AULAS 21 E 22: FIS271 - Física Computacional I

Segundo a 2ª Lei de Newton sabemos que, uma vez definidas a força resultante $\vec{F}$, a posição $\vec{r}(0)$ e a velocidade $\vec{v}(0)$ de uma partícula no instante inicial $t_0 = 0\,\mathrm{s}$, a sua velocidade $\vec{v}(t_{n+1})$ e posição $\vec{r}(t_{n+1})$ em um tempo posterior $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, podem ser obtidas por integração numérica da aceleração resultante

$$\vec{a}(t_n) = \frac{\vec{F}(t_n)}{m} \quad , \tag{1}$$

com m sendo a massa da partícula. A partir da trajetória da partícula é possível monitorar diversas quantidades de interesse, por exemplo, a energia mecânica total $E = K + U$, onde as contribuições cinética e potencial são dadas respectivamente por $K = p^2/2m$, com $\vec{p} = m\vec{v}$, e $U = U(\vec{r})$. A princípio, podemos assumir uma força constante se o intervalo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ é pequeno, e com isso considerar as seguintes expressões (método de Euler):

$$\vec{v}(t_{n+1}) = \vec{v}(t_n) + \vec{a}(t_n)\Delta t \qquad \text{e} \qquad \vec{r}(t_{n+1}) = \vec{r}(t_n) + \vec{v}(t_n)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t_n)\Delta t^2 \quad . \tag{2}$$

Porém, aqui vamos implementar o algoritmo de **Verlet (original)**, onde consideramos $\vec{r}(t_{n+1})$ e $\vec{r}(t_{n-1})$ da expressão acima para obter a relação

$$\vec{r}(t_{n+1}) = 2\vec{r}(t_n) - \vec{r}(t_{n-1}) + \vec{a}(t_n)\Delta t^2 \qquad + \quad \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad , \tag{3}$$

a qual pode ser reescrita como

$$\Delta\vec{r}^{\,\text{novo}} = \Delta\vec{r}^{\,\text{antigo}} + \vec{a}(t_n)\Delta t^2 \quad , \qquad \text{onde} \qquad \Delta\vec{r}^{\,\text{antigo}} = \vec{r}(t_n) - \vec{r}(t_{n-1}) \ . \tag{4}$$

Dessa maneira temos

$$\vec{r}^{\,\text{novo}} = \vec{r}^{\,\text{antigo}} + \Delta\vec{r}^{\,\text{novo}}, \tag{5}$$

Nesse método a nova posição $\vec{r}(t_{n+1})$ pode ser calculada sem o conhecimento da velocidade $\vec{v}(t_n)$, mas uma estimativa para a velocidade da partícula pode ser obtida utilizando diferenças finitas, isto é,

$$\vec{v}(t_n) = \frac{1}{2\Delta t}[\vec{r}(t_{n+1}) - \vec{r}(t_{n-1})] \qquad + \quad \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad , \tag{6}$$

com os primeiros valores $\vec{r}(t_1)$ e $\vec{v}(t_1)$ podendo ser estimados pelo método de Euler (Eq. 2).

Uma variação eficiente do algoritmo de Verlet bastante utilizada é o algoritmo **velocity Verlet**, definido pela seguinte sequência de atualizações [1]:

$$\begin{aligned}
\vec{v}(t_{n+1/2}) &= \vec{v}(t_n) + \frac{\vec{a}(t_n)\Delta t}{2} \quad , & (7)\\
\vec{r}(t_{n+1}) &= \vec{r}(t_n) + \vec{v}(t_{n+1/2})\Delta t \quad , & (8)\\
\vec{a}(t_{n+1}) &= \vec{F}(t_{n+1})/m \quad , & (9)\\
\vec{v}(t_{n+1}) &= \vec{v}(t_{n+1/2}) + \frac{\vec{a}(t_{n+1})\Delta t}{2} \quad , & (10)
\end{aligned}$$

Exercício 1. Considere uma partícula ($N = 1$) de massa $m = 1$ submetida ao potencial de Morse definido por $U_{\text{ext}}(r) = -D\left\{1 - [1 - \exp(-a(r - r_e)]^2\right\}$, com os parâmetros $D = 1$, $a = 1$, $m = 1$ e $r_e = 0$ (vide Roteiro 08). Escreva subrotinas que implementem as atualizações de $r(t)$ e $v(t)$ dos métodos de Verlet original e velocity Verlet a partir das condições iniciais $r(0) = r_0 = 0$ e $v(0) = -\sqrt{(2/m)|E - U(r_0)|}$, com energia mecânica $E = -0.8$.
a) Grafique $r(t)$ e $v(t)$ obtidos pelos dois métodos de Verlet acima junto com o resultado obtido pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem para o intervalo $t \in [0, 100]$ com $\Delta t = 0.01$. Também inclua gráficos com os erros absolutos (em relação à solução exata) em função do tempo para cada um dos métodos.
b) Faça gráficos das energias cinética K, potencial U e mecânica E em função do tempo.

Exercício 2. Simule a passagem de um cometa de massa $M_H = 2.2 \times 10^{14}\,\mathrm{kg}$ próximo à uma estrela de massa $M_S = 2.0 \times 10^{30}\,\mathrm{kg}$ supondo a estrela parada na origem do sistema e considerando que a força que a estrela exerce no cometa seja dada pela lei de gravitação de Newton: $\vec{F}(r) = -GM_S M_H \hat{r}/r^2$, com $G = 6.67408 \times 10^{-20}\,\mathrm{km^3kg^{-1}s^{-2}}$ e a distância r dada em quilômetros (km). Note que o versor $\hat{r}$ pode ser escrito como $\vec{r}/|\vec{r}|$.
a) Utilizando o método de velocity Verlet, obtenha a trajetória do cometa $\vec{r}(t) = x(t)\hat{\imath} + y(t)\hat{\jmath}$ e sua velocidade $\vec{v}(t) = v_x(t)\hat{\imath} + v_y(t)\hat{\jmath}$ dado que $\vec{r}(0) = 8.80 \times 10^7\hat{\imath} + 0.00\hat{\jmath}$ (km) e $\vec{v}(0) = 0.00\hat{\imath} - 54.62\hat{\jmath}$ (km/s). Inclua gráficos de $x(t)$ por $y(t)$ e de $v_x(t)$ por $v_y(t)$. Comente como você escolheu o valor de Δt.
b) Grafique as energias E, K e U e também o módulo do momento angular do cometa $L = |\vec{L}|$ com $\vec{L} = \vec{r} \times (M_H\vec{v})$.
c) A trajetória do cometa é uma órbita fechada? Se sim, obtenha numericamente o período τ, em anos, dessa órbita a partir da sua trajetória (compare com o resultado teórico esperado).

Referência:

[1] F. J. Vesely. Computational Physics: An Introduction (2nd ed., Springer, 2001).