1}{\rho_{i \pm \frac{1}{2},j}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i \pm 1,j}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right), \quad (5.41)$$

$$\frac{1}{\rho_{i,j \pm \frac{1}{2}}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i,j \pm 1}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right). \quad (5.42)$$

Desta forma, temos que

$$\partial_{\mathbf{x}} \left[\frac{1}{\rho_{i,j}} \partial_{\mathbf{x}} \Phi_{i,j}^k \right] = \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} \frac{\Phi_{i+1,j}^k - \Phi_{i,j}^k}{\Delta \mathbf{x}^2} - \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}} \frac{\Phi_{i,j}^k - \Phi_{i-1,j}^k}{\Delta \mathbf{x}^2}, \quad (5.43)$$

$$\partial_{\mathbf{y}} \left[\frac{1}{\rho_{i,j}} \partial_{\mathbf{y}} \Phi_{i,j}^k \right] = \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}} \frac{\Phi_{i,j+1}^k - \Phi_{i,j}^k}{\Delta \mathbf{x}^2} - \frac{1}{\rho_{i,j-\frac{1}{2}}} \frac{\Phi_{i,j}^k - \Phi_{i,j-1}^k}{\Delta \mathbf{x}^2}, \quad (5.44)$$

Utilizando estas aproximações para as derivadas, a equação para $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$, que será utilizada

nas interfaces, toma a forma

$$\begin{aligned}\Lambda_{i,j}^{k+1} = \Lambda_{i,j}^k & + \widetilde{ax}_{i,j}\Phi_{i+1,j}^k - \widetilde{bx}_{i,j}\Phi_{i,j}^k + \widetilde{cx}_{i,j}\Phi_{i-1,j}^k \\ & + \widetilde{ay}_{i,j}\Phi_{i,j+1}^k - \widetilde{by}_{i,j}\Phi_{i,j}^k + \widetilde{cy}_{i,j}\Phi_{i,j-1}^k,\end{aligned}\quad (5.45)$$

sendo $\widetilde{ax}_{i,j} - \widetilde{cy}_{i,j}$, dados pelas eqs. (5.31)–(5.36). Nas regiões onde a densidade nos pontos vizinhos apresentar os mesmos valores, esta última equação pode ser reduzida a:

$$\Lambda_{i,j}^{k+1} = \Lambda_{i,j}^k + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} c_{i,j}^2 \left[\Phi_{i+1,j}^k + \Phi_{i-1,j}^k + \Phi_{i,j+1}^k + \Phi_{i,j-1}^k - 4\Phi_{i,j}^k \right]. \quad (5.46)$$

Conhecido o valor de $\Lambda_{i,j}^{k+1}$, encontramos facilmente o valor de $\Phi_{i,j}^{k+1}$, utilizando:

$$\Phi_{i,j}^{k+1} = \Phi_{i,j}^k - \Delta t \Lambda_{i,j}^{k+1}. \quad (5.47)$$

5.3 Exemplos de sistemas bidimensionais

Para estudar a estabilidade do método, foram propostos três problemas: i) Espalhamento de uma onda por um cilindro não rígido; ii) Propagação de uma onda num sistema periódico de cilindros rígidos; iii) Propagação de uma onda por uma guia retangular. Os resultados e a análise dos resultados estão apresentados no ítem em seqüência.

5.3.1 Disco não-rígido

Um sistema é dito não-homogêneo, caso seja composto por mais de um material. Quando estes materiais apresentam parâmetros intrínsecos muito diferentes entre si, a propagação de um pacote de ondas neste sistema é bastante diferente do caso homogêneo. Nestes sistemas, um pacote de onda sofre espalhamento, modificando sua forma. No caso acústico, a parte transmitida de um meio para outro varia de acordo com a sua geometria e também das diferenças entre as densidades e velocidades de propagação da onda em cada meio.

O sistema que vamos estudar a seguir tem um centro espalhador na forma de um disco de raio \mathbf{R}_c , centrado no meio do sistema ($\mathbf{x}_0 = \mathbf{N}_x/2, \mathbf{y}_0 = \mathbf{N}_y/2$). O cilindro (ρ_1, c_1) e o meio externo (ρ_2, c_2) são formados por materias cujas diferenças nas densidades e nas velocidades respectivamente constantes, apresentam as seguintes características:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = 50 \quad \text{e} \quad \frac{c_1}{c_2} = 1. \quad (5.48)$$

com $c_1 = 1000$ m/s. Neste sistema usaremos um número de pontos (discretização) $N_x = N_y = 800$, o que equivale à $0,0125$ cm e para a evolução temporal um incremento de $\Delta t = 1,8 \times 10^{-8}$ s. Além disso, as bordas em y apresentam condições periódicas de contorno, enquanto que as em x , serão tratadas como paredes rígidas, nas quais se observará reflexão total das ondas que as atingem. O cilindro tem um raio de 50 mm (sistema total é 100×100 mm). As razões de impedâncias e velocidades são da ordem de sistemas conhecidos como cristais sônicos [7]. A razão 1 para as velocidades foi escolhida para conveniência dos cálculos e também porque nos sistemas estudados esta razão é menor que uma ordem de grandeza. Os resultados obtidos para razões diferentes apresentam as mesmas propriedades.

A forma inicial da pressão é representada por uma gaussiana em y com invariância ao longo de x . A derivada da pressão foi tomada como sendo nula, o que faz com que a onda se divida em duas ondas simétricas, porém com velocidades opostas. A onda que caminha em direção da borda em x será absorvida para que não atrapalhe na análise da onda espalhada pelo cilindro.

Os gráficos referentes às figuras 5-2 a 5-7 representam as curvas de nível bidimensionais para a pressão, sendo que sua magnitude é dada pelo nível de cores indicados ao lado da curva. O tempo de propagação correspondente ao primeiro gráfico é de $\Delta t = 4,5 \times 10^{-6}$ s, sendo que os outros são instantes subsequentes separados de $1,8 \times 10^{-5}$ s. O círculo no centro da figura corresponde a uma representação do disco.

As condições iniciais foram escolhidas de tal forma que o comprimento de onda médio do pulso de onda acústico fosse próximo do raio do disco. Neste caso, o espalhamento deve ser isotrópico. A seção de choque foi medida como função do ângulo, a partir da coleta da pressão em vários pontos, e foi verificado uma dispersão de 10% no valor medido como função do ângulo.

No instante $4,5 \times 10^{-6}$ s, o pacote de ondas gaussiano está prestes a incidir no disco. Uma vez na superfície que delimita o disco do meio externo, o pacote de ondas sofre espalhamento parcial. A parte espalhada apresenta a mesma fase do pacote de ondas incidente pois a impedância do disco é menor do que a do meio externo. Sendo o disco não-rígido, vemos, a partir de $2,26 \times 10^{-5}$ s, o pacote de ondas penetrar no disco. Uma vez em seu interior, este pacote começa a oscilar e a emitir ondas circulares com fases opostas. O centro destas ondas entretanto, não são coincidentes. Seus pontos de centro são as extremidades de entrada e de saída do pacote de ondas incidente.

No instante $4,06 \times 10^{-5}$ s, o pacote de ondas incidente deixa a região do disco. Existe uma região de sombra provocada pelo espalhamento do pacote incidente. O pacote de ondas dentro do disco sofre reflexão com inversão de fase. A região de sombra é gradualmente minimizada pela difração sofrida pelo pacote de ondas incidente. Vemos que, no instante $9,46 \times 10^{-5}$ s, a

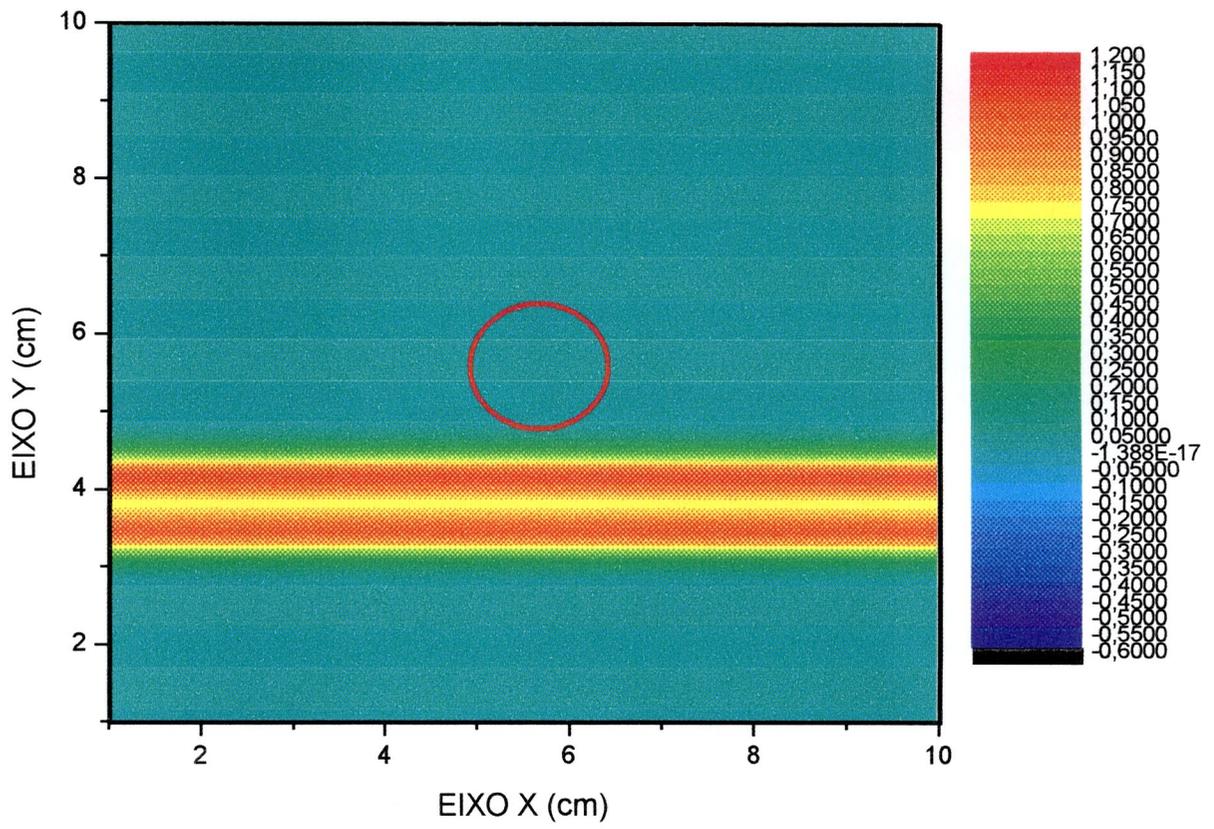


Figura 5-2: Curvas de nível da pressão no sistema contendo um disco não-rígido. No instante 4.5×10^{-6} s, o pacote de ondas gaussiano esta prestes a atingir a superfície que delimita o disco.

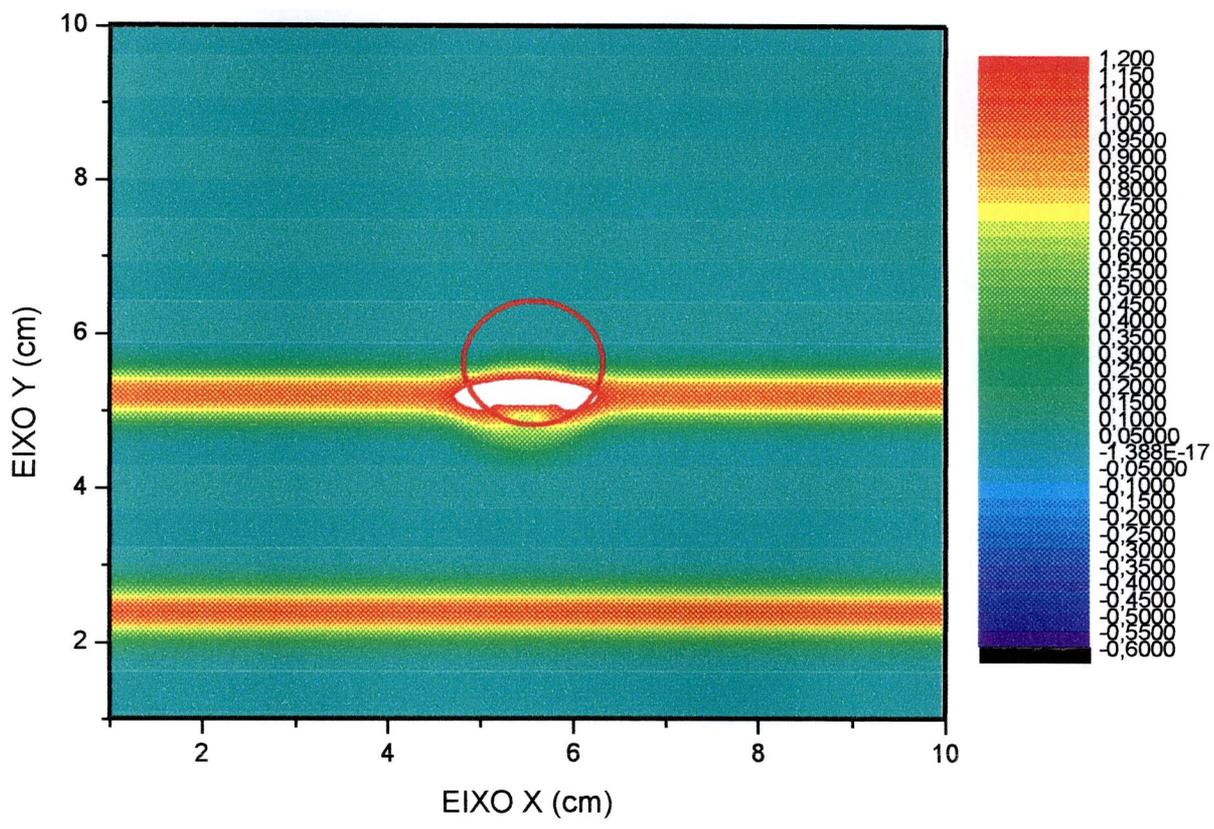


Figura 5-3: Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante 2.26×10^{-6} s. O pacote de ondas está sendo parcialmente transmitido para dentro do disco.

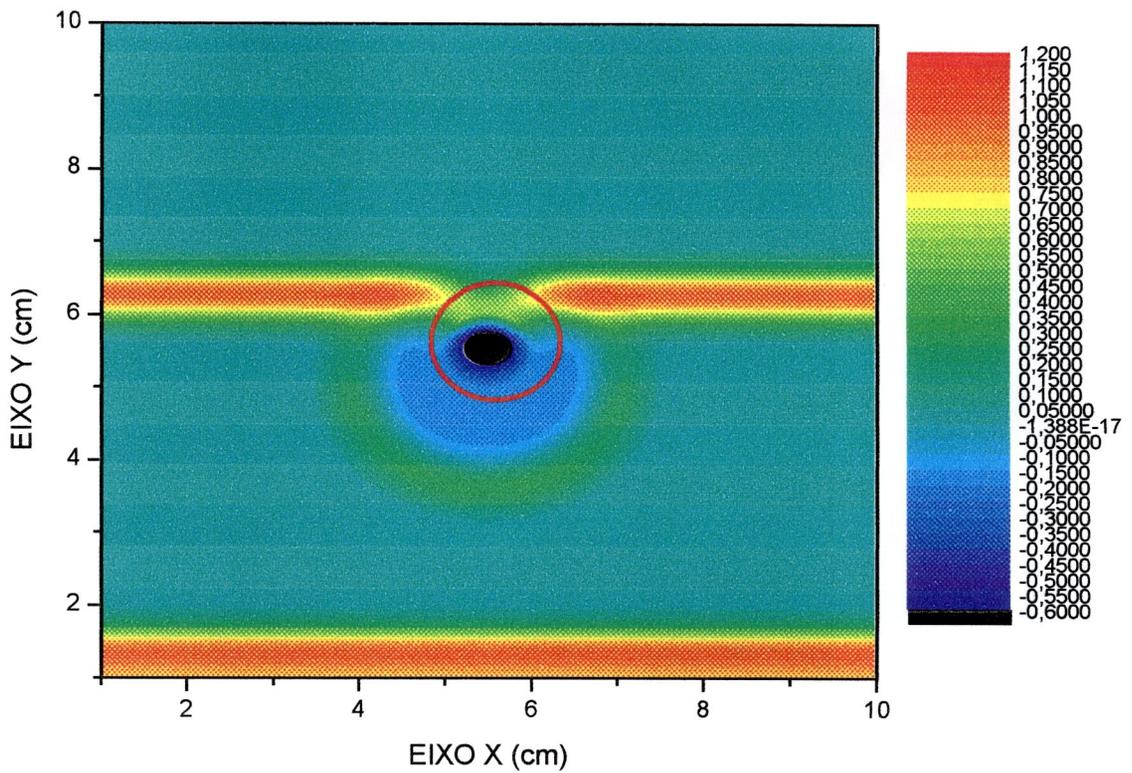


Figura 5-4: No instante 4.06×10^{-6} s, vemos as curvas de nível da pressão espalhada pelo disco. Existe uma região de sombra provocada pela presença do disco. O pacote de ondas que está dentro do disco sofre reflexão com inversão de fase, pois a impedância acústica externa é maior do que a interna.

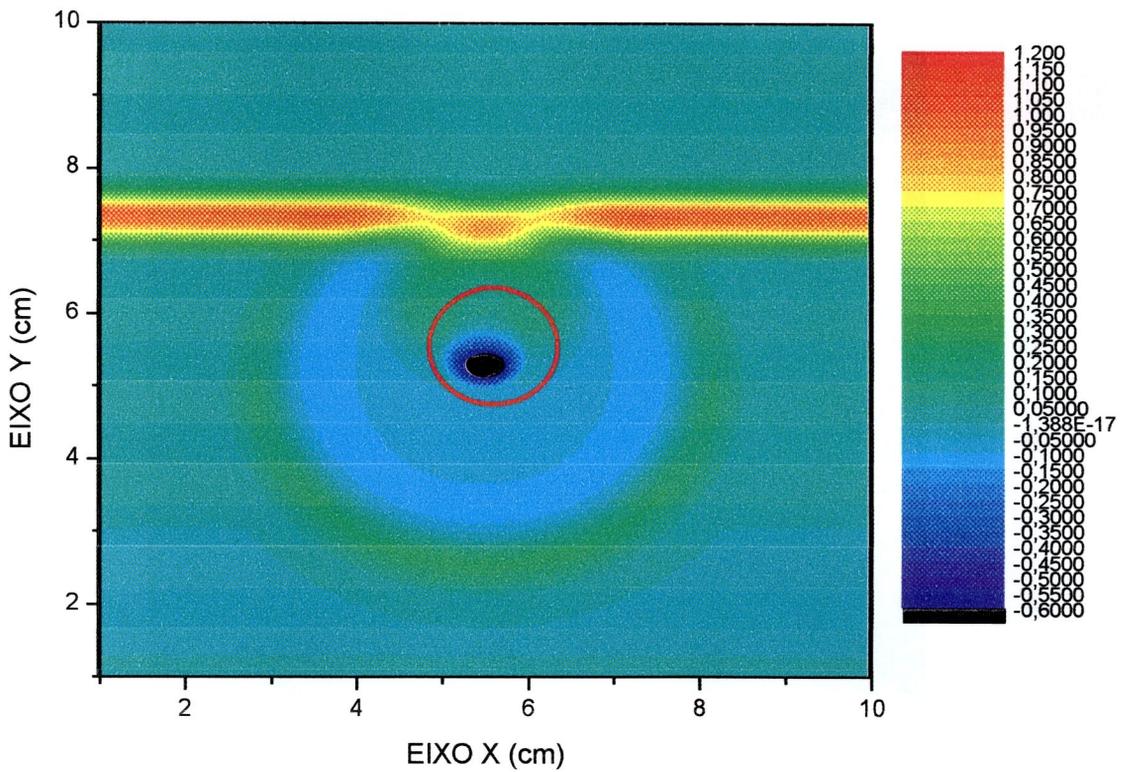


Figura 5-5: Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante 5.86×10^{-6} s. O pacote de ondas gaussiano está tentando se recompor, na região de sombras. O pacote dentro do disco movimentava-se na direção oposta ao pacote de ondas incidente.

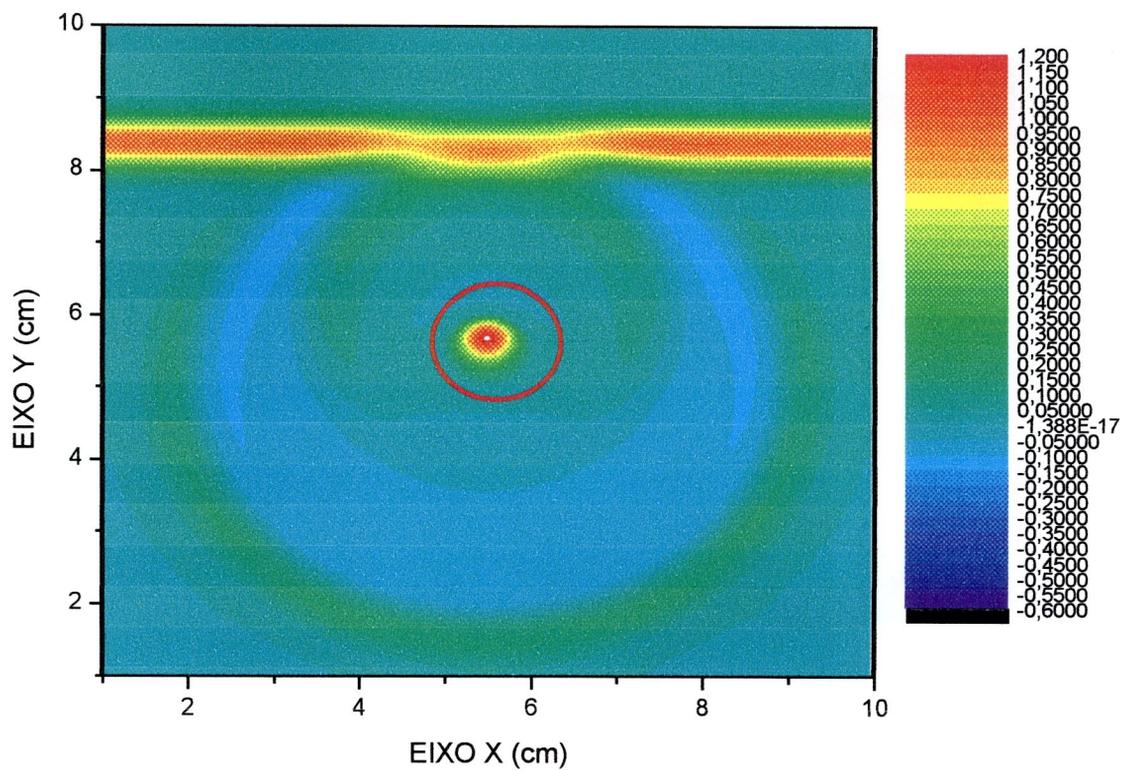


Figura 5-6: Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco em 7.66×10^{-5} s. O pacote que está dentro do disco sofre nova reflexão, mudando novamente sua fase e sua direção de movimento.

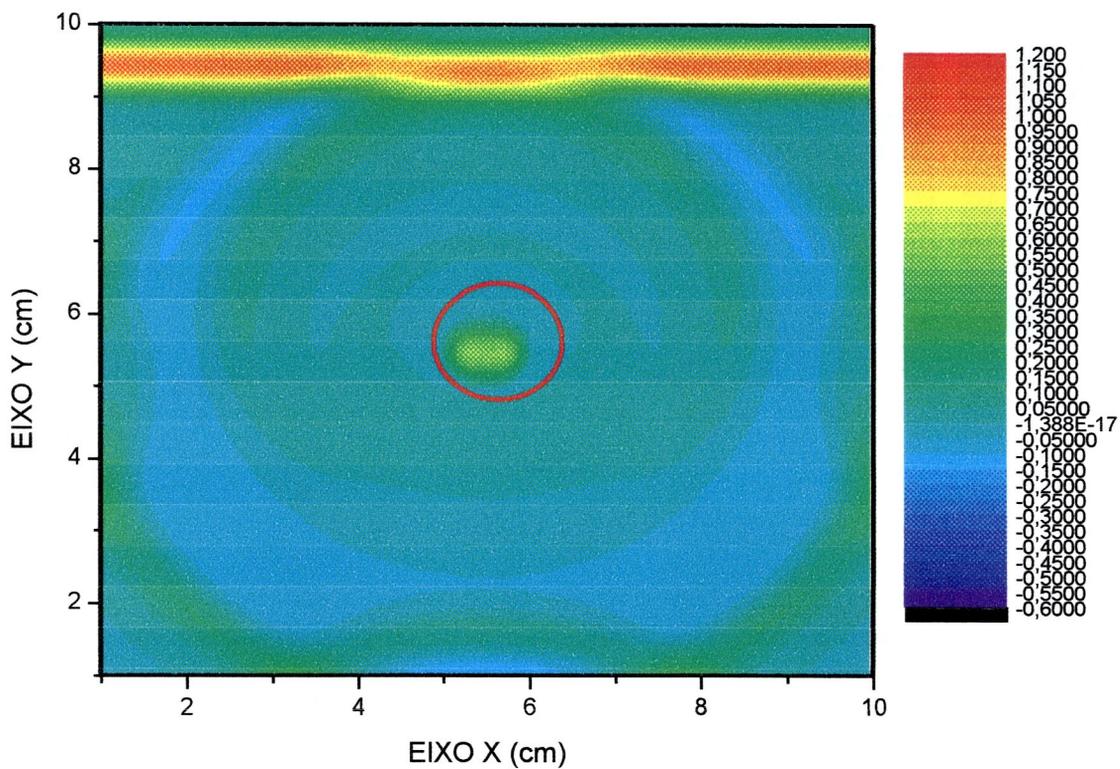


Figura 5-7: Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco, no instante 9.46×10^{-5} s. O pacote de ondas dentro do cilindro começa a perder a intensidade em virtude de irradiação.

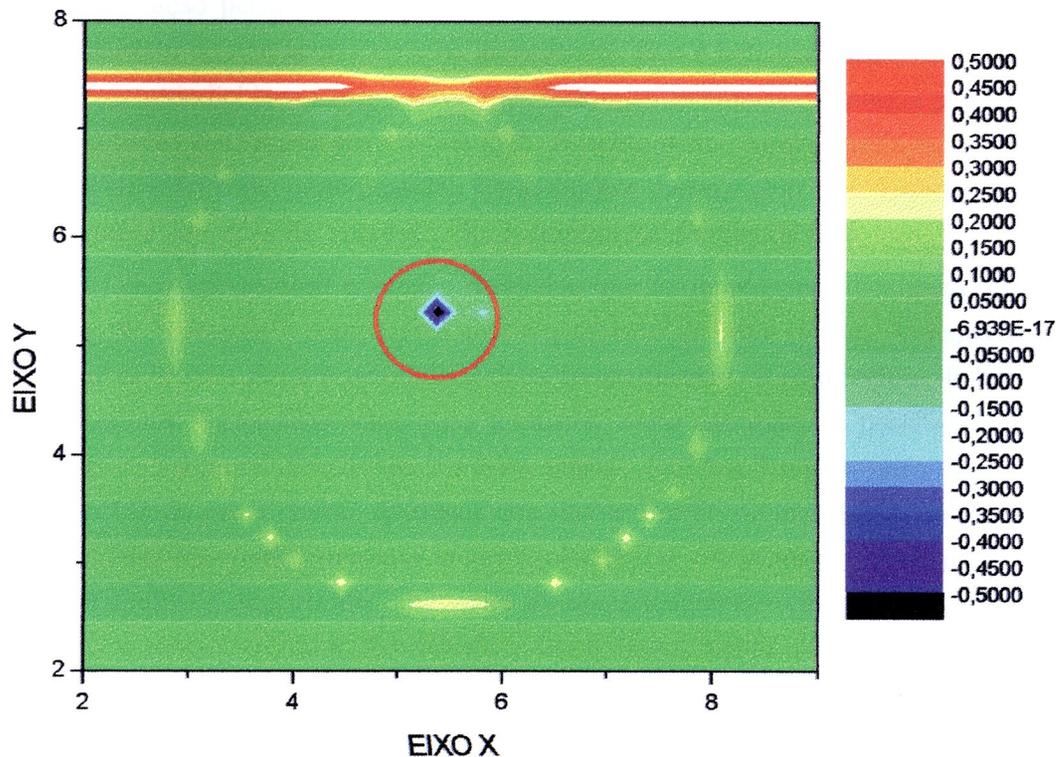


Figura 5-8: Curvas de nível da pressão espalhada pelo disco no instante 9.46×10^{-5} s. Neste caso o pulso tem um espectro maior de frequências, pois o pacote de ondas é mais estreito. Observa-se um espalhamento anisotrópico do pacote de ondas incidente no disco.

região de sombras praticamente não existe mais. No instante 7.66×10^{-5} s, o pacote dentro do cilindro sofre uma nova inversão de fase, recuperando sua fase e sentido de movimento original. Em virtude da irradiação, o pacote de ondas vai perdendo sua intensidade, como evidenciado no instante 9.46×10^{-5} s.

Na figura 5-8 é mostrado um perfil de pressão equivalente ao tempo de propagação da figura 5-7, no mesmo sistema, porém para um pacote inicial com um espectro maior de frequências (pacote mais localizado espacialmente). Nesta condição, verifica-se que o espalhamento não é mais isotrópico, ou seja, a onda produz a oscilação de outros modos do disco, com simetria não esférica.

5.3.2 Cristal acústico bidimensional

A propagação de um pacote de ondas através de um sistema não-homogêneo, cuja estrutura apresenta uma modulação periódica da ordem do comprimento de onda médio do pacote, é profundamente diferente do que ocorre no caso homogêneo. Isto é bem conhecido em física do estado sólido, onde a periodicidade é responsável pela formação de bandas de energia permitidas e proibidas para estados eletrônicos em cristais [27]. Recentemente, houve muito interesse na propagação da luz em estruturas periódicas[28], formadas por meios dielétricos. Estes sistemas, que são descritos pelas equações de Maxwell, são denominados de cristais fotônicos.

Os cristais fotônicos apresentam a função dielétrica que se repete periodicamente no espaço, cujo período de repetição é comparável ao comprimento de onda da luz. O aspecto de maior interesse nestes cristais são a possibilidade de se construir cristais com regiões de bandas de frequências proibidas, conhecidos como *gaps* fotônicos, onde não existe a possibilidade de propagação da luz em nenhuma direção dentro deste cristal. Isto implica que, para uma onda eletromagnética incidindo neste cristal, qualquer que seja a direção de incidência, ela será totalmente refletida, caso esta onda apresente uma frequência que esteja na região de *gap*. Este fenômeno pode ter muitas e importantes aplicações no aperfeiçoamento ou mesmo desenvolvimento de dispositivos opto-eletrônicos. Em relação a física básica, temos que pequenos defeitos podem ser introduzidos no cristal fotônico, a fim de se estudar estados de superfície ou estados localizados dentro do cristal[29].

A formação de bandas em estruturas periódicas também se aplica a propagação de ondas elásticas. Sistemas que apresentam materiais com coeficientes elásticos periódicos no espaço são conhecidos como cristais fonônicos ou acústicos, e apresentam propriedades e aplicações semelhantes às dos cristais fotônicos. Em nosso caso particular, os cristais fonônicos são sistemas formados por uma junção de dois materiais distintos, de forma que os parâmetros intrínsecos como a densidade, velocidade de propagação do som em cada material, impedância acústica característica, etc, variem periodicamente no espaço. Assim como no caso dos cristais fotônicos, existe um crescente interesse nos cristais acústicos, principalmente aqueles que apresentam a formação de bandas proibidas. Uma aplicação tecnológica possível são a construção de filtros e janelas acústicas.

Neste ítem, fizemos uma simulação numérica de um sistema baseado no trabalho experimental realizado por J. Vasseur e colaboradores [7]. O sistema é composto por uma rede triangular de cilindros imersos num meio homogêneo. Neste caso os cilindros são rígidos e atuam como centros espalhadores. No nosso caso o sistema todo corresponde a um quadrado de 10×10 cm (800×800 pontos de discretização espacial), sendo que cada cilindro tem um diâmetro de 4 mm e o parâmetro de rede utilizado foi de 6 mm, resultando num fator de empacotamento

(FP) para a rede de 0,4. O cristal todo tem o tamanho aproximado de 10×3 cm e conta com cerca de 70 cilindros. As condições iniciais foram as mesmas utilizadas no item anterior, exceto pelo fato que o pacote foi feito de maneira a ter um espectro que vai de 0–350 kHz. As razão de densidade foi escolhida como sendo a inversa do caso anterior, ou seja, neste caso o cilindro é rígido. A razão para as velocidades dentro e fora de cada cilindro é 1.

As figuras 5.8 e 5.9 representam dois instantes do pulso propagando-se dentro do cristal.

É possível observar pelos gráficos a formação de modos de oscilação devido os centros espalhadores. Nota-se também que devido à razão entre as densidades, que a pressão dentro dos cilindros é praticamente nula, ou seja, a escolha da razão 1 para as velocidades deve ter pouca influência nos resultados obtidos. Para esta diferença de densidades, o método é estável para intervalos de tempo $\Delta t = 1.10^{-6}$ s.

Para se analisar o espectro de frequência da onda transmitida, a pressão foi coletada antes e após o cristal (20 mm após o seu início/término e no eixo de simetria $x = 5$ cm), e a análise foi feita utilizando o mesmo procedimento do capítulo 3. O espectro de frequência para o sinal transmitido, obtido através da transformada de Fourier da pressão, esta representado na figura 5.10, juntamente com outros dois espectros para diferentes fatores de empacotamento. Neste caso foi feita uma normalização do sinal com relação ao espectro de frequências do pacote propagando-se no mesmo sistema sem o cristal.

Observa-se nos três espectros o presença de bandas e regiões proibidas para certos intervalos de frequência. Para um fator de empacotamento de 0,4, o resultado obtido tem um comportamento muito parecido com o de Vasseur[7]. Percebe-se claramente o deslocamento para altas frequências da banda permitida com o aumento de FP, como era de se esperar, o sistema esta ficando mais denso (centros espalhadores). Para que se possa atingir valores de frequências mais altos é necessário aumentar a discretização utilizada para manter a estabilidade numérica.

5.3.3 Propagação de um pacote de onda numa guia retangular

Considere um sistema composto por um duto bidimensional retangular, com 1,2 cm de espessura na direção x e 10 cm de comprimento na direção y . Este duto apresenta paredes perfeitamente rígidas, de modo que uma onda acústica que movimenta em seu interior, não atravessa suas paredes. No intervalo 4,9 e 6,1 cm na direção y , este duto se encontra conectado a duas cavidades retangulares e simétricas entre si, perpendiculares ao duto, de 1,2 cm de espessura na direção y e 4,9 cm de comprimento na direção x . A junção destas cavidades apresentam dimensões comparáveis ao duto, de forma que o sistema pode ser considerado como um cruzamento de duas guias bimensionais retangulares, perpendiculares entre si.

O sistema tem dimensões de 10×10 cm e dentro do duto e das cavidades existe somente um

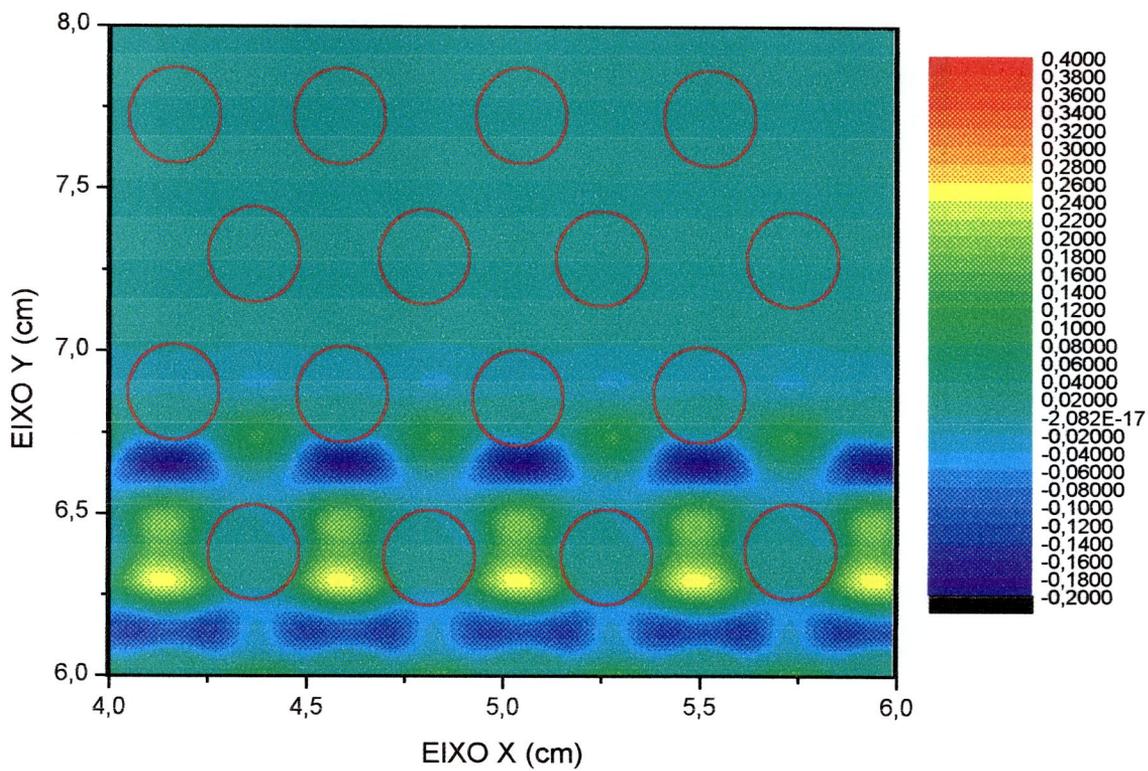


Figura 5-9: Perfil de intensidade da propagando-se através do cristal para um tempo de $1,8 \times 10^{-5} s$

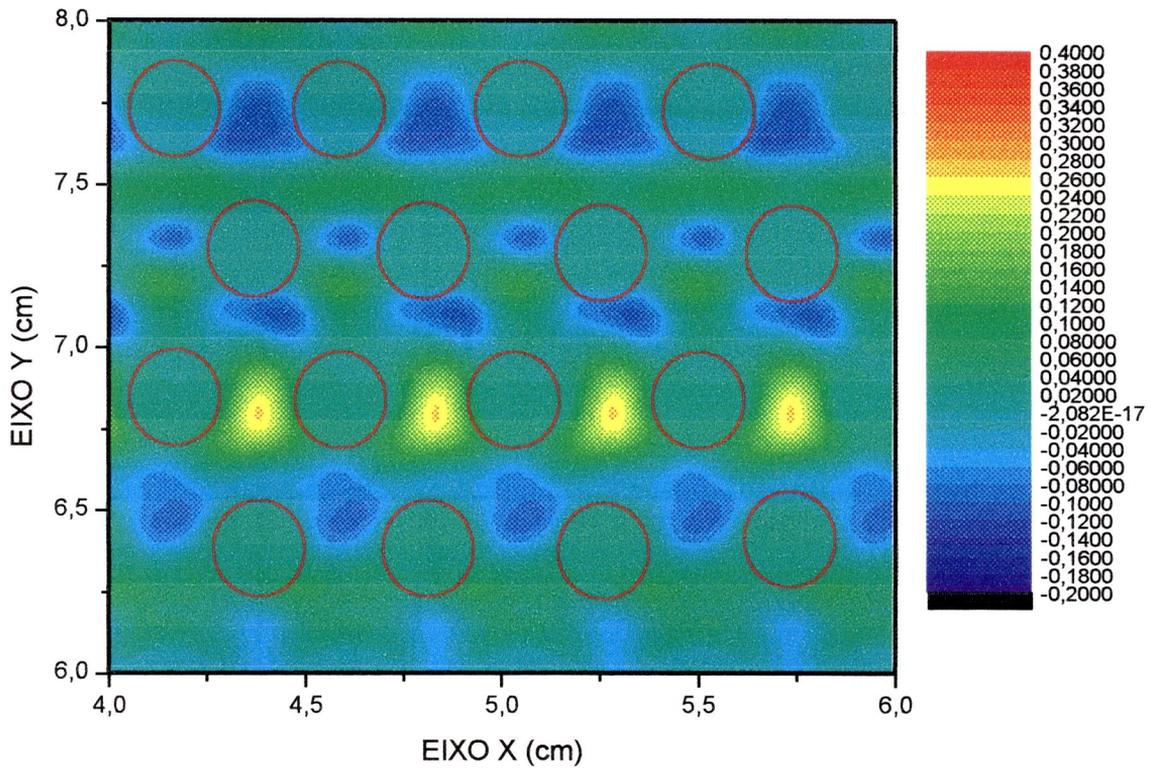


Figura 5-10: Perfil de intensidade da pressão para o pulso propagando-se através do cristal para um tempo de $2,5 \times 10^{-5} s$

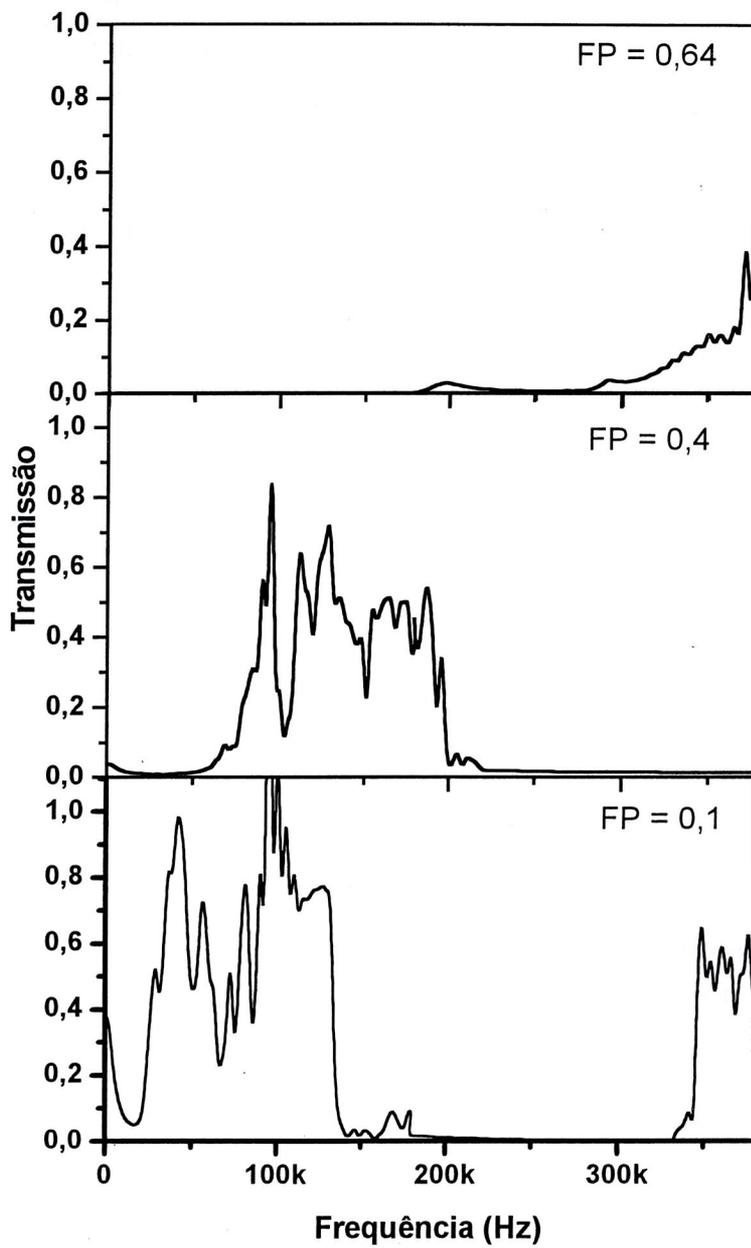


Figura 5-11: Comparação entre os espectros para três cristais com diferentes fatores de empacotamento (FP). Neste caso variou-se somente o diâmetro dos cilindros.

meio homogêneo, com densidade ρ igual 1 kg/m^2 e velocidade de propagação do som no meio de 1000 m/s . No instante inicial, um pacote de ondas de pressão apresenta a forma de uma gaussiana na direção y , centrada no ponto $3,9 \text{ cm}$. O canal tem dimensões que são comparáveis com o comprimento de onda médio do pulso, que no nosso caso é de 1 cm . Uma vez que a derivada temporal neste instante é igual a zero em todos os pontos do sistema, o pacote de ondas sofrerá uma partição igualitária na direção y . Um destes pacotes de ondas move-se em direção a região das cavidades, enquanto que a outra se afasta.

A seqüência de figuras 5.12 a 5.18 indicam instantes de tempo separados de $2 \times 10^{-5} \text{ s}$ de propagação do pulso. No instante $4 \times 10^{-5} \text{ s}$, é possível ver a formação de modos de propagação característicos na guia perpendicular devido à difração do pacote ocasionada pela mudança das condições de contorno. As “quinas” funcionam como centro espalhadores, provocando o surgimento de ondas esféricas que propagam pelo canal perpendicular. No instante 6×10^{-5} e $8 \times 10^{-5} \text{ s}$, a onda se espalha simetricamente para dentro das cavidades, diminuindo de intensidade à medida que a onda penetra em seu interior. É interessante notar que parte da onda tem um retroespalhamento, o que configura que o sistema tem uma impedância acústica que depende das dimensões das espessuras do canal e do canal + cavidades.

No instante $1 \times 10^{-4} \text{ s}$, uma parte do pacote inicial atravessa a região onde se concentra as cavidades, continuando seu movimento progressivo no canal. A parcela do pacote que se encontra na região das cavidades começa a oscilar, sofrendo múltiplas reflexões e espalhamentos para as regiões interna das cavidades. A evolução destas oscilações podem ser vistas nos instantes $1,2$ a $1,4 \times 10^{-4} \text{ s}$.

O espalhamento e os pacotes de onda que são transmitidos, refletidos e espalhados nas cavidades dependem do intervalo de frequências que compõem o pacote de ondas original. Efetuando a evolução temporal de um pacote de ondas mais estreito (consequentemente com maior número de frequências), neste mesmo sistema aberto, percebemos modos bem distintos no instante $1,4 \times 10^{-4} \text{ s}$, como mostrada na figura 5.19, mesmo que as condições iniciais e intervalo de evolução, sejam exatamente os mesmos.

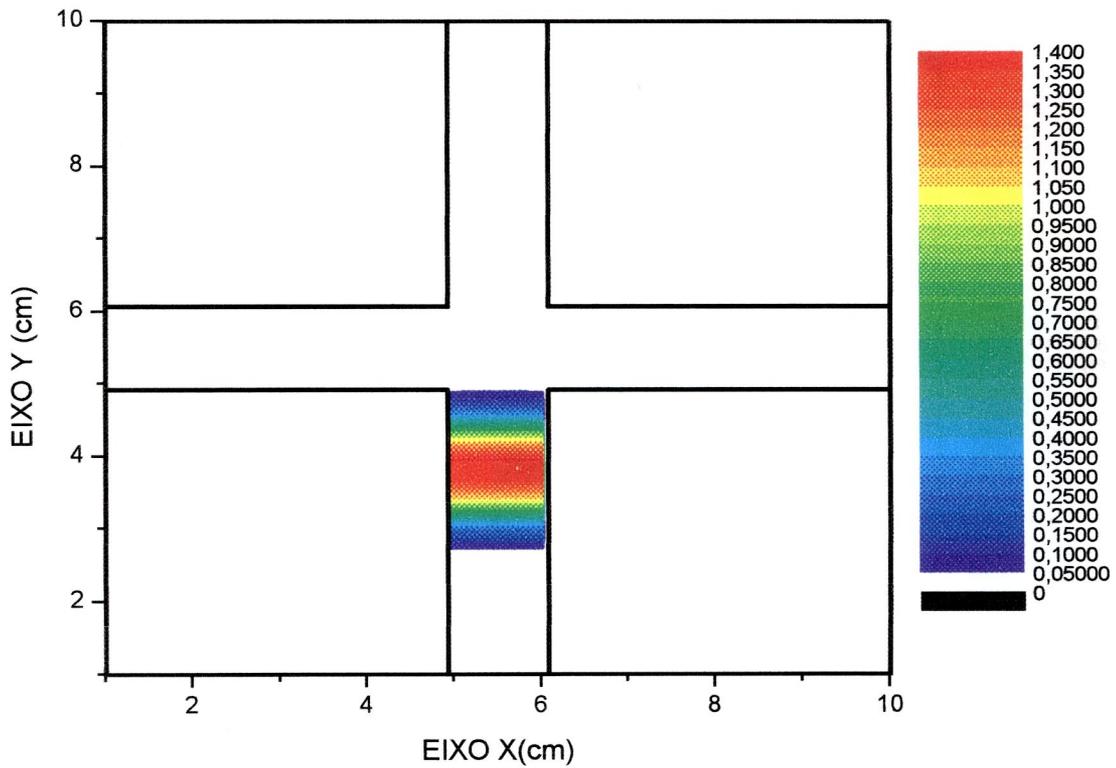


Figura 5-12: Esquema geral do problema proposto para a propagação num guia retangular. No problema proposto um pacote de onda é confinado em uma das direções (canal) enquanto a outra é livre. Neste caso, o canal tem dimensões que são comparáveis com o comprimento de onda médio do pulso, que no nosso caso é de 1 cm.

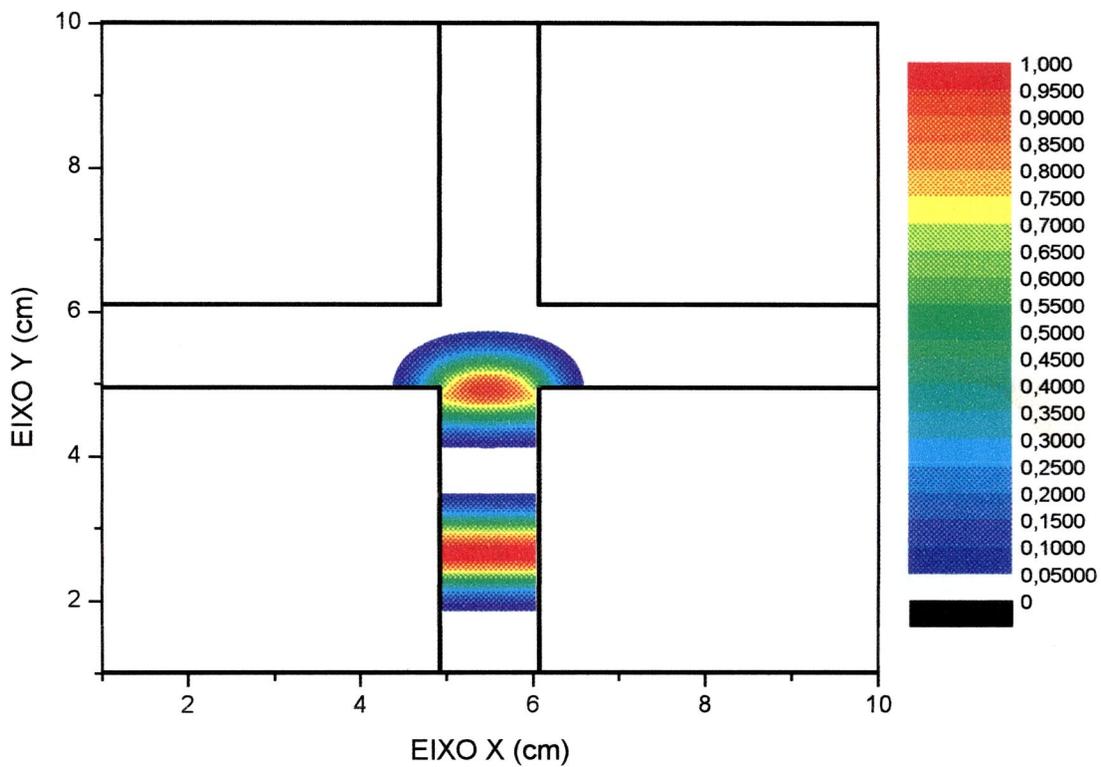


Figura 5-13: Numa determinada posição do canal (centro do sistema), cria-se a possibilidade de propagação em outra direção perpendicular, conforme mostrado na figura.

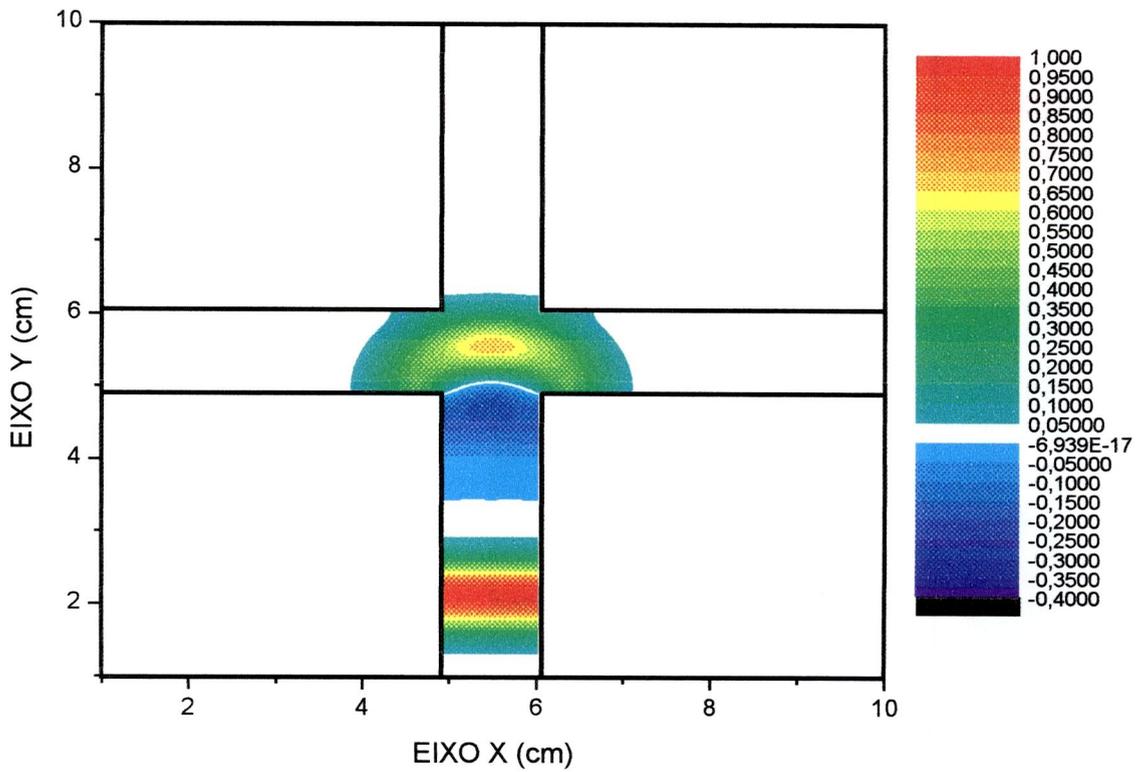


Figura 5-14: Propagação de um pulso numa guia retangular. É possível ver a formação de modos de propagação característicos na guia perpendicular devido à difração do pacote ocasionada pela mudança das condições de contorno.

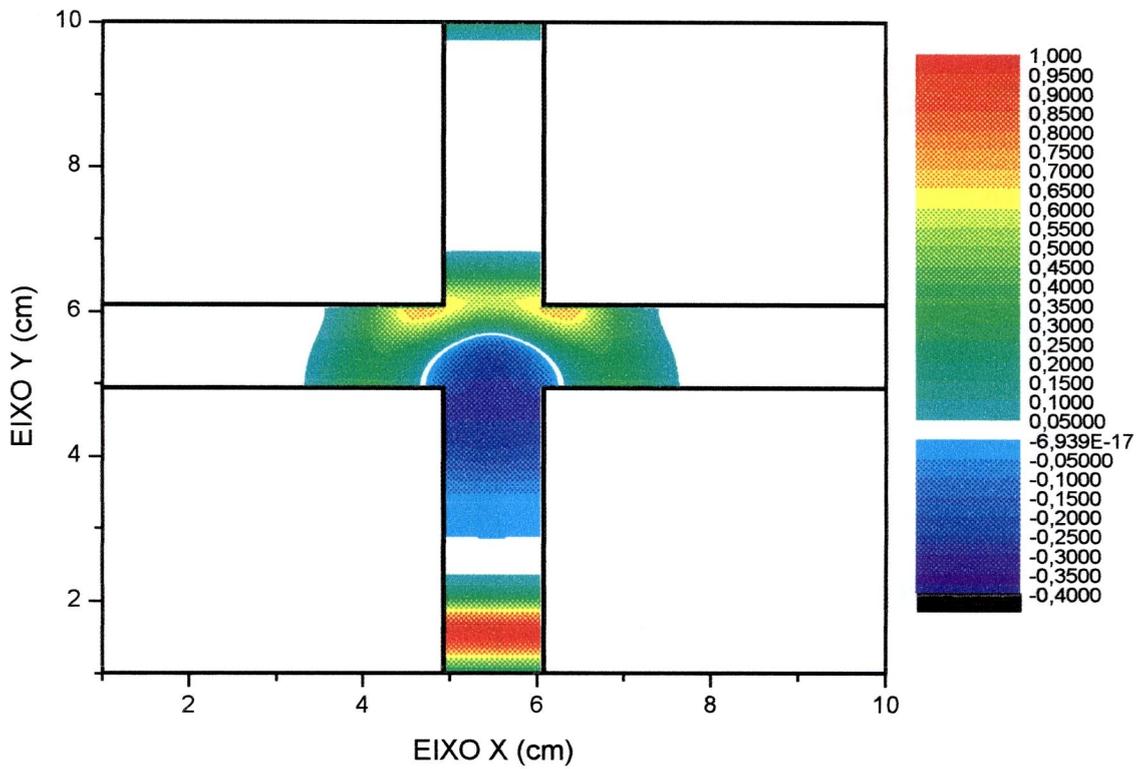


Figura 5-15: O pulso inicial sofre reflexão parcial e também um novo espalhamento, devido as quinas existentes na outra extremidade do canal transversal.

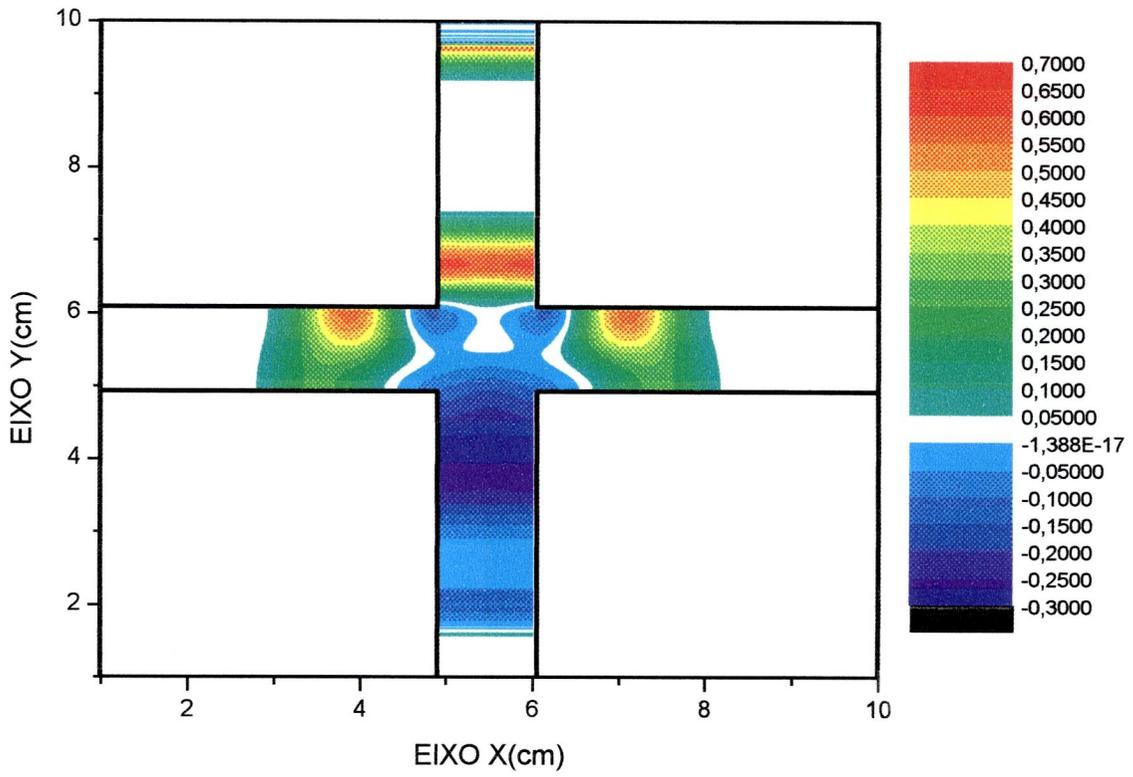


Figura 5-16: A parcela do pacote que se encontra na região das cavidades começa a oscilar, sofrendo múltiplas reflexões e espalhamentos para as regiões interna das cavidades.

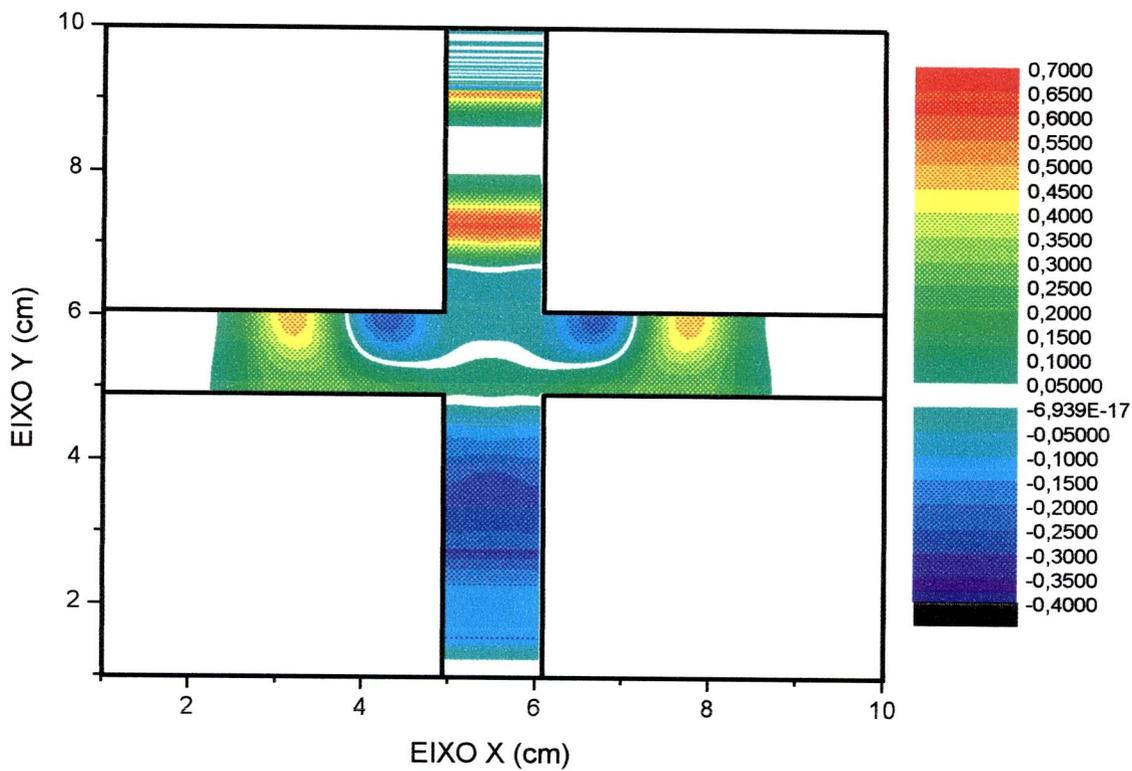


Figura 5-17: Propagação de um pulso gaussiano num cruzamento de guias de onda retangulares, no instante 1.2×10^{-4} s. Podemos ver que uma parte do pacote de ondas inicial consegue passar pela guia perpendicular e seguir seu movimento no canal original.

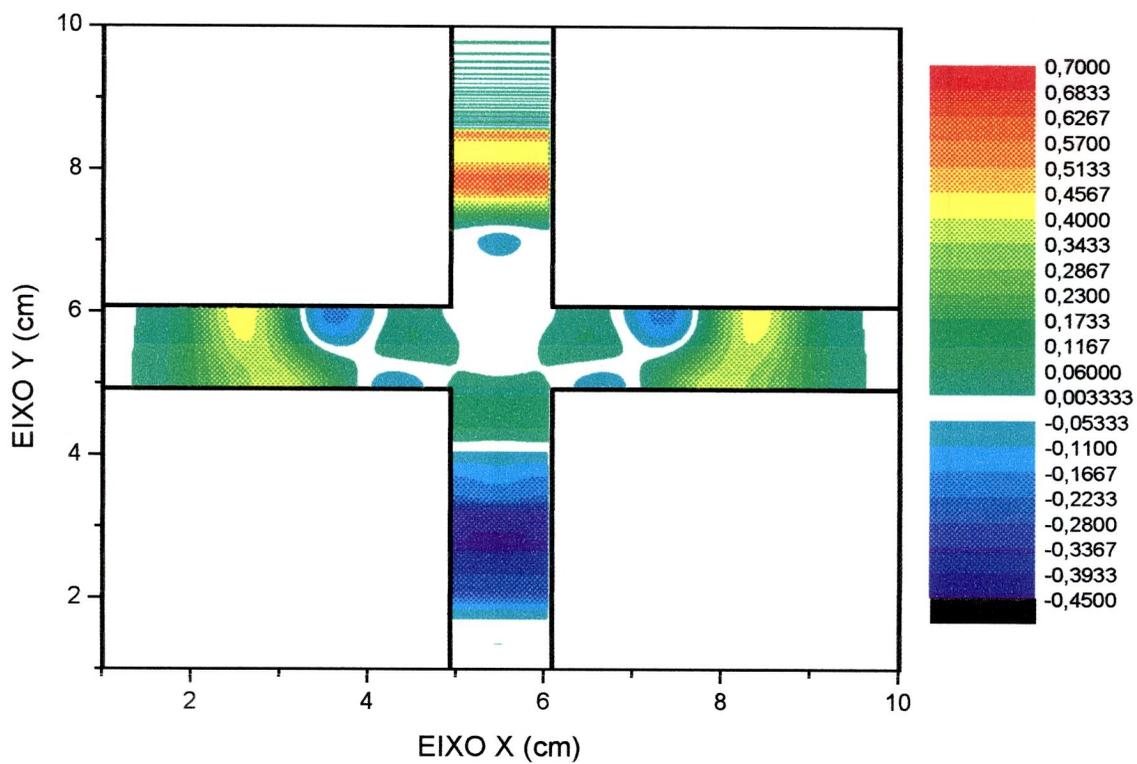


Figura 5-18: Propagação de um pulso numa guia retangular no instante 1.4×10^{-4} s. Múltiplas reflexões ocorrem na região do cruzamento entre os dutos.

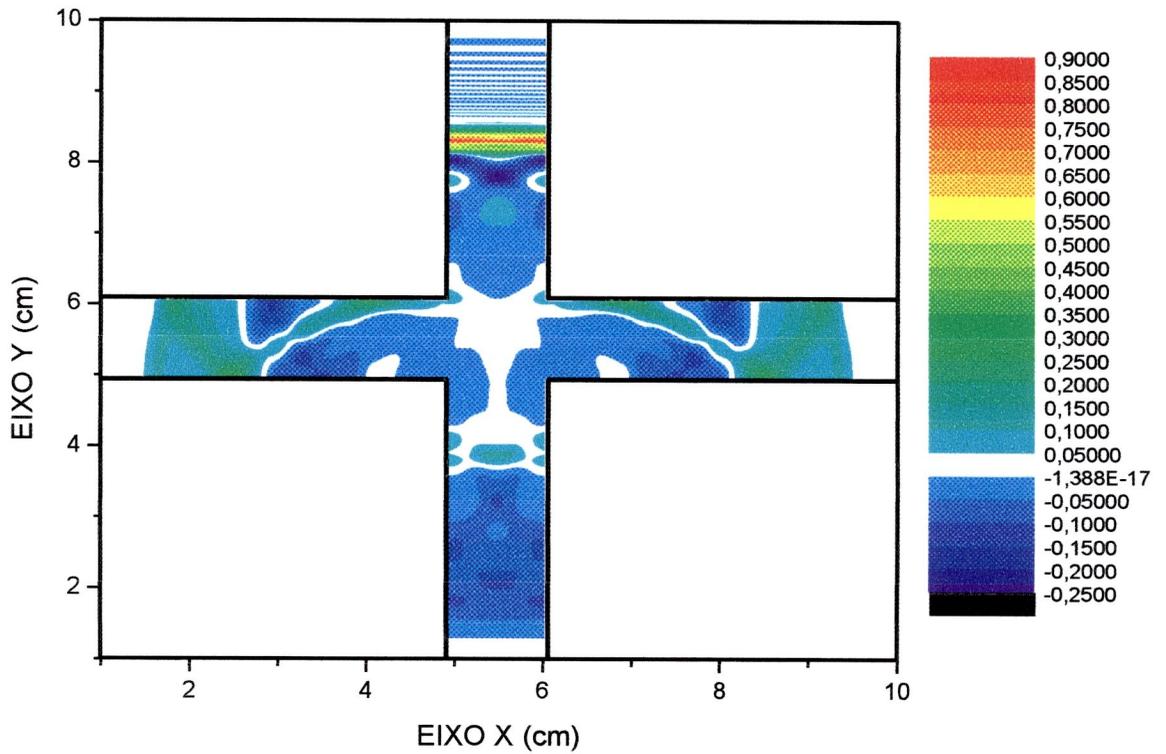


Figura 5-19: Propagação de um pulso numa guia retangular. Neste caso o pacote de ondas tem um espectro mais amplo de frequências. O tempo é equivalente ao do gráfico anterior, ou seja, $1,4 \times 10^{-4}$ s.

Capítulo 6

Conclusões gerais do Trabalho

Apesar de que conclusões e discussões foram feitas ao longo das seções tratadas neste trabalho, podemos ressaltar as seguintes conclusões, que consideramos mais relevantes:

1. O método do *Split-Operator* (SO), técnica originária do tratamento temporal de pacote de ondas eletrônicos em sistemas quânticos, pode ser aplicado a sistemas clássicos. Enquanto que na mecânica quântica este algoritmo está centrado nas funções de onda do sistema, no sistema clássico obtemos as evoluções temporais das variáveis internas à densidade espectral σ_{Φ}^j , quantidade esta que faz o papel da função de onda para o caso clássico. Da mesma forma que para o caso quântico, os operadores que se situam na exponencial inicial não comutam entre si. Ambos operadores podem sofrer partição simétrica, de modo que teremos dois algoritmos distintos de evolução temporal do SO. Aplicando propriedades específicas de operadores diferenciais em exponenciais, estes algoritmos podem ser transformados em relações de recorrência entre as variáveis internas.
2. O SO é uma técnica que apresenta muitas vantagens frente ao método FDTD (*finite difference time-domain method*). Este último é o processo tradicional para se estudar a evolução temporal de pacotes de ondas. Para sistemas acústicos lineares e homogêneos, o FDTD trabalha simultaneamente com as equações de Newton e da continuidade. Nestas expressões, a pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ estão inter-relacionadas. As relações de recorrência do FDTD, entre as quantidades de passos consecutivos não são conservativas, pois o determinante da matriz de evolução temporal do FDTD não é igual a 1, existindo um erro da ordem de Δt^2 , cometido a cada passo de tempo. Esta não-unitariedade faz com que exista uma perda progressiva de informações. Para as variáveis $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$, $\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi^k(\mathbf{r})$, $\mathbf{v}^k(\mathbf{r})$, resulta que este algoritmo não preserva as relações de comutação, ou os critérios dos parênteses de Poisson, para uma transformação canônica de coordenadas.

Esta situação não acontece para o SO, que se destaca pela a maior estabilidade numérica, a possibilidade da mesma análise para o tempo reverso¹, e a conservação das intensidades iniciais de $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$. Isto permite simulações temporais com valores maiores de incrementos de tempo, conseqüentemente sem tantos erros numéricos introduzidos a cada aplicação a matriz evolução temporal no sistema.

3. Os sistemas unidimensionais simulados para os algoritmos do SO e MSO satisfazem as propriedades gerais dos sistemas formados pela união de dois ou mais meios homogêneos, isotrópicos, uniformes. Dentre estas podemos destacar:

- A concordância entre os resultados teóricos e os obtidos numericamente, para os valores dos coeficientes de transmissão e reflexão, quando o pacote de ondas incide sobre uma interface abrupta;
- A equivalência entre a velocidade de propagação das ondas num meio $c(\mathbf{x})$ e a velocidade de grupo do pacote de ondas, para um meio uniforme;
- O tunelamento sem reflexão, quando as impedâncias acústicas entre meio incidente e meio transmitido são iguais;
- O comportamento do pacote de ondas transmitido e refletido, após incidir numa interface abrupta, e onde as impedâncias acústicas entre meio incidente Z_I e transmitido Z_T sejam diferentes:

Pacote	$Z_T/Z_I < 1$	$Z_T/Z_I > 1$
Refletido	Inversão de fase	Não há inversão de fase
Transmitido	Pico transmitido é menor do que o incidente	Pico transmitido é maior do que o incidente

- Independência dos fenômenos de transmissão e reflexão, quando a espessura do meio é maior do que a espessura do pacote de onda incidente na primeira interface.
- A condição para que não haja reflexão para um pacote de ondas que passa de um meio para outro, ocorre quando o valor da impedância acústica é a mesma nestes dois meios. Apesar das impedâncias acústicas serem iguais em todo o sistema, nada impede que os valores de densidade e velocidade de propagação de cada meio possam assumir valores diferentes, proporcionando distorções transientes no pacote de ondas.

¹O tempo reverso (reversal time) ocorre quando é conhecido a situação final e desejamos obter a situação inicial. Desta forma, necessitamos fazer uma regressão temporal para obter a quantidade física desejada.

Somente quando existe este perfeito casamento entre as impedâncias acústicas destes dois meios é que haverá transmissão total do pacote de ondas. Em todos os outros casos, as interfaces entre os meios atuam como centros espalhadores.

4. Considerando aplicações sucessivas do algoritmo de evolução temporal do SO, verificamos a possibilidade de juntar alguns dos termos referentes a estas aplicações consecutivas, proporcionando um novo esquema de evolução temporal. Este novo algoritmo, de características semelhantes ao SO, foi denominado de Split-Operator Modificado (MSO). Para um mesmo intervalo de evolução, este algoritmo reduz de $3M$ para $2N + 1$ o número de operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial. Esta redução, diminui o tempo computacional, além dos erros numéricos decorrentes da aplicação de cada exponencial. Ao contrário do SO, o algoritmo MSO apresenta relações de recorrência distintas para o primeiro e último instante de tempo. Apesar disto, ela mantém todas as propriedades de conservação, bem como a ordem dos erros associado a separação dos operadores diferenciais, que é de Δt^3 .
5. Considere um pacote de ondas incidindo num meio de impedância acústica distinta. Este pacote de ondas sofrerá espalhamento em todas as direções. A parcela do pacote que penetra neste outro meio e o que é refletido depende da diferença de impedâncias entre estes meios. Em todos os casos, sempre é possível colocar detectores não-interagentes com o sistema, de modo a armazenar as partes transmitida e refletida dos pacotes de ondas. Estes detectores devem estar em locais apropriados, para que os sinais captados a cada instante de tempo, sejam os correspondentes para as partes transmitida e refletida. Efetuando a Transformada de Fourier nos dados armazenados nestes detectores, é possível calcular os coeficientes de transmissão e reflexão, bem como obter grandezas espectrais como o PSD e ASF para as partes transmitida e refletida.
6. Através da comparação dos sinais obtidos nos detectores para o sistema com e sem o meio espalhador, conseguimos calcular a diferença de fase do pacote que foi transmitido ao longo do meio. Com esta informação, é possível encontrarmos as velocidades de fase e de grupo em função da frequência, bem como determinar a estrutura de bandas para um cristal acústico. Equivalências de mudanças de comportamento para as grandezas espectrais e as velocidades de fase e de grupo foram observadas para cristais, e ressaltadas em gráficos comparativos. Isto pois o pacote de onda que incide nesta estrutura acaba sofrendo múltiplos espalhamentos, e o que efetivamente consegue emergir após a última interface é tão somente as frequências que se encontram na região de condução desta estrutura. Da mesma forma, a parcela refletida do pacote foi a que se encontrava na região de banda

proibida.

7. O SO também pode ser aplicado em sistemas que apresentem termos dissipativos ou não-lineares: No caso de sistemas dissipativos, a forma do pacote transmitido não se altera em relação ao caso ideal. Apenas sua intensidade vai diminuindo, conforme a dissipação atua no pacote de ondas. No caso não-linear, existe uma mudança de comportamento do pacote de ondas, sofrendo uma distorção proporcional ao grau de não-linearidade do meio.
8. Quando estudamos um sistema bidimensional, as relações explícitas usadas nos sistemas unidimensionais se tornam numericamente instáveis, e portanto muito restritivas. Por este motivo, foi necessário desenvolver algoritmos mais estáveis, emergindo dois possíveis algoritmos: O algoritmo semi-implícito e o implícito-explícito alternado. Enquanto o primeiro apresenta a vantagem de ser mais rápido, o outro é mais estável numericamente. A aplicação de um ou de outro método depende da característica de cada sistema em questão. Para os valores de impedância entre os meios simulados numericamente, o primeiro algoritmo se mostrou mais vantajoso. Para os sistemas estudados no capítulo 5, mesmo para discretizações da ordem de 800×800 pontos, a estabilidade do método permitiu que se obtenha informações importantes sobre o sistema.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Hueter and R. H. Bolt - *Sonics* 1, 8 - Wiley (1954).
- [2] J.D. Maynard, *Colloquium: Acoustical analogs of condensed-matter problems*, Rev. of Modern Phys. ,**73**, 401(2001).
- [3] J. Bleuse, G. Bastard, P. Voisin, *Electric-field-induced localization and oscillatory electro-optical properties of semiconductor superlattices*, Phys. Rev. Lett., **60**, n. 3, 220 (1988) ; P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert, A. Regreny, *Observation of the Wannier-Stark quantization in a semiconductor superlattice*, Phys. Rev. Lett., **61**, 1639 (1988) ; E. Bigan, M. Allovon, M. Carre, *Very low drive voltage optical waveguide modulation in an InGaAs/InAlAs superlattice*, Appl. Phys. Lett., **57**, 4, 327 (1990).
- [4] J.Feldmann, K.Leo, J.Shah, D.A.B.Miller, J.E.Cunningham, P.Thomas, T.Meier, G.von Plessen, A.Schulze, S.Schmitt-Rink, *Optical investigation of Bloch oscillations in semiconductor superlattices*, Phys. Rev. B, **46**, 11, 7252 (1992). ; P.Leisching, P.Haring Bolivar, W.Beck, Y.Daibi, F.Brüggemann, R.Schwedler, H.Kurz, K.Leo, K.Köhler, *Bloch oscillations of excitonic wave packets in semiconductor superlattices*, Phys. Rev. B, **52**, 19, 14389 (1994) ;
- [5] R. H. Yu, *Tamm States in Finite Superlattice: Influence of Accumulation and Depletion Layers*, Phys. Rev. B, **47**, 1379 (1993) ; W. Glessner e R. H. Yu, *Couplings Between the Tamm States and Stark Ladders*, J. of Appl. Phys. **76**, 6, 3609(1994) ; D. Indjin, V. Milanovic , Z. Ikonc, *Tamm States in Effective-mass Superlattice with a Defect*, Proc of IEEE conf. on microelectr. MIEL 95, Nis, 1995, **1**. (1994); A.B.Henriques, *Strong luminescence from Tamm states in modulation-doped superlattices*, Appl. Phys. Lett. **78**, 691(2001) ; A.B.Henriques, L.K.Hanamoto, P.L.Souza and B.Yavich, *Observation of densely populated Tamm states in modulation-doped superlattices*, Phys. Rev. B (Rapid Communications) **61**, 13 369 (2000).

- [6] W. Axmann, P. Kuchment, *An efficient finite element method for computing spectra of photonic and acoustic band-gap materials - I. Scalar case*, J. Comput. Phys., **150**, 2, (1999); M. Torres, F.R. Montero de Espinosa, D. Garcia-Pablos, N. Garcia, *Sonic Band Gaps in Finite Elastic Media: Surface States and Localization Phenomena in Linear Point Defects*, Phys. Rev. Lett., **82**, 15, 3054 (1999).
- [7] J.O. Vasseur, P.A. Deymier, G. Frantziskonis, G. Hong, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, *Experimental evidence for the existence of absolute acoustic band-gaps in two-dimensional periodic composite media*, J. Phys. Condens. Matter, **10**, 6051(1998) ; J.O. Vasseur, P.A. Deymier, B. Chenni, *Experimental and theoretical evidence for the existence of absolute acoustic band gaps in two-dimensional solid phononic crystals*, Phys. Rev. Lett., **86**, **14**, 3012 (2001) .
- [8] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, *Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites*, Phys. Rev. Lett., **71**, 13, 2022 (1993) ; M.S. Kushwaha and P. Halevi, *Band-gap engineering in periodic composites*, Appl. Phys. Lett. **64**, 9, 1085(1994) ; E.N. Economou and M.M. Sigalas, *Classical wave propagation in periodic structures: Cermet versus network topology*, Phys. Rev B, **48**, 18, 13434(1993) .
- [9] K. K. Mon, *Spectral gaps for elastic waves in continuous periodic composites*, J. Appl. Phys. **78**, 5981(1995).
- [10] F.R. Montero de Espinoza, E. Jimenéz and M. Torres, *Ultrasonic Band Gap in a Periodic Two-Dimensional Composite*, Phys. Rev. Lett., **80**, 6, 1208(1998) ; D. Caballero, J. Sánchez-Dehesa, C. Rubio, R. Martínez-Sala, J. V. Sánchez-Pérez, F. Meseguer, and J. Llinares, *Larger two-dimensional sonic band gaps*, Phys. Rev. E, **60**, R6316-6319 (1999).
- [11] J. V. Sánchez-Pérez, D. Caballero, R. Martínez-Sala, C. Rubio, J. Sánchez-Dehesa, F. Meseguer, J. Llinares and F. Gálvez, *Sound attenuation by a two-dimensional array of rigid cylinders*, Phys.Rev.Lett. **80**, 5325-5328 (1998) .
- [12] Y. Tanaka, Y. Tomoyasu and S. Tamura, *Band structure of acoustic waves in phononic lattices: Two-dimensional composites with large acoustic mismatch*, Phys. Rev. B, **62**, 7387 (2000).
- [13] K. S. Yee, *Numerical Solution of initial boundary value problems involving Maxwell 's equations in isotropic media*, IEEE trans. Antennas Propagat., **AP-14**, 302-307 (1966).
- [14] S. Wang, *Finite-difference time-domain approach to underwater acoustic scattering problems*, J. Acoust. Soc. Am. **99**, 1924-1928 (1996). Q-Huo Liu and J. Tao, *The perfectly layer for acoustic waves in absorptive media*, J. Acoust. Soc. Am. **102**, 4, 2072(1997).

- [15] D. S. Katz, M. J. Piket-May, A. Taflove, e K. R. Umashankar, *FDTD Analysis of Electromagnetic Wave Radiation from Systems Containing Horn Antennas*, IEEE Trans. Antennas Propagat., **39**, 8, 1203(1991) ; C. E. Reuter, R. M. Joseph, E. T. Thiele, D. S. Katz, and A. Taflove, *Ultrawideband Absorbing Boundary Conditions for Termination of Waveguiding Structures in FDTD Simulations*, IEEE Microwave and Guided Wave Letters, **4**, 10, 344(1994). ; D. S. Katz, E. T. Thiele, e A. Taflove, *Validation and Extension to Three Dimensions of the Berenger PML Absorbing Boundary Condition for FD-TD Meshes*, IEEE Microwave and Guided Wave Letters, **4**, 8, 268(1994).
- [16] M. D. Fleit, J. A. Fleck. and A. Steiger, *Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method*, J. Comp. Phys., **47** 412- (1982).
- [17] M. H. Degani, J. Appl. Phys. Lett, **59**, 1, 57(1991); M. H. Degani, Phys. Rev. B, **44**, 11, 5580(1991); M. H. Degani, J. Appl. Phys., **70**, 8, 4364 (1991).
- [18] A. T. de Hoop, *Handbook of Radiation and Scattering Waves*, Cap. 2, pp. 7, Academic Press (1995).
- [19] I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products*, Cap. 1, pp. 21, Academic Press (1965).
- [20] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery , *Numerical Recipes in Fortran - Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press(1992) ; G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins Series in the Mathematical Sciences (1996).
- [21] F. X. Giraldo, B. Neta e C. P. Katti, *Parallel Solutions of Tridiagonal and Pentadiagonal Systems*, NPS Technical Report # NPS-MA-95 pp. 1 (June 1995). Chris Walshaw, M. Cross, *Parallel optimisation algorithms for multilevel mesh partitioning*. Parallel Computing **26**, 12, 1635 (2000).
- [22] J.-L. Thomas, P. Roux, M. Fink, 'Inverse Scattering Analysis with an Acoustic Time-Reversal Mirror, Phys. Rev. Lett., **72**, 5, 637(1994); M. Fink, J. Phys. D., **26**, 1333-1360(1993) ; M. Fink, C. Prada, F. Wu and D. Cassereau, in Proceedings of the IEEE Ultrasonic Symposium, 1989.
- [23] K. Aizu, *time-reversal invariance and linear multistep methods for integrating dynamical-systems*, J. Comput. Phys. **55**, 154(1984) ; K. Aizu, *Canonical transformation invariance and linear multistep formula for integration of hamiltonian-systems*, J. Comput. Phys., **58**, 270(1985).

- [24] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Attenuation of multiple scattered sound*, Europhys. Lett., **36**, 241-246 (1996); M. M. Sigalas, E. N. Economou and M. Kafesaki, *Spectral gaps for electromagnetic and scalar waves: possible explanation for certain differences*, Phys. Rev. B, **50**, 3393(1994).
- [25] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals* (Springer Series in Optical Sciences, 80), (May 2001) Springer Verlag; P. St. J. Russell, *Photonic Band Gaps*, report by Physics World, **5**, 8, 37(1992). H. O. Everitt, *Applications of Photonic Band Gap Structures*, report by Optics and Photonics News, **3**, 11, 20(1992). G. Parker, M. Charlton, *Photonic crystals*, Phys. world **13**, 8, 29(2000).
- [26] P. Yeh, A. Yariv, and C. S. Hong, *Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory*, J. Opt. Soc. Am. **67**, 423(1977).
- [27] A. Modinos, *Scattering of electromagnetic waves by a plane of spheres - formalism*, Physica A **141**, 575 (1987); N. Stefanou and A. Modinos, *Scattering of light by a two-dimensional array of spherical particles on a substrate*, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 8135 (1991).
- [28] N. Stefanou and A. Modinos, *Optical properties of thin discontinuous metal films*, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 8149 (1991); A. Modinos and N. Stefanou, *Optical properties of a two-dimensional array of metallic spheres on a substrate*, Acta Physica Polonica A **81**, 91 (1992) ; V. Karathanos, A. Modinos, and N. Stefanou, *Light scattering by non-spherical plasma particles*, J. Physique I **2**, 1279 (1992) ; N. Stefanou, V. Karathanos, and A. Modinos, *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 7389 (1992) ; A. Modinos, V. Karathanos, and N. Stefanou, *Optical properties of layers and crystals of spherical particles*, Applied Surface Science **13**, 65 (1993) ; N. Stefanou and A. Modinos, *Scattering of electromagnetic waves by a disordered two-dimensional array of spheres*, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 8859 (1993).
- [29] V. Karathanos, A. Modinos, and N. Stefanou, *Planar defects in photonic crystals*, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 6257 (1994) ; N. Stefanou and A. Modinos, *Impurity bands in photonic insulators*, Phys. Rev. B **57**, 12127 (1998) .
- [30] P.M. Bell, J.B. Pendry, L. Martin-Moreno, A.J. Ward, *A Program for Calculating Photonic Band Structures and Transmission Coefficients of Complex Structures*, Computer Physics Commun. (1995).
- [31] A.J. Ward and J.B. Pendry, *A program for calculating photonic band structures and Green's functions using a non-orthogonal FDTD method*, **112**, 1, 23(1998).

- [32] H.C. Hill, *Introduction to mass spectroscopy*, Heyden & son, London(1971). ; O. Howarth, *Theory of Spectroscopy*, Thomas Nelson & Sons Ltd., London(1973). ; D. Williamns and I. Fleming, *Spectroscopic methods in organic chemistry*, 3rd ed. Mc Graw-Hill, London(1980). ; J. Blackburn, *Spectral Analysis: Methods and tecniques*, Marcel Dekker Inc. New York(1970).
- [33] K.E. Bullen, and B. Bolt, *An introduction to the theory of seismology*, 4th ed., Cambridge University Press, Cambridge(1985).
- [34] G.D. Crapper, *Introduction to water waves*, Ellis Horwood, Chichester(1984).
- [35] J. W. Cooley e J.W. Tukey, *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*, *Mathematics of Computation*, **19**, 90, 297(1965).
- [36] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery , *Numerical Recipes in Fortran - Art of Scientific Computing*, cap. 12, 394-395, Cambridge University Press(1992).
- [37] P.D. Sewell, D.P. Rodohan, S.R., Saunders, *Comparison of Analytical and Parallel FDTD Models of Antenna-Head Interactions*, Ninth Int. Conf. on Antennas and Propagation (ICAP '95), pp. 67-71, IEEE(1995); D.P. Rodohan, S.R. Saunders, S.R. Cvetkovic, P.D. Beavis, e R.J. Glover, *Parallel Simulation of Electromagnetic Fields for Telecommunications Applications*, IEEE Singapore Int. Conf. on Communication Systems (ICCS'94), 435(1994); D.P. Rodohan, S.R. Saunders, *Rapid Solution of the Finite Difference Time Domain method using Parallel Associative Techniques*, Eighth Int. Conf. on Antennas and Propagation, IEEE, 1, 596(1993).
- [38] R. A. Stephen, *A review of finite-difference method for seismo-acoustic problems at seafloor*, *Rev. Geophys.* **26** 445-458 (1988).

Apêndice A

Formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano para sistemas acústicos

Efetuada uma apropriada combinação das equações de Newton e da continuidade, obtemos a equação de onda para a pressão. Através da definição de $\Lambda(\mathbf{r}, t)$, transformamos a equação de onda em um sistema de duas equações diferenciais de primeira ordem no tempo:

$$\begin{cases} \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t) = \Lambda(\mathbf{r}, t) \\ \partial_t \Lambda(\mathbf{r}, t) = \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Estas equações são utilizadas na equação de Liouville, que é a base dos nossos algoritmos de evolução temporal apresentados neste trabalho. Vamos provar neste apêndice, que estas são as equações canônicas de movimento, quando utilizamos o formalismo Hamiltoniano.

A.1 Hamiltoniana total do sistema

Considere a equação de onda para a pressão $\Phi(\mathbf{r}, t)$. Uma vez que a compressibilidade $\kappa(\mathbf{r})$ é independente do tempo, a eq. (2.4) pode ser reescrita como:

$$\partial_t \{ \kappa(\mathbf{r}) \Lambda(\mathbf{r}, t) \} - \vec{\nabla} \cdot \{ \rho^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Comparando esta equação com a equação de movimento para a densidade de lagrangeana $\ell_{\Phi} = \ell(\Phi, \Lambda, \partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)$,

$$\partial_t \{\partial_{\Lambda} \ell_{\Phi}\} + \sum_{m=1}^3 d_{\mathbf{x}_m} \left\{ \frac{\partial \ell_{\Phi}}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right\} - \partial_{\Phi} \ell_{\Phi} = 0, \quad (\text{A.3})$$

obtemos:

$$\begin{cases} \partial_{\Phi} \ell_{\Phi} = 0, \\ \partial_{\Phi, x_k} \ell_{\Phi} = -\rho^{-1}(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{x}_m} \Phi(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{p}_{\Phi} = \partial_{\Lambda} \ell_{\Phi} = \kappa(\mathbf{r}) \Lambda(\mathbf{r}, t). \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

onde $\mathbf{p}_{\Phi} = \partial_{\Lambda} \ell_{\Phi}$ é denominado densidade de momento canônico para a pressão. Na eq. (A.2), a derivada $\partial_{\Phi} \ell_{\Phi}$ é igual a zero pois na só existem termos proporcionais às derivadas espaciais de $\Phi(\mathbf{r}, t)$.

Com os resultados fornecidos pela eq. (A.4), encontramos a expressão para a densidade de lagrangeana ℓ_{Φ} :

$$\ell_{\Phi} = \frac{1}{2} \kappa(\mathbf{r}) \Lambda^2(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} \rho^{-1}(\mathbf{r}) \left(\vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \right)^2. \quad (\text{A.5})$$

Integrando a eq. (A.5) em todo o espaço real, obtemos a Lagrangeana total para este sistema. Podemos determinar também as densidades de hamiltoniana $\mathbf{h}_{\Phi} = \mathbf{h}(\Phi, \mathbf{p}_{\Phi}, \partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)$. Para isto, utilizamos as relações entre as densidades de hamiltoniana e de lagrangeana:

$$\mathbf{h}_{\Phi} = \Lambda \mathbf{p}_{\Phi} - \ell(\Phi, \mathbf{p}_{\Phi}, \partial_{\mathbf{x}_m} \Phi). \quad (\text{A.6})$$

encontrando que as densidades de hamiltoniana são a soma das densidades de energia potencial e cinética acústica:

$$\mathbf{h}_{\Phi} = \frac{1}{2} \kappa(\mathbf{r}) \Lambda^2(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \rho^{-1}(\mathbf{r}) \left(\vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \right)^2. \quad (\text{A.7})$$

Assim como a Lagrangeana, integrando-se em todo o espaço real a eq. (A.7), obtemos as Hamiltonianas total do sistema:

$$\mathbf{H}_{\Phi} = \frac{1}{2} \int_V \kappa(\mathbf{r}) \Lambda^2(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_V \rho^{-1}(\mathbf{r}) \left(\vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \right)^2 d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.8})$$

Tanto a Lagrangeana quanto a Hamiltoniana não possuem termos explicitamente dependentes do tempo. No caso da Hamiltoniana, isto fará com que ela seja uma constante de movimento do sistema.

A.2 As equações canônicas de movimento

Na seção anterior, deduzimos a expressão para a Hamiltoniana \mathbf{H}_Φ . Esta Hamiltoniana pode ser descrita de forma equivalente por duas equações: i) integrando a densidade de hamiltoniana \mathbf{h}_Φ ; ii) Utilizando a relação entre as densidades de hamiltoniana e lagrangeana, integrada em todo o espaço:

$$\mathbf{H}_\Phi = \int_V \mathbf{h}_\Phi d^3\mathbf{r}, \quad (\text{A.9})$$

$$= \int_V \{\Lambda \mathbf{p}_\Phi - \ell(\Phi, \mathbf{p}_\Phi, \partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)\} d^3\mathbf{r}. \quad (\text{A.10})$$

Uma variação infinitesimal da Hamiltoniana total do sistema, provoca a aparição de uma soma de quatro termos na eq. (A.9) e de seis termos na eq. (A.10), a saber:

$$d\mathbf{h}_\Phi = (\partial_{\mathbf{p}_\Phi} \mathbf{h}_\Phi) d\mathbf{p}_\Phi + (\partial_\Phi \mathbf{h}_\Phi) d\Phi + \sum_{m=1}^3 \left(\frac{\partial \mathbf{h}_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right) d(\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi) + \partial_t \mathbf{h}_\Phi, \quad (\text{A.11})$$

$$d\{\Lambda \mathbf{p}_\Phi - \ell_\Phi\} = \Lambda d\mathbf{p}_\Phi - (\partial_\Phi \ell_\Phi) d\Phi - \sum_{m=1}^3 \left(\frac{\partial \ell_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right) d(\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi) - \partial_t \ell_\Phi, \quad (\text{A.12})$$

onde na segunda expressão, o termo em $d\Lambda$ foi omitido na segunda expressão pois $\mathbf{p}_\Phi = \partial_\Lambda \ell_\Phi$.

Utilizando o teorema de Gauss no cálculo das integrais espaciais de $d\mathbf{H}_\Phi$, as eqs. (A.9) e (A.10) são expressas respectivamente por:

$$d\mathbf{H}_\Phi = \int_V \left[\partial_\Phi \mathbf{h}_\Phi - \sum_{m=1}^3 \partial_{\mathbf{x}_m} \left(\frac{\partial \mathbf{h}_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right) \right] d\Phi d^3\mathbf{r} + \int_V [\partial_{\mathbf{p}_\Phi} \mathbf{h}_\Phi d\mathbf{p}_\Phi + \partial_t \mathbf{h}_\Phi dt] d^3\mathbf{r}, \quad (\text{A.13})$$

e

$$d\mathbf{H}_\Phi = \int_V \{\Lambda d\mathbf{p}_\Phi - \partial_t \mathbf{p}_\Phi d\Phi - \partial_t \ell_\Phi dt\} d^3\mathbf{r}, \quad (\text{A.14})$$

onde utilizamos

$$\partial_t \mathbf{p}_\Phi = \partial_\Phi \ell_\Phi - \sum_{m=1}^3 \partial_{\mathbf{x}_m} \left(\frac{\partial \ell_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right). \quad (\text{A.15})$$

Uma vez que estas duas variações devem serem equivalentes, a subtração entre elas deve ser

zero:

$$\int_V \{d\mathbf{h}_\Phi - d(\Lambda \mathbf{p}_\Phi - \ell_\Phi)\} d^3\mathbf{r} = \mathbf{0}. \quad (\text{A.16})$$

Através da comparação entre as eqs. (A.11) e (A.12), conseguimos as equações canônicas de movimento de Hamilton para sistemas contínuos, bem como uma relação entre as derivadas parciais temporal das densidades de hamiltoniana e lagrangeana:

$$\partial_{\mathbf{p}_\Phi} \mathbf{h}_\Phi = \partial_t \Phi, \quad (\text{A.17})$$

$$\partial_\Phi \mathbf{h}_\Phi - \sum_{k=1}^3 \partial_{x_m} (\partial_{x_m} \mathbf{h}_\Phi) = -\partial_t \mathbf{p}_\Phi, \quad (\text{A.18})$$

$$\partial_t \mathbf{h}_\Phi = -\partial_t \ell_\Phi. \quad (\text{A.19})$$

As eqs. (A.17) e (A.18) podem ser escritas em função de $\mathbf{p}_\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Phi(\mathbf{r}, t)$. Para isto, utilizamos a eq. (A.7), para a densidade \mathbf{h}_Φ :

$$\mathbf{p}_\Phi(\mathbf{r}, t) = \kappa(\mathbf{r}) \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.20})$$

$$\partial_t \mathbf{p}_\Phi(\mathbf{r}, t) = \vec{\nabla} \left\{ \rho^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \right\}. \quad (\text{A.21})$$

Substituindo a definição de densidade de momento canônico $\mathbf{p}_\Phi = \kappa(\mathbf{r}) \Lambda(\mathbf{r}, t)$, resulta que:

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.22})$$

$$\partial_t \Lambda(\mathbf{r}, t) = \kappa^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \left\{ \rho^{-1}(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Phi(\mathbf{r}, t) \right\}. \quad (\text{A.23})$$

As eqs. (A.22)–(A.23) são idênticas às eqs. (2.8), sendo portanto as equações canônicas de movimento para o sistema acústico.

A.3 Conservação da Hamiltoniana total

Na primeira seção deste apêndice, deduzimos as expressões para a Hamiltoniana total do sistema acústico. As Hamiltoniana total, definida pela eq. (A.8), não possuem dependência explícita com o tempo. Isto faz com que ela seja uma constante de movimento do sistema. Para demonstrar, voltemos à definição do Hamiltoniano total \mathbf{H}_Φ :

$$\mathbf{H}_\Phi = \int_V \mathbf{h}_\Phi d^3\mathbf{r}. \quad (\text{A.24})$$

A derivada total de \mathbf{H}_Φ com relação ao tempo, faz com que $d_t \mathbf{h}_\Phi$ seja descrito pela seguinte

soma de termos:

$$d_t \mathbf{h}_\Phi = (\partial_\Phi \mathbf{h}_\Phi) \partial_t \Phi + \sum_{m=1}^3 \left(\frac{\partial \mathbf{h}_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right) \partial_t (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi) + (\partial_{\mathbf{p}_\Phi} \mathbf{h}_\Phi) \partial_t \mathbf{p}_\Phi + \partial_t \mathbf{h}_\Phi, \quad (\text{A.25})$$

de modo que:

$$d_t \mathbf{H}_\Phi = \int_V \left[\partial_\Phi \mathbf{h}_\Phi - \sum_{m=1}^3 \partial_{\mathbf{x}_m} \left(\frac{\partial \mathbf{h}_\Phi}{\partial (\partial_{\mathbf{x}_m} \Phi)} \right) \right] \partial_t \Phi d^3 \mathbf{r} + \int_V [(\partial_{\mathbf{p}_\Phi} \mathbf{h}_\Phi) \partial_t \mathbf{p}_\Phi + \partial_t \mathbf{h}_\Phi] d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.26})$$

Neste último resultado, aparecem os termos $\partial_t \Phi$ e $\partial_t \mathbf{p}_\Phi$. Estas quantidades podem ser substituídas pelas equações de movimento canônico, dadas pelas eqs. (A.20) e (A.21). Se efetuarmos esta troca, os dois primeiros termos se cancelam, resultando em:

$$d_t \mathbf{H}_\Phi = \int_V \partial_t \mathbf{h}_\Phi d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.27})$$

Como \mathbf{h}_Φ não apresenta termos explicitamente dependentes do tempo, $\partial_t \mathbf{h}_\Phi = 0 \rightarrow d_t \mathbf{H}_\Phi = 0$. Por consequência, \mathbf{H}_Φ é constante de movimento do sistema.

Apêndice B

Critérios para incrementos temporais

Conforme foi mencionado no capítulo 2 é possível adotarmos uma discretização temporal não-uniforme para o incremento Δt_k . Apesar dos incrementos espaciais não precisarem ser todos idênticos, é necessário que todos sejam pequenos o bastante para que as dependências temporais de $\Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ possam ser negligenciadas. Os critérios para estipular estes valores de Δt_k é discutido neste apêndice.

Sejam dois instantes de tempo consecutivos t_k e $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$, situados no intervalo total de evolução $[t_i, t_f]$, onde

$$t_k = t_i + \sum_{r=1}^k \Delta t_r . \quad (\text{B.1})$$

Admitindo que sejam conhecidos os valores da pressão e sua derivada temporal em t_k e t_{k+1} , expandimos $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$ em série de Taylor, em torno dos seus respectivos valores no instante t_k :

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(\Delta t_k)^q}{q!} \partial_t^q \Phi^k(\mathbf{r}) \approx \Phi^k(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.2})$$

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(\Delta t_k)^q}{q!} \partial_t^q \Lambda^k(\mathbf{r}) \approx \Lambda^k(\mathbf{r}) . \quad (\text{B.3})$$

Passamos agora a deduzir um critério a ser satisfeito pelos Δt_k : Expandindo as eqs. (B.2) e (B.3), retendo-se apenas os termos em primeira ordem de Δt_k , e, em seguida, utilizamos as

equações canônicas de movimento, para $\partial_t \Phi(\mathbf{r}, t)$ e $\partial_t \Lambda(\mathbf{r}, t)$, obtemos:

$$\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi^k(\mathbf{r}) + \Delta t_k \Lambda^k(\mathbf{r}), \quad (\text{B.4})$$

$$\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) = \Lambda^k(\mathbf{r}) + \Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^k(\mathbf{r}). \quad (\text{B.5})$$

Isolando Δt_k de cada uma destas equações, chegamos a duas condições que devem ser satisfeitas para todos os incrementos temporais:

$$\Delta t_k^{cr} = \frac{\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) - \Phi^k(\mathbf{r})}{\Lambda^k(\mathbf{r})} \ll 1, \quad (\text{B.6})$$

$$\Delta t_k^{cr} = \frac{\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) - \Lambda^k(\mathbf{r})}{\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^k(\mathbf{r})} \ll 1. \quad (\text{B.7})$$

Somente para $\Delta t_k \leq \Delta t_k^{cr}$ que é possível efetuar as aproximações $\Phi^{k+1}(\mathbf{r}) \approx \Phi^k(\mathbf{r})$ e $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r}) \approx \Lambda^k(\mathbf{r})$, e o integrando da eq. (2.13) pode ser considerado como constante no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$:

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} A_{\Phi}(\mathbf{r}, t) dt \approx \Delta t_k \Lambda^k(\mathbf{r}) \partial_{\Phi}, \quad (\text{B.8})$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} B_{\Phi}(\mathbf{r}, t) dt \approx \Delta t_k [\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^k(\mathbf{r})] \partial_{\Lambda}, \quad (\text{B.9})$$

onde os valores operadores foram tomados no instante de tempo t_k , onde conhecemos $\Phi^k(\mathbf{r})$ e $\Lambda^k(\mathbf{r})$ em todos os pontos do sistema.

Apêndice C

Separação de operadores diferenciais

Quando escrevemos a forma exponencial da equação de Liouville para $\sigma_{\Phi}(\Phi, \Lambda, t)$, no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$, encontramos uma soma dos operadores diferenciais $A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = -\Lambda^k(\mathbf{r}) \partial_{\Phi}$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = [\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^k(\mathbf{r})] \partial_{\Lambda}$ situados no argumento de uma exponencial:

$$\sigma_{\Phi}^{k+1} = \exp \left\{ \Delta t_k C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \sigma_{\Phi}^k, \quad (\text{C.1})$$

onde

$$C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r}). \quad (\text{C.2})$$

Infelizmente não sabemos como tratar o operador $C_{\Phi}^k(\mathbf{r})$, sendo necessário separar os operadores $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$, deixando-os um em cada exponencial. Se procedermos desta forma, devemos aplicá-los sequencialmente em σ_{Φ}^k . Entretanto, quando calculamos seu comutador, verificamos que

$$\left[\Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}), \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right] = -\Delta t_k^2 \left[\Gamma(\mathbf{r}) \times \Phi^k(\mathbf{r}) \right] \partial_{\Phi} \neq 0, \quad (\text{C.3})$$

e, quando isto acontece,

$$\exp \left\{ \Delta t_k C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \neq \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{C.4})$$

$$\neq \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{C.5})$$

ou seja, que a soma dos operadores situados numa mesma exponencial não é igual ao produto dos operadores diferenciais, um em cada exponencial. Além disto, a ordem de aplicação dos operadores em σ_{Φ}^k é relevante, provocando resultados distintos.

Uma vez que não existe a possibilidade de não cometer erros na separação de $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$,

passamos a trabalhar a possibilidade de como fazer esta separação, com o menor erro possível, sem acarretar algoritmos complicados. Nesta linha de pensamento, encontramos a técnica de separação dos operadores diferenciais do Split-Operator (SO) a ser discutida neste apêndice.

Como uma primeira tentativa de separação dos operadores situados no argumento de uma exponencial, seria simplesmente separá-los e ignorar por completo a não-comutabilidade entre eles. Se isto for feito, o erro cometido \mathcal{E} é da ordem Δt_k^2 , cuja estabilidade se restringe apenas a valores de Δt_k muito pequenos, necessitando que os termos de ordem Δt_k^2 sejam desprezíveis, para não comprometer a validade dos resultados obtidos:

$$\exp \left\{ \Delta t_k C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} = \exp \left\{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} + \mathcal{E}(\Delta t_k^2), \quad (\text{C.6})$$

onde

$$\mathcal{E}(\Delta t_k^2) = \frac{\Delta t_k^2}{2!} D_{\Phi}^k + \frac{\Delta t_k^3}{3!} \left\{ \left(A_{\Phi}^k + C_{\Phi}^k \right) D_{\Phi}^k + D_{\Phi}^k \left(B_{\Phi}^k + C_{\Phi}^k \right) \right\}, \quad (\text{C.7})$$

$$D_{\Phi}^k = \left[A_{\Phi}^k, B_{\Phi}^k \right]. \quad (\text{C.8})$$

Felizmente, existe um modo de minimizar este erro: A separação de operadores diferenciais, situados no argumento de uma exponencial, utilizando a técnica do Split-Operator, reduz o erro \mathcal{E}_{so} cometido na separação de dois operadores, para a ordem Δt_k^3 . Para isto, é necessário dividir um dos operadores diferenciais, mantendo o outro inalterado. Nesta partição, o operador que permanece inalterado deve estar, necessariamente, no centro desta soma:

$$A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} A_{\Phi}^k(\mathbf{r}),$$

ou

$$A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} B_{\Phi}^k(\mathbf{r}).$$

Em seguida, separamos cada um destes operadores em uma exponencial. Convertemos então a soma dos operadores $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ situados numa mesma exponencial, num produto de três exponenciais, sendo que a primeira e a última exponencial contém o operador que sofreu a divisão. Se efetuarmos este procedimento,

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \Delta t_k C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} + \mathcal{E}_{so}(\Delta t_k^3), \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

ou

$$\begin{aligned} \exp \{ \Delta t_k C_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \} = & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} \times \\ & \exp \{ \Delta t_k A_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \} \times \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta t_k B_{\Phi}^k(\mathbf{r}) \right\} + \mathcal{E}_{so}(\Delta t_k^3), \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

e o erro $\mathcal{E}_{so}(\Delta t_k^3)$ é dado por

$$\mathcal{E}_{so}(\Delta t_k^3) = \frac{\Delta t_k^3}{4!} \left[(B_{\Phi}^k + C_{\Phi}^k), D_{\Phi}^k \right] \left\{ 1 + 2\Delta t_k C_{\Phi}^k + 3 \left(\Delta t_k C_{\Phi}^k \right)^2 + \dots \right\}. \quad (\text{C.11})$$

Como o $\Delta t_k \ll 1$, obedecendo os critérios das eqs. (B.6) e (B.7), apenas as primeiras ordens são relevantes.

Apêndice D

A matriz evolução temporal e suas propriedades

No capítulo que tratamos o algoritmo do SO, aplicado a sistemas acústicos lineares e homogêneos, determinamos duas possíveis relações de recorrência entre as variáveis $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda^k(\mathbf{r})$, $\Phi^k(\mathbf{r})$. Estas relações podem ser escritas na forma de uma matriz 2×2 ,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^k(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

Os elementos desta matriz $\alpha_{mn}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$, variam conforme a sequência de aplicação dos operadores exponenciais adotada:

	$l = 1$	$l = 2$
$\alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$
$\alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\Delta t_k - \frac{1}{4}\Delta t_k^3 \Gamma(\mathbf{r})$	$-\Delta t_k$
$\alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\Delta t_k \Gamma(\mathbf{r})$	$-\Delta t_k \Gamma(\mathbf{r}) - \frac{1}{4}\Delta t_k^3 \Gamma^2(\mathbf{r})$
$\alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$

(D.2)

O índice (l) , com $l = 1, 2$, se refere aos dois possíveis algoritmos de evolução temporal do SO. Para $l = 1$, o algoritmo é o da eq. (2.19), e para $l = 2$, o algoritmo é o da eq. (2.20).

A matriz evolução temporal apresentada na eq. (D.1), efetua a evolução temporal entre $[t_k, t_{k+1}]$. Para o estudo da evolução total no intervalo $[t_i, t_f]$, a matriz deve ser aplicada M

vezes:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^f(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^f(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^M \left\{ \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix} \right\} \times \begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^i(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^i(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

No caso de incrementos temporais idênticos ($\Delta t_k = \Delta t$), a produtória anterior se converte na aplicação de uma matriz, elevada à M -ésima potência, pois os elementos de matriz não mudam com o passar do tempo:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^f(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^f(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}) & \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}) \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}) & \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}^M \times \begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^i(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^i(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.4})$$

Com isto, determinamos a matriz evolução total para as variáveis Φ e Λ . Passamos agora a estudar as propriedades da matriz evolução temporal, que serão estudadas na próxima seção.

D.1 A matriz evolução temporal

Aplicando o algoritmo do SO na FESL, e, em seguida, utilizando as propriedades de operadores diferenciais em exponenciais, obtemos duas relações de recorrência distintas entre $\Phi^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi^k(\mathbf{r})$, $\Lambda^k(\mathbf{r})$. Posteriormente, estas duas relações, foram convertidas em esquemas de diferenças finitas, e condensadas em matrizes $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$:

$$\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix}, \quad (\text{D.5})$$

cujos elementos destas matrizes são mostrados na eq. (D.2). A matriz $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$, é compacta, de fácil implementação computacional e possui propriedades interessantes, apresentadas a seguir:

1. Os elementos da matriz de $\mathfrak{S}_{j(l)}(\mathbf{r})$ são as projeções de $\Phi_{(l)}^{j+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(l)}^{j+1}(\mathbf{r})$ em $\Phi_{(l)}^j(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(l)}^j(\mathbf{r})$:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi_{(l)}^k} & \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda_{(l)}^k} \\ \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi_{(l)}^k} & \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda_{(l)}^k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.6})$$

O determinante da matriz $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$ é igual a 1, preservando a área total do espaço de fase, a cada instante de tempo.

2. A matriz $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$ é inversível, cujos os elementos são as projeções de $\Phi_{(l)}^j(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(l)}^j(\mathbf{r})$ em

$\Phi_{(l)}^{j+1}(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(l)}^{j+1}(\mathbf{r})$:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_{(l)}^k}{\partial \Phi^{k+1}} & \frac{\partial \Phi_{(l)}^k}{\partial \Lambda^{k+1}} \\ \frac{\partial \Lambda_{(l)}^k}{\partial \Phi^{k+1}} & \frac{\partial \Lambda_{(l)}^k}{\partial \Lambda^{k+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & -\alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ -\alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.7})$$

Esta matriz é denominada matriz regressão temporal $\check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r})$. Ela é conseguida com o tempo sendo orientado no sentido inverso $t_k \rightarrow -t_k$. As análises feitas para o tempo progredindo no sentido positivo, são idênticas às do tempo reverso[22], sendo apenas necessário trocar Δt_k por $-\Delta t_k$. Portanto, o SO se presta também a estudos de *reversal time*, ou seja, situações onde possuímos a forma final de uma determinada função, e desejamos conhecer sua forma inicial. Os elementos da matriz regressão temporal são conseguidos, permutando-se $\Delta t_k \rightarrow -\Delta t_k$. O critério de invariância dos algoritmos para tempos reversos, deve ser obedecido pelas relações de recorrência, para que estas sejam canônicas [23].

3. Comparando os elementos de matriz das matrizes $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$ e $\check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r})$, temos que

$$\begin{aligned} \alpha_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) &= \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi^k} = \frac{\partial \Lambda_{(l)}^k}{\partial \Lambda^{k+1}}, \\ \alpha_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) &= \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda^k} = -\frac{\partial \Lambda_{(l)}^k}{\partial \Lambda^{k+1}}, \\ \alpha_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) &= \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi^k} = -\frac{\partial \Lambda_{(l)}^k}{\partial \Phi^{k+1}}, \\ \alpha_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) &= \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda^k} = \frac{\partial \Phi_{(l)}^k}{\partial \Phi^{k+1}}. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

e o produto $\check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r}) \times \mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = \mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}) \times \check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = 1$.

4. O esquema de diferenças finitas entre $\Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi_{(l)}^k(\mathbf{r})$ e $\Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r})$, dados nas eqs. (2.19) e (2.20), conservam as relações de comutação, a cada passo temporal. Sendo $(\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}))^t$ a matriz transposta de $\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r})$, verifica-se que

$$\mathfrak{R}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = (\mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}))^t \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \times \mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}), \quad (\text{D.9})$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \left[\Phi_{(l)}^k, \Phi_{(l)}^k \right]_{(\Phi_{(l)}^{k+1}, \Lambda_{(l)}^{k+1})} & \left[\Phi_{(l)}^k, \Lambda_{(l)}^k \right]_{(\Phi_{(l)}^{k+1}, \Lambda_{(l)}^{k+1})} \\ \left[\Lambda_{(l)}^k, \Phi_{(l)}^k \right]_{(\Phi_{(l)}^{k+1}, \Lambda_{(l)}^{k+1})} & \left[\Lambda_{(l)}^k, \Lambda_{(l)}^k \right]_{(\Phi_{(l)}^{k+1}, \Lambda_{(l)}^{k+1})} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Os elementos da matriz $\mathfrak{R}_{(l)}^k(\mathbf{r})$ são os parênteses fundamentais de Poisson,

$$\begin{aligned}
\left[\Phi_{(l)}^k, \Lambda_{(l)}^k \right]_{(\Phi_{(l)}^{k+1}, \Lambda_{(l)}^{k+1})} &= \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi^k} \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda^k} - \frac{\partial \Lambda_{(l)}^{k+1}}{\partial \Phi^k} \frac{\partial \Phi_{(l)}^{k+1}}{\partial \Lambda^k} \\
&= \det \mathfrak{S}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = 1.
\end{aligned} \tag{D.10}$$

- A transformação $\left(\Phi_{(l)}^k(\mathbf{r}), \Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r}) \right) \rightarrow \left(\Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}), \Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}) \right)$, satisfaz os critérios dos parênteses de Poisson para uma transformação canônica de coordenadas. Estes critérios são dados pelos resultados dos elementos de matrizes da eq. (D.9).

Passamos agora a comentar um pouco a respeito da matriz evolução temporal do MSO $\check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r})$. Esta matriz também é 2×2 , mas apresenta elementos de matriz distintos para os instantes de tempo inicial e final, a saber:

$$\check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \check{\alpha}_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \check{\alpha}_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \check{\alpha}_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \check{\alpha}_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix}, \tag{D.11}$$

onde

		$l = 1$	$l = 2$
$\mathbf{t} = \mathbf{t}_i \rightarrow$	$\check{\alpha}_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_i)$	1	1
	$\check{\alpha}_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_i)$	$-\frac{1}{2} \Delta t_i$	0
	$\check{\alpha}_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_i)$	0	$-\frac{1}{2} \Delta t_i \Gamma(\mathbf{r})$
	$\check{\alpha}_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_i)$	1	1
entre $]\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_f[\rightarrow$	$\check{\alpha}_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$1 + \Delta t_{k+1} \overline{\Delta t}_k \Gamma(\mathbf{r})$	1
	$\check{\alpha}_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\overline{\Delta t}_k$	$-\Delta t_{k+1}$
	$\check{\alpha}_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\Delta t_{k+1} \Gamma(\mathbf{r})$	$-\overline{\Delta t}_k \Gamma(\mathbf{r})$
	$\check{\alpha}_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	1	$1 + \Delta t_{k+1} \overline{\Delta t}_k \Gamma(\mathbf{r})$
$\mathbf{t} = \mathbf{t}_f \rightarrow$	$\check{\alpha}_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_M)$	$1 + \frac{1}{2} \Delta t_M^2 \Gamma(\mathbf{r})$	1
	$\check{\alpha}_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_M)$	$-\frac{1}{2} \Delta t_M$	$-\Delta t_M$
	$\check{\alpha}_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_M)$	$-\Delta t_M \Gamma(\mathbf{r})$	$-\frac{1}{2} \Delta t_M \Gamma(\mathbf{r})$
	$\check{\alpha}_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_M)$	1	$1 + \frac{1}{2} \Delta t_M^2 \Gamma(\mathbf{r})$

(D.12)

e

$$\overline{\Delta t}_k = \frac{\Delta t_k + \Delta t_{k+1}}{2}. \quad (\text{D.13})$$

Esta matriz possui as mesmas propriedades da matriz evolução temporal do Split-Operator tradicional, detalhadas nesta seção. Deste modo, $\text{Det } \check{\mathfrak{S}}_{(l)}^k(\mathbf{r}) = 1$, as relações de recorrência entre $\Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi_{(l)}^k(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r})$ são conservadas a cada passo de tempo, as matrizes regressão temporal são obtidas permutando-se $\Delta t_k \rightarrow -\Delta t_k$.

D.2 Matriz de evolução temporal do FDTD

A matriz evolução temporal não é privilégio apenas do SO e MSO. Também podemos conseguir uma matriz de evolução temporal para o algoritmo FDTD. Para isto, voltemos ao capítulo 2, reescrevendo as relações de recorrência entre $\Phi_{FD}^{k+1}(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_{FD}^{k+1}(\mathbf{x})$ e $\Phi_{FD}^k(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_{FD}^k(\mathbf{x})$, na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}_{FD}^{k+1}(\mathbf{x}) \\ \Phi_{FD}^{k+1}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta t_k}{\rho(\mathbf{x})} \partial_{\mathbf{x}} \\ -\frac{\Delta t_k}{\kappa(\mathbf{x})} \partial_{\mathbf{x}} & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{FD}^k(\mathbf{x}) \\ \Phi_{FD}^k(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.14})$$

A matriz evolução temporal do FDTD, é a matriz $\mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x})$, cujos elementos da diagonal principal são iguais a 1 e os da diagonal secundária, apenas contém termos em derivadas de primeira ordem no espaço:

$$\mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t_k \rho^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \\ -\Delta t_k \kappa^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.15})$$

Os elementos de matriz do FDTD são mais simples do que o do SO. Entretanto, esta simplicidade tem um preço a pagar: O determinante desta matriz de evolução temporal não é igual a 1:

$$\det \mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x}) = 1 - \Delta t_k^2 \rho^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \{ \kappa^{-1}(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{x}} \}. \quad (\text{D.16})$$

Esta não-unitariedade resulta num erro progressivo, cometido a cada passo de tempo. Uma certa densidade $\sigma_{FD}(\Phi, \mathbf{v}, t)$, com uma certa área inicial no espaço de fase (Φ, \mathbf{v}) , sofrerá gradativas perdas e modificações em sua forma inicial. As variáveis Φ e \mathbf{v} sofrem uma perda progressiva de sua forma inicial. Esta perda da informação inicial, restringe o método FDTD a evoluções temporais não muito grandes.

Este algoritmo não preserva as relações de comutação, ou os critérios dos parênteses de Poisson, para uma transformação canônica de coordenadas. Isto pode ser comprovado, aplicando-se a eq. (D.9), para $\mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x})$:

$$\mathfrak{R}_{FD}^k(\mathbf{x}) = \left(\mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x}) \right)^t \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \times \mathfrak{S}_{FD}^k(\mathbf{x}), \quad (\text{D.17})$$

$$= \begin{pmatrix} [\Phi^k, \Phi^k]_{(\Phi^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1})} & [\Phi^k, \mathbf{v}^k]_{(\Phi^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1})} \\ [\mathbf{v}^k, \Phi^k]_{(\Phi^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1})} & [\mathbf{v}^k, \mathbf{v}^k]_{(\Phi^{k+1}, \mathbf{v}^{k+1})} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.18})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 - \Delta t_k^2 \rho^{-1} \partial_{\mathbf{x}} \{ \kappa^{-1} \partial_{\mathbf{x}} \} \\ -1 + \Delta t_k^2 \rho^{-1} \partial_{\mathbf{x}} \{ \kappa^{-1} \partial_{\mathbf{x}} \} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.19})$$

Portanto a matriz evolução temporal para o método FDTD, apresenta muitas desvantagens frente a matriz de evolução temporal do SO.

D.3 Matriz de evolução temporal do SO de ordem Δt^2

Após a aplicação do último operador nas eqs. (2.60) e (2.61), igualamos as variáveis internas das densidades σ_{Φ}^{k+1} e σ_{Φ}^k , as quais sofreram a ação de $A_{\Phi}^k(\mathbf{r})$ e $B_{\Phi}^k(\mathbf{r})$. Através desta igualdade,

obtemos duas distintas relações de recorrência, que podem ser agrupadas na forma matricial

$$\begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \varphi_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \\ \varphi_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) & \varphi_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Phi_{(l)}^k(\mathbf{r}) \\ \Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (\text{D.20})$$

cujos elementos de matriz são dados por

	$l = 1$	$l = 2$
$\varphi_{11}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	1	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$
$\varphi_{12}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\Delta t_k$	$-\Delta t_k$
$\varphi_{21}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$-\Delta t_k \Gamma(\mathbf{r})$	$-\Delta t_k \Gamma(\mathbf{r})$
$\varphi_{22}^{(l)}(\mathbf{r}, t_k)$	$1 + \frac{1}{2}\Delta t_k^2 \Gamma(\mathbf{r})$	1

(D.21)

Quando $l = 1$, nos referimos a eq. (2.60) e para $l = 2$, a partição se refere a eq. (2.61).

As matrizes que fazem a ligação entre $\Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi_{(l)}^k(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r})$, são as matrizes evolução temporal para o SO de ordem Δt_k^2 . Estas matrizes possuem as mesmas propriedades da matriz evolução temporal do Split-Operator, detalhadas anteriormente. Deste modo, o determinante desta matriz é igual a 1, as relações de recorrência entre $\Phi_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^{k+1}(\mathbf{r})$ e $\Phi_{(l)}^k(\mathbf{r})$, $\Lambda_{(l)}^k(\mathbf{r})$ são conservadas a cada passo de tempo, as matrizes regressão linear são obtidas permutando-se $\Delta t_k \rightarrow -\Delta t_k$, nos elementos da matriz evolução temporal.

Apêndice E

Solução das relações de recorrência implícitas

Neste apêndice, apresentamos o procedimento para a resolução de matrizes tri e pentadiagonais, utilizando para isto o Algoritmo de Thomas. Estas matrizes surgem quando tratamos as relações de recorrência implícitas, necessários para tratar sistemas com grandes contrastes de impedância acústica. Na primeira seção, apresentamos o algoritmo de Thomas para matrizes tri-diagonal e na segunda, o algoritmo para penta-diagonal.

E.1 Algoritmo de Thomas para matrizes tri-diagonais

O algoritmo de Thomas aplicado na solução de para matrizes tridiagonais, será utilizado para resolver equações do tipo

$$a_i \Lambda_{i+1}^{k+1} + b_i \Lambda_i^{k+1} + c_i \Lambda_{i-1}^{k+1} = D_i^k, \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{E.1})$$

onde os coeficientes $a_1 = c_N = 0$. A quantidade D_i^k é supostamente conhecida em todos os pontos do sistema e desejamos obter $\Lambda^{k+1}(\mathbf{x})$. Esta equação, em termos matriciais, toma a forma de uma matriz cujos elementos são não-nulos apenas na diagonal principal e nas duas

diagonais adjacentes:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \backslash & \backslash & \backslash & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_1^{k+1} \\ \Lambda_2^{k+1} \\ \Lambda_3^{k+1} \\ \Lambda_4^{k+1} \\ \vdots \\ \Lambda_N^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1^k \\ D_2^k \\ D_3^k \\ D_4^k \\ \vdots \\ D_N^k \end{pmatrix} \quad (\text{E.2})$$

Para resolvermos este sistema, definimos as variáveis auxiliares \bar{v}_i e $\bar{\gamma}_i$, a saber:

$$\bar{v}_i = \begin{cases} b_1, & \text{para } i = 1, \\ b_i - (c_i a_{i-1}) / \bar{v}_{i-1}, & \text{para } i > 1, \end{cases} \quad (\text{E.3})$$

$$\bar{\gamma}_i = \begin{cases} D_1^k / \bar{v}_1, & \text{para } i = 1, \\ (D_i^k - c_i \bar{\gamma}_{i-1}) / \bar{v}_i, & \text{para } i > 1. \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

De posse de todos os \bar{v}_i e $\bar{\gamma}_i$, efetuamos uma substituição reversa dos valores, utilizando a relação:

$$\Lambda_i^{k+1} = \begin{cases} \bar{\gamma}_N, & \text{para } i = N, \\ \bar{\gamma}_i - a_i \Lambda_{i+1}^{k+1} / \bar{v}_i, & \text{para } i < N. \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

Deste modo, o primeiro valor a ser obtido será Λ_N^{k+1} e o último Λ_1^{k+1} . Este algoritmo deve ser aplicado a cada passo de tempo, durante todo o intervalo de evolução.

E.2 Algoritmo para uma matriz pentadiagonal

Quando consideramos até segundos vizinhos nas derivadas espaciais de primeira e segunda ordem, encontramos relações de recorrência implícita da forma:

$$a_i^k \mathbf{v}_{i+2}^{k+1} + b_i^k \mathbf{v}_{i+1}^{k+1} + c_i^k \mathbf{v}_i^{k+1} + d_i^k \mathbf{v}_{i-1}^{k+1} + e_i^k \mathbf{v}_{i-2}^{k+1} = D_i^k, \quad (\text{E.6})$$

onde $1 \leq i \leq N$, e os coeficientes

$$a_1^k = b_1^k = b_2^k = 0,$$

$$e_{N-1}^k = d_N^k = e_N^k = 0.$$

A quantidade D_i^k é supostamente conhecida em todos os pontos do sistema, assim como os coeficientes a_i^k , b_i^k , c_i^k , d_i^k e e_i^k . Desejamos obter os valores de $\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x})$ em todos os pontos do sistema no instante t_{k+1} . Para isto, resolvemos esta equação fazendo-se uso do algoritmo de Thomas para uma matriz pentadiagonal. Os dois primeiros passos e os dois últimos são distintos dos outros:

$$\delta_1 = b_1^k/c_1^k, \quad (\text{E.7})$$

$$\lambda_1 = a_1^k/c_1^k, \quad (\text{E.8})$$

$$\gamma_1 = D_1^k/c_1^k, \quad (\text{E.9})$$

e

$$\mu_2 = c_2^k - d_2^k \delta_1, \quad (\text{E.10})$$

$$\delta_2 = (b_2^k - d_2^k \lambda_1) / \mu_2, \quad (\text{E.11})$$

$$\lambda_2 = a_2^k / \mu_2, \quad (\text{E.12})$$

$$\gamma_2 = (D_2^k - d_2^k \gamma_1) / \mu_2, \quad (\text{E.13})$$

Então, para $3 \leq i \leq N-2$, compute

$$\beta_i = d_i^k - e_i^k \delta_{i-2}, \quad (\text{E.14})$$

$$\mu_i = c_i^k - \beta_i \delta_{i-1} - e_i^k \lambda_{i-2}, \quad (\text{E.15})$$

$$\delta_i = (d_i^k - \beta_i \lambda_{i-1}) / \mu_i, \quad (\text{E.16})$$

$$\lambda_i = a_i^k / \mu_i, \quad (\text{E.17})$$

$$\gamma_i = (D_i^k - \beta_i \gamma_{i-1} - e_i^k \gamma_{i-2}) / \mu_i. \quad (\text{E.18})$$

Em seguida, faça

$$\beta_{N-1} = d_{N-1}^k - e_{N-1}^k \delta_{N-3}, \quad (\text{E.19})$$

$$\mu_{N-1} = c_{N-1}^k - \beta_{N-1} \delta_{N-2} - e_{N-1}^k \lambda_{N-3}, \quad (\text{E.20})$$

$$\delta_{N-1} = (d_{N-1}^k - \beta_{N-1} \lambda_{N-2}) / \mu_{N-1}, \quad (\text{E.21})$$

$$\gamma_{N-1} = (D_{N-1}^k - \beta_{N-1} \gamma_{N-2} - e_{N-1}^k \gamma_{N-3}) / \mu_{N-1}. \quad (\text{E.22})$$

e

$$\beta_N = d_N^k - e_N^k \delta_{N-2}, \quad (\text{E.23})$$

$$\mu_N = c_N^k - \beta_N \delta_{N-1} - e_N^k \lambda_{N-2}, \quad (\text{E.24})$$

$$\gamma_N = \left(D_N^k - \beta_N \gamma_{N-1} - e_N^k \gamma_{N-2} \right) / \mu_{N-1}. \quad (\text{E.25})$$

Para obtermos os \mathbf{v}_i^{k+1} , utilizamos agora as variáveis δ_i , λ_i e γ_i , de modo que

$$\mathbf{v}_N^{k+1} = \gamma_N, \quad (\text{E.26})$$

$$\mathbf{v}_{N-1}^{k+1} = \gamma_{N-1} - \delta_{N-1} \mathbf{v}_N^{k+1} \quad (\text{E.27})$$

e para $1 \leq i \leq N-2$,

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \gamma_i - \delta_i \mathbf{v}_{i+1}^{k+1} - \lambda_i \mathbf{v}_{i+2}^{k+1}. \quad (\text{E.28})$$

Deste modo, os valores de $\mathbf{v}^{k+1}(\mathbf{x})$ em t_{k+1} foram conseguidos.

Apêndice F

Valores típicos dos parâmetros utilizados neste trabalho

No transcorrer deste trabalho, apareceram diversas grandezas que são características de cada material ou então do contato entre materiais. Ao longo dos capítulos adotamos valores para a densidade, a velocidade de propagação do som no meio, coeficientes de atrito e viscosidade, entre outros. Como forma de contextualizar os valores vistos nos exemplos de simulação numérica, apresentamos neste apêndice valores típicos para estas grandezas, referentes a uma série de substâncias encontradas comumente na natureza.

F.1 Densidade e velocidade de propagação do som no meio

As tabelas F1 a F4 a seguir, contém a densidade e as velocidades de propagação transversal e longitudinal para substâncias sólidas, líquidas, gasosas e também vapores. Em seguida, fornecemos tabelas análogas para líquidos e gases, onde apenas existem velocidade longitudinal.

F.2 Coeficiente de atrito

Seja um objeto que esteja inicialmente em repouso numa superfície qualquer. Este objeto não deforma esta superfície, de modo que a força normal f_n que a superfície faz no objeto apresenta o mesmo módulo do peso do objeto. Se agora for aplicado no objeto uma força F , paralela à superfície, aparece uma força de resistência f_a , na direção contrária ao do movimento deste objeto. Esta força é a força de atrito, que é proporcional ao peso do objeto. Se representarmos

Tabela F.1: Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias sólidas

Substância	ρ (kg/m ³)	$c_{\text{longitudinal}}$ (m/s)	$c_{\text{transversal}}$ (m/s)
Al	2700	6420	3040
Be	1870	12890	8880
Cu	8930	4760	2325
Au	19700	3240	1200
Fe	7900	5950	3240
Mg	1740	5770	3050
Mb	10100	6250	3350
Ni	8900	6040	3000
Pt	21400	3260	1730
Ag	10400	3650	1610
Aço	7850	5960	3235
Ti	4500	6070	3125
W	19300	5220	2890
Zn	7100	4210	2440
Si	2200	5968	3764
Pyrex	2320	5640	3280
Lucita	1180	2680	1110
Nylon	1100	2620	1070
Polietileno	900	1950	540
Poliestireno	1060	2350	1120

Tabela F.2: Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias líquidas

Substância	Fórmula química	ρ (kg/m ³)	$c_{\text{longitudinal}}$ (m/s)
acetona	C ₃ H ₆ O	790	1174
benzeno	C ₆ H ₆	870	1295
tetracloro de carbono	CCl ₄	1595	926
óleo de castor	C ₁₁ H ₁₀ O ₁₀	969	1477
clorofórmio	CHCl ₃	1490	987
etanol	C ₂ H ₆ O	790	1207
glicerol	C ₃ H ₈ O ₃	1260	1904
querosene	-	810	1324
mercúrio	Hg	13500	1450
metanol	CH ₄ O	791	1103
nitrobenzeno	C ₆ H ₅ NO ₂	1200	1463
água destilada	H ₂ O	998	1498
água do oceano	-	1025	1531

Tabela F.3: Densidade e velocidade de propagação do som para diversas substâncias no estado gasoso

Substância	Fórmula química	ρ (kg/m ³)	$c_{\text{longitudinal}}$ (m/s)
ar	-	1293	331.45
amônia	NH ₃	771	415
argônio	Ar	1783	319
monóxido de carbono	CO	1250	338
dióxido de carbono	CO ₂	1977	259
cloro	Cl ₂	3212	206
etano	C ₂ H ₆	1356	308
etileno	C ₂ H ₄	1260	317
hélio	He	178	965
hidrogênio	H ₂	89.9	1249
ácido bromídrico	HBr	3500	200
ácido clorídrico	HCl	1639	296
ácido iodídrico	HI	5660	157
ácido sulfúrico	H ₂ SO ₄	1539	289
neônio	Ne	900	435
nitrogênio	N ₂	1251	334
óxido nítrico	NO	1340	324
óxido nitroso	N ₂ O	1977	263
dióxido de enxofre	SO ₂	2927	213

Tabela F.4: Densidade e velocidade de propagação do som para diversos vapores

Substância	Fórmula química	$c_{\text{longitudinal}}$ (m/s)
acetona	C ₃ H ₆ O	234
benzeno	C ₆ H ₆	202
tetracloro de carbono	CCl ₄	145
clorofórmio	CHCl ₃	171
etanol	C ₂ H ₆ O	269
metanol	CH ₄ O	235
vapor de água	H ₂ O	494

por μ esta constante de proporcionalidade, temos

$$\mu = \frac{f_a}{f_n} . \quad (\text{F.1})$$

Este é o denominado coeficiente de atrito cinético. Como f_a e f_n são expressos na mesma unidade, o coeficiente de atrito é adimensional. Podemos classificar o atrito em duas categorias:

- Atrito de escorregamento: É a força de resistência devido ao escorregamento de uma superfície sobre outra. Essa força é devida à interação de diminutas irregularidades das superfícies de contato. A força de atrito entre duas superfícies depende de sua natureza, sendo menor para superfícies duras e polidas do que para superfícies ásperas. Também depende da força de pressão que as duas superfícies exercem, uma contra a outra, mas é aproximadamente independente da área das superfícies em contato e da velocidade relativa entre elas.
- Atrito de rolamento: É a oposição oferecida ao rolamento de um corpo sobre o outro e é, em geral, muito menor do que o atrito de escorregamento. Por esta razão, a força de atrito de escorregamento exercida sobre um eixo girando sobre mancais, pode ser reduzida instalando-se mancais de rolamento, que substituem o atrito de escorregamento por atrito de rolamento.

Percebe-se através das tabelas F5, F6 e F7, que os valores dos coeficientes de atrito variam muito de substância para substância, e também das condições de como foi feita a medida deste coeficiente. Para exemplificar, apresentamos inicialmente os valores de μ entre duas substâncias, medidas a temperatura ambiente (25 °C), sem a presença de nenhum tipo de outra substância (condição “*clean*”). A seguir, investigamos a dependência da temperatura numa mesma superfície de contato (gelo no gelo e carbetto de tungstênio no carbetto de tungstênio), também na condição *clean*. Por último, dada uma mesma temperatura e superfície de contato, apresentamos os valores do coeficiente de atrito para distintas condições de medida (*clean*, ou com a presença de substâncias lubrificantes).

F.3 Coeficiente de viscosidade

Todo fluido, gases e sólidos possuem uma resistência definida contra as variações na sua forma. Esta resistência pode ser classificada como um atrito viscoso, entretanto este tipo de atrito não segue as mesmas leis do atrito de escorregamento. A força viscosa F_{vis} , em vez de ser independente da velocidade v , lhe é proporcional, desde que a velocidade não seja alta demais.

Tabela F.5: Coeficientes de atrito para diversas substâncias - condição clean

Substâncias	μ	Substâncias	μ
Vidro no vidro	0.9 – 1.0	Safira na safira	0.2
Diamante no diamante	0.1	Safira no aço	0.15
Tungstênio no tungstênio	0.17	Mica na mica	1.0
Cristais de NaNO_3 , KNO_3 ou NH_4Cl neles mesmos	0.5	Grafite no grafite	0.1
Nylon no nylon	0.15 – 0.25	Grafite no aço	0.1
Poliestireno no poliestireno	0.30 – 0.35	Aço no aço	0.26
Polietileno no polietileno	0.2	Aço no bronze	0.12
Alumínio no alumínio	1.9	Cobre no cobre	4.0

Tabela F.6: Coeficiente de atrito, na condição clean, em função da temperatura

Gelo		Carbeto de Tungstênio	
Temperatura (°C)	μ	Temperatura (°C)	μ
0	0.02	820	0.35
- 10	0.035	970	0.40
- 20	0.050	1010	0.45
- 40	0.075	1160	0.5
- 60	0.085	1220	0.7
- 80	0.09	1440	1.2
		1600	1.8

Tabela F.7: Coeficiente de atrito, para o aço no aço sob distintas condições iniciais, a temperatura de 25 C

Lubrificante	μ	Lubrificante	μ
nonane	0.26	ácido láurico	0.11
decane	0.23	ácido mirístico	0.11
ácido acético	0.50	ácido oleico	0.08
ácido propanóico	0.40	ácido palmítico	0.11
ácido valérico	0.17	ácido esterárico	0.10
ácido capróico	0.12	óleo rape	0.14
ácido pelargônico	0.11	óleo mineral	0.16
ácido cáprico	0.11	óleo de castor	0.12

Em velocidades muito grandes, a força pode crescer com o quadrado ou outra potência mais alta, da velocidade. De modo geral, temos que

$$\vec{F}_{vis} = \xi \mathbf{A}_t \vec{\nabla} \mathbf{v}, \quad (\text{F.2})$$

em que \mathbf{A}_t é a área transversal ao escoamento do fluido, e ξ é o coeficiente de viscosidade. Este coeficiente apresenta dimensões de kg.m/s no sistema internacional e no CGS, este coeficiente é expresso em poise (1 poise = 1 dina.seg/cm²).

Para calcularmos o coeficiente de viscosidade, utilizamos a lei de Poiseuille, que diz que a vazão de um fluido viscoso em uma tubulação é diretamente proporcional a diferença de pressão $\Delta\Phi$ entre os extremos, e a quarta potência do raio R do tubo. A vazão também é inversamente proporcional ao coeficiente de viscosidade e também ao comprimento do tubo L . Considerando um elemento de volume de fluido, de raio r , escoando sem turbulências em um tubo cilíndrico, esta lei é encontrada, quando balanceamos a força viscosa com a diferença de pressão entre as extremidades do tubo, multiplicada pela área da secção reta do tubo:

$$\Delta\Phi \pi r^2 = -\xi \mathbf{A}_t \partial_r \mathbf{v}. \quad (\text{F.3})$$

Sendo $\mathbf{A}_t = 2\pi r L$, e uma vez que em $r = R$, a velocidade $\mathbf{v} = 0$, temos, integrando a equação anterior

$$\mathbf{v} = \frac{\Delta\Phi}{4\xi L} (R^2 - r^2). \quad (\text{F.4})$$

Deste modo, a velocidade do fluido aumenta de forma parabólica com o decréscimo do raio, atingindo seu máximo no centro da tubulação.

O elemento de vazão dQ deste fluido, que escoo no tubo circular é dado por

$$dQ = \mathbf{v} d\mathbf{A}_t = 2\pi \mathbf{v} L dr, \quad (\text{F.5})$$

o que resulta na lei de Poiseuille

$$Q = \frac{\pi \Delta\Phi}{8\xi L} R^4. \quad (\text{F.6})$$

Como todos os parâmetros podem ser medidos, o coeficiente de viscosidade pode ser assim, determinado. Aplicando-se esta lei, podemos encontrar os valores de ξ em centipoise (cpoise) para diversos óleos e ácidos, como apresentado nas tabelas F.8 e F.9

O coeficiente de viscosidade depende de uma série de fatores internos que, muitas vezes, provocam drásticas mudanças em seu valor. Como um exemplo disso, considere o caso do mel de abelha: Quando é extraído, o mel é um fluido viscoso. Sua viscosidade depende de uma série

Tabela F.8: Coeficiente de viscosidade para oleos, sob distintos valores de temperatura

Óleo	ξ (cpoise)	T (°C)	Óleo	ξ (cpoise)	T (°C)
Castor	2420	10	Rape	2530	0
	986	20		385	10
	451	30		163	20
	231	40		96	30
	16.9	100	Soja	69.3	20
Linóleo	33.1	30		40.6	30
	17.6	50		20.6	50
	7.1	90	7.8	90	
Oliva	138.0	10	Máquina leve	113.8	15.6
	84.0	20		34.2	37.8
	36.3	40		4.9	100
	12.4	70	Máquina pesada	660.6	15.6
Algodão	70.4	20		127.4	37.8

Tabela F.9: Coeficiente de viscosidade para ácidos, sob distintos valores de temperatura

Ácido	ξ (cpoise)	T (°C)	Ácido	ξ (cpoise)	T (°C)
acético	1.31	15	salicílico	3.20	10
	1.30	18		2.71	20
	1.155	25.2		1.81	40
	1.04	30	sulfúrico	48.4	0
	1.00	41		32.8	15
	0.70	59		25.4	20
	0.60	70		15.7	30
0.43	100	11.5	40		
fórmico	2.38	7.59		8.82	50
	2.62	10		7.22	60
	1.81	20		6.09	70
	1.46	30		5.19	80
	1.22	40	esteriático	11.6	70
0.78	70	propinóico	1.89	10	
0.55	100		1.18	15	
nítrico	2.28	0		1.10	20
	1.77	10		0.85	40

Tabela F.10: a)Variação da viscosidade do mel tipo "white clover" a 250 C de acordo com a porcentagem de água presente b)Variação da viscosidade do mel tipo "sweet clover"contendo 16.1de água, de acordo com a temperatura (Munro, 1943).

tipo de mel		tipo de mel	
<i>white clover</i>	a 250 °C	<i>sweet clover</i>	com 16.5% de H ₂ O
% em água	ξ (poise)	T (°C)	ξ (poise)
13.7	420	13.7	600.0
15.5	138	20.6	189.6
18.2	48	29.0	68.4
20.2	20	39.4	21.4
		48.1	10.7
		71.1	2.6

Tabela F.11: Variação da viscosidade com relação a sua origem botânica).

Tipo de mel	ξ (poise)
<i>Sage</i>	115
<i>White clover</i>	94
<i>Sweet clover</i>	87

de fatores, dentre os quais destacam-se a porcentagem de água e a temperatura (veja tabela F.10).

A viscosidade é um parâmetro técnico muito importante durante o processo de extração, bombeamento, filtração, mistura e engarrafamento. O aumento de temperatura para diminuir a viscosidade do mel, durante o processo de engarrafamento é um processo largamente explorado na indústria. Alguns tipos de mel, apresentam propriedades peculiares: Heather (*Calluna vulgaris*), Manuka (*Leptospermum scoparium*) e Carvia callosa são extremamente viscosos, quase gel, porém tornam-se líquidos quando agitados. Em contraste, o mel de eucalipto apresenta a característica oposta, ou seja, sua viscosidade aumenta com a agitação.

As tabelas F12 a F14 mostra alguns valores de viscosidade para diversas substâncias, em micropoise (μ poise) e em centipoise:

F.4 A razão entre os calores específicos γ e a teoria cinética dos gases

Em uma molécula de gás, sua energia total consiste numa somatória de diferentes tipos de energia. No caso de utilizarmos o formalismo quântico, esta energia é proporcional a somatória dos modos normais possíveis em cada molécula. Temos então os modos normais de translação,

Tabela F.12: Coeficiente de viscosidade para o ar, sob distintos valores de temperatura

ξ (μpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)	ξ (μpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)
55.1	-194.2	341.3	409
62.7	-183.1	350.1	466
113.0	-104.0	358.3	481
133.3	-69.4	368.6	537
153.9	-31.6	375.0	565
170.8	0	391.6	620
182.7	18	401.4	638
190.4	40	426.3	750
195.8	54	441.9	810
210.2	74	464.3	923
263.8	229	490.6	1034
312.3	334	520.6	1134
317.5	357		

Tabela F.13: Coeficiente de viscosidade para o etileno e para o neônio, sob distintos valores de temperatura

Etileno		Neônio	
ξ (μpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)	ξ (μpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)
69.9	-75.7	297.3	0
76.9	-44.1	311.1	20
78.5	-38.6	364.6	100
90.7	0	424.8	200
95.4	13.8	453.2	250
100.8	20	470.8	285
110.3	50	545.4	429
125.7	100	580.2	502
140.3	150	623.0	594
154.1	200	662.6	686
166.6	250	721.0	827

Tabela F.14: Coeficiente de viscosidade para o álcool etílico, sob distintos valores de temperatura

ξ (cpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)	ξ (cpoise)	T ($^{\circ}\text{C}$)
44.0	-98.11	1.773	0
28.4	-89.8	1.466	10
13.2	-71.5	1.200	20
8.41	-59.42	1.003	30
6.87	-52.58	0.834	40
3.84	-32.01	0.702	50
2.68	-17.59	0.592	60
1.80	-0.30	0.504	70

rotação da molécula, vibração de cada átomo, bem como os modos de excitação eletrônico e nucleares dos átomos que constituem a molécula. Cada um destes modos normais nos fornece uma forma distinta de energia, que são relacionadas aos graus de liberdade que uma molécula pode ter. Por simplicidade, assumiremos que todos estes possíveis modos são independentes entre si, que as colisões entre moléculas não são suficientes para acoplar os modos internos, e que os modos eletrônicos e nucleares são desprezíveis frente aos modos de translação, vibração e de rotação.

Para definir-se o movimento de translação do centro de massa de uma molécula, deve-se conhecer as componentes da velocidade segundo três eixos ortogonais, e diz-se então que a molécula possui três graus de liberdade translacionais. Define-se igualmente, o movimento rotacional por meio das componentes do vetor velocidade angular, segundo três eixos, e diz-se portanto que a molécula pode também ter três graus de liberdade rotacional. A energia total de uma molécula distribui-se de uma maneira desconhecida entre esses graus de liberdade, e a hipótese mais simples é que a energia se distribua igualmente pelos vários graus de liberdade ℓ . Essa hipótese é denominada de princípio da equipartição da energia. Para uma molécula isolada, temos que a energia total é $\frac{1}{2} \ell k_b T$, sendo $k_b = 1.37 \times 10^{-6}$ ergs/átomo.K é a denominada constante de Boltzmann. No caso do sistema possuir N moléculas, a energia total U é

$$U = \frac{1}{2} n \ell R T , \quad (\text{F.7})$$

onde $n = N/6.023 \times 10^{23}$ é o número de moles do gás, e $R = 6.023 \times 10^{23} k_b$, a constante universal dos gases perfeitos.

Definindo o calor específico molecular C , como sendo o calor necessário para elevar a temperatura de um grau, 1 mol deste gás, temos:

$$C = n^{-1} \partial_{\mathbf{T}} Q . \quad (\text{F.8})$$

sendo Q o calor recebido pelo gás, durante uma variação de temperatura.

De acordo com a primeira lei da termodinâmica, o diferencial de calor dQ é igual a soma da variação da sua energia interna dU com o trabalho mecânico realizado no processo $dW = \Phi dV$:

$$dQ = dU + \Phi dV . \quad (\text{F.9})$$

Deste modo, podemos definir os calores específicos a volume e a pressão constantes, dados

respectivamente por

$$C_v = n^{-1} \partial_T U, \quad (\text{F.10})$$

$$C_\Phi = C_v + n^{-1} \Phi \partial_T V. \quad (\text{F.11})$$

Passamos agora a calcular estes coeficientes para o caso dos gases ideais e do gás de Van der Waals:

- **Gases ideais:** Utilizando a eq. (F.9), e a equação de Claperyon para uma transformação a pressão constante, $\Phi dV = nR dT$, temos que:

$$C_v = \frac{1}{2} \ell R, \quad (\text{F.12})$$

$$C_\Phi = C_v + R. \quad (\text{F.13})$$

Deste modo, com o auxílio do modelo cinético de um gás perfeito e da hipótese de equipartição da energia, podemos exprimir C_v e C_Φ em função do número de graus de liberdade do sistema. Com as eqs. (F.12) e (F.13), o coeficiente γ é determinado por:

$$\gamma = \frac{C_\Phi}{C_v} = 1 + \frac{2}{\ell}. \quad (\text{F.14})$$

Para gases monoatômicos, podemos esperar que seu comportamento seja muito semelhante ao de pontos geométricos dotados de apenas três graus de liberdade translacional. Fazendo $\ell = 3$, temos que $\gamma = 5/3 \cong 1.667$. Aqui, ressaltamos a eliminação da possibilidade de uma molécula monoatômica efetuar movimento de rotação. Realmente ela poderia girar em torno de qualquer um dos três eixos perpendiculares entre si, se tivesse extensão, tal como uma esfera de dimensões finitas. Por esse motivo foi adotada a imagem de um ponto material como modelo de uma molécula monoatômica. Para gases diatômicos, pode-se imaginar que estes possuam seis graus de liberdade: três de translação e três de rotação. Entretanto, o momento de inércia de uma molécula diatômica em relação a um eixo ligando seus átomos é muito menor do que o momento de inércia em relação aos eixos perpendiculares a esta direção. Assim, apenas dois dos três possíveis graus de liberdade rotacional parecem efetivamente compartilhar a energia. Portanto, fazendo-se $\ell = 5$, chegamos a $\gamma = 7/5 = 1.4$. Nos gases poliatômicos (3 ou mais átomos), onde predominam os movimentos de rotação e translação, temos $\ell = 6$, chegamos a $\gamma = 4/3 \cong 1.333$.

- **Gás de Van der Waals:** Conforme os gases vão se tornando mais densos, as frações das moléculas que ocupam um certo recipiente passa a ser relevante, bem como que as

forças moleculares deixam de ser desprezíveis. O físico J. D. Van der Waals deduziu uma equação de estado modificada que leva em conta esses fatores, numa forma simples:

$$\left(\Phi + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = n R T, \quad (\text{F.15})$$

sendo as constantes a e b , determinadas através de experiências sobre o gás considerado, e sob esse aspecto, a equação de Van der Waals é empírica. Para uma dada temperatura, denominada de temperatura crítica T_{cr} , o gráfico pressão \times volume apresenta um ponto de inflexão. Neste ponto, $\partial_V \Phi$ e $\partial_V^2 \Phi$ são nulos,

$$\partial_V \Phi = -\frac{nRT}{(V-b)^2} + \frac{2a}{V^3} = 0, \quad (\text{F.16})$$

$$\partial_V^2 \Phi = \frac{2nRT}{(V-b)^3} - \frac{6a}{V^4} = 0, \quad (\text{F.17})$$

o que nos fornece:

$$T_{cr} = \frac{8a}{27bR}, \quad (\text{F.18})$$

e resulta nos seguintes valores críticos de volume e pressão:

$$V_{cr} = 3b, \quad (\text{F.19})$$

$$\Phi_{cr} = \frac{a}{27b^2}. \quad (\text{F.20})$$

Utilizando o gás de Van der Waals, as expressões para C_V e C_Φ em função do número de graus de liberdade do sistema é dada por

$$C_V = \frac{1}{2} \ell R, \quad (\text{F.21})$$

$$C_\Phi = C_V + R \left(1 + \frac{a}{V^2 \Phi} - \frac{2ab}{V^3 \Phi}\right), \quad (\text{F.22})$$

e conseqüentemente

$$\gamma = 1 + \frac{2}{\ell} \left(1 + \frac{a}{V^2 \Phi} - \frac{2ab}{V^3 \Phi}\right). \quad (\text{F.23})$$

Com este modelo, os valores de C_Φ e γ mudam de gás para gás, aumentando o leque de possíveis valores para os gases monoatômicos, diatômicos e poliatômicos.

Observa-se experimentalmente que na maioria dos gases monoatômicos e diatômicos, os valores de C_V , C_Φ e γ , são próximos para o obtido para o gás perfeito. Somente em alguns

gases diatômicos, como o cloro, e na maioria dos gases poliatômicos, os calores específicos, bem como sua razão γ , apresentam valores maiores do que os previstos. Tudo isto leva-nos a concluir que devemos incluir os graus de liberdade relativos ao movimento vibracional dos átomos. Isto melhora muito os resultados obtidos na maioria dos casos. Entretanto, para moléculas poliatômicas, os graus de liberdade vibracionais vão depender da estrutura da molécula e do tipo de ligação química, e assim, devemos analisar os graus de liberdade caso a caso. Entretanto, existe uma tendência geral de forma que a razão $\gamma \rightarrow 1$, a medida que o número de moléculas do gás aumenta.