Potenciais Centrais - Método de Numerov

Física Computacional II
DFTE/UFRN 2012.2

Potenciais Centrais

- Potencial elétrico
- Equação de Poisson

$$\nabla^2 V = -\frac{1}{\epsilon_0}\rho.$$

Método de Runge-Kutta

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right),$$

$$\begin{aligned}
k_1 &= h \cdot f(y_n, t_n), \\
k_2 &= h \cdot f\left(y_n + \frac{1}{2}h, t_n + \frac{1}{2}k_1\right), \\
k_3 &= h \cdot f\left(y_n + \frac{1}{2}h, t_n + \frac{1}{2}k_2\right), \\
k_4 &= h \cdot f\left(y_n + h, t_n + k_3\right).
\end{aligned}$$

Equações de Segunda Ordem

$$\frac{d^2y}{dx^2} + q(x)\frac{dy}{dx} = r(x, y)$$

Defini-se uma variável auxiliar z:

$$z(x, y) = \frac{dy}{dx}$$

$$\frac{dy}{dx} = z(x, y)$$

$$\frac{dz}{dx} = r(x, y) - q(x) \cdot z(x)$$

Método de Numerov

- Usado para resolver equações da forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x).$$

- Duas expansões de Taylor em torno de y

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12}y_n''''.$$

- Mas

$$y_n'''' = \frac{d^2}{dx^2}\left[-k^2(x)y + S(x)\right]\Big|_{x=x_n}$$

Método Numerov

- De maneira que

$$y_n'''' = -\frac{1}{h^2}\left[k_{n+1}^2 y_{n+1} - 2k_n^2 y_n + k_{n-1}^2 y_{n-1}\right] + \frac{1}{h^2}\left[S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}\right].$$

- Substituindo a eq. acima na expansão de Taylor

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right) y_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right) y_{n-1} = \frac{h^2}{12}\left(S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}\right),$$

Equação de Poisson

- Coordenadas Cartesianas

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$$

- Escolhendo uma distribuição que dependa apenas de x. $\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$
- Comparando com a eq. de Numerov, temos
- $$V_{n+1} = 2V_n - V_{n-1} + \frac{1}{12}h^2\left(\rho_{n+1} + 10\rho_n + \rho_{n-1}\right).$$

Equação de Poisson

- A equação pode deve ser resolvida de maneira iterativa

$$V_{n+1} = 2V_n - V_{n-1} + \frac{1}{12}h^2\left(\rho_{n+1} + 10\rho_n + \rho_{n-1}\right).$$

- Precisaremos saber dois valores iniciais.
- Solução da eq. de Poisson em x_n

$$V_n = V(x_n)$$

- Se conhecemos o potencial em apenas um ponto, podemos determinar o outro usando uma integração numérica ou Runge-Kutta
-

Equação de Poisson

- Para a distribuição $\rho(r) = \mathrm{e}^{-x}.$

- Temos uma solução conhecida

$$V(x) = -\mathrm{e}^{-x} - x.$$

Equação de Poisson