AULAS 17 E 18: FIS271 - Física Computacional I

Exercício 1. Refaça o item (a) do Exercício 2 do Roteiro das Aulas 15 e 16 utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem descrito na página 232 da Ref. [1]. Compare os resultados obtidos por esse método com as estimativas obtidas pelo método de Euler.

Exercício 2. Considere uma partícula de massa m submetida ao potencial de Morse [2]:

$$V(r) = -D\left[1 - \left(1 - e^{-a(r-r_e)}\right)^2\right] \quad ,$$

onde D define a escala de energia (ou "profundidade do poço"), r_e denota o mínimo do potencial e a pode ser associado à "constante de força" do potencial. Pela segunda lei de Newton temos

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{F(r)}{m} \quad ,$$

onde $F(r) = -dV(r)/dr$ é a força que atua na partícula localizada em r. Considere os parâmetros $E = -0.8$, $D = 1.0$, $a = 1.0$, $m = 1.0$ e $r_e = 0.0$.
a) Calcule a expressão analítica para a força $F(r)$ e plote os gráficos de $V(r)$ e $F(r)$ no intervalo $r \in [-1, 5]$.
b) Como esse PVI envolve uma equação de segunda ordem, além da posição inicial $r_0 = r(0)$, é preciso definir o valor da derivada primeira $v(t) = dr/dt$, também no instante inicial. EDOs de segunda ordem podem ser reescritas como um conjunto de duas EDOs de primeira ordem, por exemplo,

$$\frac{dr}{dt} = v(t, r(t)) \quad ,$$

$$\frac{dv}{dt} = f(t, v(t), r(t)) \quad ,$$

onde o PVI é bem posto se conhecemos as duas condições iniciais: $r_0 = r(t_0)$ e $v_0 = v(t_0) = \pm\sqrt{(2/m)|E - V(r_0)|}$. Considerando $r_0 = 0$, utilize o método de Runge-Kutta de quarta ordem, descrito na páginas 265 e 266 da Ref. [1], para obter as estimativas numéricas para $r(t)$ e $v(t)$ no intervalo $t_0 = 0$ e $t_N = 10$ com $N = 200$ intervalos. Compare $r(t)$ obtido com a solução exata [2]:

$$\bar{r}(t) = r_0 + a^{-1}\ln[s(t)]$$

onde

$$s(t) = -\frac{D}{E}\left[1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}}\cos(\omega_0 t - \delta)\right] \quad ,$$

com $\omega_0 = \sqrt{-2Ea^2/m}$ e δ é uma fase que pode ser obtida considerando $s(t_0) = 1$, isto é, $\ln[s(t_0)] = 0$. Inclua o gráfico do erro absoluto $\varepsilon(t_i) = |r(t_i) - \bar{r}(t_i)|$.

Referências:

[1] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3^{rd} ed.)
[2] F. L. Moraes Barboza *et al.*, Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 543.