

4. Integradores simpléctico I

* Calcular las nuevas posiciones con las posiciones actuales, velocidades y aceleraciones en el paso n .

$$r_i^{(n+1)} = r_i^{(n)} + v_i^{(n)} \Delta t + \frac{1}{2} a_i^{(n)} (\Delta t)^2$$

* Calcular las nuevas velocidades

$$v_i^{(n+1)} = \frac{r_i^{(n+1)} - r_i^{(n)}}{\Delta t}$$

Tenemos el Jacobiano.

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_i^{(n+1)}}{\partial r_i^{(n)}} & \frac{\partial r_i^{(n+1)}}{\partial v_i^{(n)}} \\ \frac{\partial v_i^{(n+1)}}{\partial r_i^{(n)}} & \frac{\partial v_i^{(n+1)}}{\partial v_i^{(n)}} \end{bmatrix} \rightarrow \text{Calcular las derivadas parciales para las nuevas posiciones y velocidades.}$$

Nuevas posiciones

$$\bullet \frac{\partial r_i^{(n+1)}}{\partial r_i^{(n)}} = 1$$

$$\bullet \frac{\partial r_i^{(n+1)}}{\partial v_i^{(n)}} = \frac{1}{2} (\Delta t)^2$$

Nuevas Velocidades

$$\bullet \frac{\partial v_i^{(n+1)}}{\partial r_i^{(n)}} = -\frac{1}{\Delta t}$$

$$\bullet \frac{\partial v_i^{(n+1)}}{\partial v_i^{(n)}} = 1$$

Por lo tanto, la matriz Jacobiana queda:

$$J = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \\ -\frac{1}{\Delta t} & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \text{Ahora sacamos su determinante}$$

$$\det(J) = (1 \cdot 1) - \left(\frac{1}{2}(\Delta t)^2 \cdot \left(-\frac{1}{\Delta t}\right)\right)$$

$$= 1 + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \frac{1}{\Delta t}$$

$$= 1 + \frac{1}{2}\Delta t \rightarrow = 1 + O(\Delta t^2)$$

El Jacobiano es aproximadamente igual a uno para pasos de tiempo muy pequeños.

Es decir que el Jacobiano inducido por el método de Verlet es igual a uno, en otras palabras, simpléctico.