

Mecânica Clássica Computacional - 7600033 - 1S/2023

Projeto 4: Sólitons

Descrição

Discutiremos nesse projeto métodos de solução de equações diferenciais parciais não-lineares dependentes do tempo. Em particular, a equação de KdV e a formação de sólitons. Como referência, veja o capítulo 19 do Landau & Páez & Bordeianu.

1. A equação de advecção em $d = 1$

Considere a equação de advecção (ou equação de Burgers)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\epsilon \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

definida em $x \in [0, 1]$, com a condição de contorno $u(0, t) = u(1, t) = 0$, e ϵ sendo uma constante. O nosso objetivo é discretizar $u(x, t) \rightarrow u_{j,i}$ utilizando o método de “leapfrog” com $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i-1}}{2\Delta t}$ e $\frac{\partial u^2}{\partial x} = \frac{u_{j+1,i}^2 - u_{j-1,i}^2}{2\Delta x}$. Dessa forma, a Eq. (1) se torna

$$u_{j,i+1} = u_{j,i-1} - \frac{1}{2}\beta (u_{j+1,i}^2 - u_{j-1,i}^2), \quad (2)$$

onde $\beta = \frac{\epsilon\Delta t}{\Delta x}$ é conhecido como o número de Courant–Friedrichs–Lewy. A Eq. (2) nos dá a evolução temporal discreta de $u(x, t)$ dada a condição inicial $u(x, 0)$ desde que a não-linearidade da equação não cause instabilidade, ou seja, desde que β seja suficientemente pequeno (menor que 1). Evidentemente, somente a condição inicial não é suficiente para iterar (2) porque não temos $u(x, \Delta t)$. Para isso, usamos a derivada para frente $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{\Delta t}$ e, portanto, $u_{j,2} = u_{j,1} - \beta (u_{j+1,1}^2 - u_{j-1,1}^2)$.

Alternativamente, podemos utilizar uma melhor aproximação através do método de Lax-Wendroff. Considere a aproximação até segunda ordem em Δt :

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} (\Delta t)^2.$$

O objetivo agora é substituir as derivadas temporais por espaciais através da equação de advecção (1). Logo,

$$\begin{aligned} u(x, t + \Delta t) &= u(x, t) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \Delta t - \frac{\epsilon}{4} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u^2}{\partial x} \right) (\Delta t)^2 \\ &= u(x, t) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \Delta t - \frac{\epsilon}{4} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^2}{\partial t} \right) (\Delta t)^2 \\ &= u(x, t) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \Delta t - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u}{\partial t} \right) (\Delta t)^2 \\ &= u(x, t) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} \Delta t + \frac{\epsilon^2}{4} \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u^2}{\partial x} \right) (\Delta t)^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Nosso trabalho agora é discretizar (3). Como no método de “leapfrog”, vamos tomar a derivada central para as derivadas exteriores. Para a primeira, o intervalo continua sendo Δx . Por conveniência, o intervalo é $\frac{1}{2}\Delta x$ para a segunda. Logo,

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} - \frac{1}{4}\beta (u_{j+1,i}^2 - u_{j-1,i}^2) + \frac{\beta^2}{4} \Delta x \left(u_{j+\frac{1}{2},i} \frac{\partial u_{j+\frac{1}{2},i}^2}{\partial x} - u_{j-\frac{1}{2},i} \frac{\partial u_{j-\frac{1}{2},i}^2}{\partial x} \right).$$

Agora substitui-se o valor de u nos pontos “intermediários” pela média de u nos pontos adjacentes, ou seja, $2u_{j+\frac{1}{2},i} = u_{j+1,i} + u_{j,i}$ e $2u_{j-\frac{1}{2},i} = u_{j,i} + u_{j-1,i}$. Com relação às derivadas, procedemos da mesma maneira

utilizando a derivada central com intervalo igual a $\frac{1}{2}\Delta x$, ou seja, $\frac{\partial u_{j+\frac{1}{2},i}^2}{\partial x} = \frac{u_{j+1,i}^2 - u_{j,i}^2}{\Delta x}$ e $\frac{\partial u_{j-\frac{1}{2},i}^2}{\partial x} = \frac{u_{j,i}^2 - u_{j-1,i}^2}{\Delta x}$. Finalmente,

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} - \frac{1}{4}\beta (u_{j+1,i}^2 - u_{j-1,i}^2) + \frac{1}{8}\beta^2 [(u_{j+1,i} + u_{j,i})(u_{j+1,i}^2 - u_{j,i}^2) - (u_{j,i} + u_{j-1,i})(u_{j,i}^2 - u_{j-1,i}^2)]. \quad (4)$$

- (a) Escreva um programa que implemente numericamente o método de “leapfrog” (2) e de Lax-Wendroff (4) para a equação de advecção (1) no domínio e com as condições de contorno correspondentes.
- (b) Utilizando $N_x = 100$ e condição inicial $u(x, 0) = \sin(2\pi x)$, evolua $u(x, t)$ até tempos onde a onda de choque se forma. (Faça um gráfico com $u(x, t)$ para os instantes de tempo inicial e final juntamente com alguns instantes de tempo intermediários para visualização gráfica da formação da onda de choque.) O que você conclui sobre as ondulações observadas para longos tempos?
- (c) Repita o item anterior para $u(x, 0) = Ae^{-\left(\frac{x-1/2}{a}\right)^2}$ com alguns valores distintos de A e a . (Sua escolha deve permitir a visualização da formação da onda de choque.) Descreva como a onda dispersa quantificando $\sigma_x(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ como função do tempo, onde $\langle x^n \rangle(t) = \int_0^1 x^n u(x, t) dt / \int_0^1 u(x, t) dt$. Faça o seu estudo para diferentes valores de a e ϵ .
- (d) A condição de $\beta < 1$ é correta para a estabilidade desse problema não-linear? Note que obter uma melhor precisão espacial (diminuindo Δx) tem que vir acompanhada de uma melhor precisão temporal Δt equivalente a fim de manter o mesmo parâmetro β de estabilidade.

2. Dispersão de onda em $d = 1$

Considere a equação de onda dispersiva

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (5)$$

definida em $x \in [0, 1]$ Utilizando as derivadas centrais $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i-1}}{2\Delta t}$ e $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = \frac{u_{j+2,i} - 2u_{j+1,i} + 2u_{j-1,i} - u_{j-2,i}}{2\Delta x^3}$, encontramos que

$$u_{j,i+1} = u_{j,i-1} - \gamma(u_{j+2,i} - 2u_{j+1,i} + 2u_{j-1,i} - u_{j-2,i}), \quad (6)$$

onde $\gamma = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^3}$. Para $u_{1,i}$, $u_{2,i}$, $u_{N_x-1,i}$ e $u_{N_x,i}$, a derivada central não é bem determinada. Para estes casos, considere as derivadas para frente (e para trás) $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = \frac{u_{j\pm 3,i} - 3u_{j\pm 2,i} + 3u_{j\pm 1,i} - u_{j,i}}{\pm \Delta x^3}$, ou seja, $u_{(1,2),i+1} = u_{(1,2),i-1} - 2\gamma(u_{(4,5),i} - 3u_{(3,4),i} + 3u_{(2,3),i} - u_{(1,2),i})$ e $u_{(N_x-1,N_x),i+1} = u_{(N_x-1,N_x),i-1} + 2\gamma(u_{(N_x-4,N_x-3),i} - 3u_{(N_x-3,N_x-2),i} + 3u_{(N_x-2,N_x-1),i} - u_{(N_x-1,N_x),i})$. Entretanto, para melhor estabilidade numérica e por simplicidade (válida se a onda não dispersa até as bordas durante o tempo de simulação), considere a condição de contorno $u_{j,i} = u_{j,1}$ para $j = 1, 2, N_x - 1$ e N_x . Finalmente, a evolução temporal só fica bem determinada quando definirmos $u(x, \Delta t)$. Como no problema anterior, precisamos retificar a derivada temporal central para a derivada para frente. Neste caso, a Eq. (6) se torna $u_{j,i+1} = u_{j,i} - \frac{1}{2}\gamma(u_{j+2,i} - 2u_{j+1,i} + 2u_{j-1,i} - u_{j-2,i})$.

- (a) Escreva um programa que implemente a Eq. (6) para a condição inicial $u(x, 0) = Ae^{-\left(\frac{x-1/2}{a}\right)^2}$.
- (b) Utilize $N_x = 100$ e escolha alguns valores de a em torno de $10^{-3/2}$ e A em torno de 1. Evolua $u(x, t)$ até tempos onde a dispersão da onda seja apreciável no intervalo $[0, 1]$. (Faça um gráfico com $u(x, t)$ para os instantes de tempo inicial e final juntamente com alguns instantes de tempo intermediários. Escolha alguns valores de γ , e conseqüentemente de Δt , adequados. O que muda quando $\gamma \rightarrow -\gamma$?)
- (c) Descreva como a onda dispersa quantificando $\sigma_x(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ como função do tempo, onde $\langle x^n \rangle(t) = \int_0^1 x^n u(x, t) dt / \int_0^1 u(x, t) dt$. Faça o seu estudo para diferentes valores de a e ϵ .
- (d) O que acontece para tempos muito longos?

3. A equação KdV em $d = 1$

Considere a equação diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \epsilon u \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad (7)$$

que leva em conta o termo advectivo não-linear de (1) e dispersivo de (5). A estratégia para transformar (7) em uma equação iterativa é similar às usadas nos problemas anteriores. Usando as derivadas centrais, temos que

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i-1}}{2\Delta t} + \epsilon u(x, t) \frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta x} + \alpha \frac{u_{j+2,i} - 2u_{j+1,i} + 2u_{j-1,i} - u_{j-2,i}}{2\Delta x^3} = 0.$$

Para maior estabilidade, verifica-se que substituir $u(x, t)$ no segundo termo pela média $\frac{1}{3}(u_{j+1,i} + u_{j,i} + u_{j-1,i})$ é uma melhor estratégia do que simplesmente substituir por $u_{j,i}$. Finalmente,

$$u_{j,i+1} = u_{j,i-1} - \frac{1}{3}\beta(u_{j+1,i} + u_{j,i} + u_{j-1,i})(u_{j+1,i} - u_{j-1,i}) - \gamma(u_{j+2,i} - 2u_{j+1,i} + 2u_{j-1,i} - u_{j-2,i}). \quad (8)$$

Evidentemente, como em (2), o algoritmo necessita que $u_{j,2}$ seja definido. Para isso, usamos a derivada para frente obtendo $u_{j,2} = u_{j,1} - \frac{1}{6}\beta(u_{j+1,1} + u_{j,1} + u_{j-1,1})(u_{j+1,1} - u_{j-1,1}) - \frac{1}{2}\gamma(u_{j+2,1} - 2u_{j+1,1} + 2u_{j-1,1} - u_{j-2,1})$. Além disso, como discutido após (6), a Eq. (8) não é bem definida para $j = 1, 2, N_x - 1$ e N_x . Para esses sítios, as derivadas para frente e para trás devem ser usadas, e portanto, (8) se torna $u_{j,i+1} = u_{j,i-1} - \frac{1}{3}\beta(u_{j+1,i} + u_{j,i} + u_{j-1,i})(u_{j+1,i} - u_{j-1,i}) \mp 2\gamma(u_{j\pm 3,i} - 3u_{j\pm 2,i} + 3u_{j\pm 1,i} - u_{j,i})$. Entretanto, como no caso da equação dispersiva, considere a condição de contorno mais simples em que $u_{j,i} = u_{j,1}$ para $j = 1, 2, N_x - 1$ e N_x .

- (a) Escreva um programa que implemente (8) para $N_x = 100$.
- (b) Utilizando $u(x, 0) = A \left(1 - \tanh\left(\frac{x-1/4}{a}\right)\right)$, β em torno de 0.03 e γ em torno de 0.06, evolua $u(x, t)$ até tempos suficientemente longos para verificar a formação de uma onda de choque que se quebra em diferentes sólitons com velocidades distintas dependentes da amplitude u_{\max} . (Escolha convenientemente alguns valores de A e a obedecendo a condição de estabilidade $|u\beta| + 4|\gamma| < 1$.)
- (c) Utilizando $\beta = 0.03$ e $\gamma = 0.06$, verifique que $u_1(x, 0) = 3\text{sech}^2\left(\frac{1}{2}\sqrt{5000}\left(x - \frac{1}{2}\right)\right)$ é aproximadamente um sóliton para tempos até $N_t = 600$. Verifique que $u_2(x, 0) = 12\text{sech}^2\left(\sqrt{5000}\left(x - \frac{1}{4}\right)\right)$ também um sóliton em boa aproximação. Evolua $u_{1,2}(x, t)$ e faça gráficos de contorno para melhor visualização. Além disso, faça um gráfico de $\langle x \rangle(t)$ e $\sigma_x(t)$ para as ondas $u_1(x, t)$ e $u_2(x, t)$.
- (d) Estude a colisão dos sólitons u_1 e u_2 . Para isso, evolua $u(x, t)$ onde $u(x, 0) = u_1(x, 0) + u_2(x, 0)$. Faça um gráfico de contorno para visualizar a colisão. Os sólitons se dispersam? Eles interagem entre si? Em caso afirmativo, descreva e, se possível, quantifique essa interação.
- (e) **(Opcional)** Modifique os parâmetros β e γ e ache outros sólitons. (É possível sólitons com velocidade negativa?) Construa o espaço de fases correspondente $\dot{u}(x^*, t) \times u(x^*, t)$ onde x^* é uma posição suficientemente à frente da onda inicial e o tempo de simulação deve ser tal que permita que a onda passe completamente por x^* .

Detalhes

A. Ondas de choque unidimensionais via a equação de Burgers

Durante o escoamento de um fluido, a equação de conservação de massa é a equação de continuidade $\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$, onde $\rho \equiv \rho(\vec{r}, t)$ é a densidade de fluido e $\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho \vec{c}(\vec{r}, t)$ é a corrente de massa (com \vec{c} sendo o campo de velocidades do fluido). Em $d = 1$, a equação de continuidade lê

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (c\rho) = 0. \quad (9)$$

Note que essa equação admite ondas propagantes caso c seja constante, i.e., $\rho = \rho(x - ct)$ é solução de (9). Por esse motivo, a partir de agora iremos interpretar (9) como uma equação de onda propagante.

Caso a velocidade de fase seja dependente da amplitude da onda $c = c_0 + \frac{1}{2}\epsilon(\rho - \rho_0)$, então (9) torna-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + c_0 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} (\rho - \rho_0) \rho \right) = \frac{\partial u}{\partial t} + \tilde{c} \frac{\partial u}{\partial x} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} u^2 \right) = 0,$$

onde $u(x, t) = \rho(x, t) - \rho_0$ e $\tilde{c} = c_0 + \frac{1}{2}\epsilon\rho_0$. Para $\epsilon = 0$, $u(x, t) = u(x - \tilde{c}t)$, por esse motivo, é interessante estudar o fenômeno no referencial desta onda. A transformação Galileana correspondente é

$$X = x - \tilde{c}t \text{ e } T = t. \quad (10)$$

Logo, $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial X}{\partial t} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial T}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T} = -\tilde{c} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial T}$ e $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X}$. Sendo assim, a Eq. (9) se torna a equação de advecção (1)

$$\frac{\partial u}{\partial T} + \epsilon \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{1}{2} u^2 \right) = 0.$$

Para $\epsilon = 0$, a solução é $u = u(X) = u(x - c_0t)$ como esperado. Para $\epsilon > 0$, entretanto, uma onda com um certo perfil de densidade muda ao longo do tempo porque regiões de maior densidade se propagam com maior velocidade formando uma onda de choque com a frente de onda possuindo alta densidade formando uma derivada infinita como quando da quebra de uma onda no mar perto da costa.

B. Ondas dispersivas unidimensionais

Ondas localizadas propagantes geralmente se dispersam porque a velocidade de fase depende do comprimento de onda. Matematicamente, uma possível modelagem da dispersão são termos de derivadas superiores na equação de onda. Para isso, considere a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \tilde{c} \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0. \quad (11)$$

Para verificar que essa equação modela um meio dispersivo, considere a onda plana $u_{\text{plana}} = e^{i(kx - \omega t)}$. Substituindo u_{plana} em (11), encontramos a relação de dispersão

$$\omega = \tilde{c}k \left(1 - \frac{\alpha}{\tilde{c}} k^2 \right).$$

Note que a velocidade de grupo $c_g = \frac{d\omega}{dk}$ é distinta da velocidade de fase $c_f = \frac{\omega}{k}$. No meios em que $\alpha > 0$, a velocidade de fase é maior que a de grupo $c_f > c_g$ e são conhecidos por meios dispersivos normais. Caso $\alpha = 0$, as velocidades de fase e grupo são iguais independentes do comprimento de onda. Esses são os meios não dispersivos. Finalmente, os meios dispersivos anômalos são aqueles em que $\alpha < 0$ e a velocidade de grupo é maior que a de fase $c_g > c_f$.

Finalmente, o fenômeno de dispersão pode ser estudado no referencial da onda dispersiva que se propaga com velocidade constante \tilde{c} . Aplicando a transformação (10), (11) se torna a Eq. (5)

$$\frac{\partial u}{\partial T} + \alpha \frac{\partial^3 u}{\partial X^3} = 0.$$

Dado que $u(X, 0)$ é um trem de onda localizado, a equação (5) descreve esse trem se dispersando ao longo do tempo independente do valor (positivo ou negativo) de α tão logo $\alpha \neq 0$.

C. A equação de Korteweg e deVries (KdV) unidimensional

Incorporando o termo não linear da velocidade de fase se dependente da amplitude da onda $c = c_0 + \epsilon u$ em um meio dispersivo (onde a velocidade de fase depende do comprimento da onda), a equação de onda no referencial da onda não dispersiva é a Eq. (7)

$$\frac{\partial u}{\partial T} + \epsilon \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{1}{2} u^2 \right) + \alpha \frac{\partial^3 u}{\partial X^3} = 0.$$

Essa equação pode ser estudada em termos de unidades adimensionais. Definindo $u = A\psi$, $t = T/\tau$ e $x = X/\xi$ com A , τ e ξ constantes, então

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \left(\frac{\epsilon \tau A}{\xi} \right) \psi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \left(\frac{\alpha \tau}{\xi^3} \right) \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + 6\psi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} = 0, \quad (12)$$

onde definimos, por conveniência, que $\frac{\epsilon \tau A}{\xi} = 6$ e $\frac{\alpha \tau}{\xi^3} = 1$. (Note que há uma grande liberdade na escolha dos parâmetros.)

O termo dispersivo promove um alargamento da função de onda que compete com o termo não linear que promove altas derivadas (onda de choque). Se as condições iniciais forem corretas, pode ser que uma onda não dispersiva propagante seja estável nesse meio não-linear dispersivo. Para explorar essa possibilidade, vamos verificar a possibilidade de uma onda propagante $\psi(x, t) \equiv \psi(x - ct) = \psi(\zeta)$ ser solução de (12). Logo,

$$-c \frac{d\psi}{d\zeta} + 6\psi \frac{d\psi}{d\zeta} + \frac{d^3\psi}{d\zeta^3} = 0, \quad \ddot{\psi} = c\psi - 3\psi^2 + D, \quad (13)$$

onde a segunda igualdade foi obtida integrando a primeira, D é uma constante de integração e $\ddot{\psi} = \frac{d^2\psi}{d\zeta^2}$. Note que (13) é similar à equação de Newton de uma partícula pontual de massa $m = 1$ se propagando num potencial conservativo

$$V(\psi) = \psi^3 - \frac{1}{2}c\psi^2 - D\psi. \quad (14)$$

Vamos então considerar o caso interessante em que $D = 0$ e a energia total do sistema é $E = 0_-$ e a posição da partícula em $\zeta \rightarrow -\infty$ é $\psi = 0_+$. Note que o potencial admite um ponto de máximo em $\psi = 0$. Como $E = 0_-$ e $\psi(-\infty) = 0_+$, então a partícula sai de $\psi = 0$ em $\zeta \rightarrow -\infty$, se propaga até $\psi = c/2$ em $\zeta = \zeta_0$ (o ponto de retorno) e volta para $\psi = 0_+$ em $\zeta \rightarrow \infty$. Na linguagem de ondas, essa é uma onda localizada em torno de $\zeta = \zeta_0$ com $\psi(\pm\infty) \rightarrow 0$. Para descobrir $\psi(\zeta)$, usamos o fato de que a energia é conservada:

$$E = \frac{1}{2}\dot{\psi}^2 + \psi^3 - \frac{1}{2}c\psi^2 = 0, \Rightarrow \int_{\psi}^{\frac{c}{2}} \frac{d\psi}{\psi\sqrt{1-2\psi/c}} = \sqrt{c} \int_{\zeta}^{\zeta_0} d\zeta, \Rightarrow 2 \ln \left(1 + \sqrt{1 - \frac{2\psi}{c}} \right) - \ln \left(\frac{2\psi}{c} \right) = \sqrt{c}(\zeta - \zeta_0),$$

onde ζ_0 é tal que quando ψ é máximo igual a $c/2$, então $\zeta = \zeta_0$. Invertendo para ψ , finalmente encontramos a onda solitária

$$\psi(x, t) = \left(\frac{c}{2} \right) \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{\sqrt{c}}{2} (x - ct - \zeta_0) \right)}. \quad (15)$$

Note que, quanto maior a velocidade da onda c , maior sua amplitude e menor a sua dispersão $\sigma_x = \pi/\sqrt{3\sqrt{c}}$.