

Dinámica Molecular regida por el paso temporal

Trabajo Practico Nro. 4

Badi Leonel, Buchhalter Nicolás Demián y Meola Franco
Román

1 de mayo de 2016

Grupo 3

Fundamentos

Introducción

- Vamos a comparar los errores cometidos por distintos sistemas de integración
- Oscilador amortiguado: Sistema con sólo una partícula puntual cuya solución analítica es conocida
- Se implementaron:
 - *Beeman*
 - *Velocity Verlet*
 - *Gear Predictor Corrector de orden 5*

Fundamentos

Variables relevantes del oscilador

- Parámetros
 - $m = 70$
 - $k = 10000$
 - $\gamma = 100$
 - $t_f = 5$
- Condiciones iniciales
 - $r(t = 0) = 1$
 - $v(t = 0) = -\frac{2\gamma}{m}$

Implementación

Cálculo Numérico

```
void simulateGear(double time, double deltaT) {  
    double simTime = 0;  
    Oscillator oscillator = new Oscillator();  
    oscillator.writePositionAndError();  
    oscillator.makeEulerStep(deltaT);  
    simTime += deltaT;  
    oscillator.writePositionAndError();  
    while (simTime < time) {  
        oscillator.makeGearStep(deltaT);  
        simTime += deltaT;  
        oscillator.writePositionAndError();  
    }  
}
```

Código 1: Método de Gear Predictor Corrector.

Implementación

Detalles de precisión

- Todas las operaciones se realizan en `double`
- Se utilizan cinco cifras decimales como output en los archivos de salida de resultados y errores.

Resultados

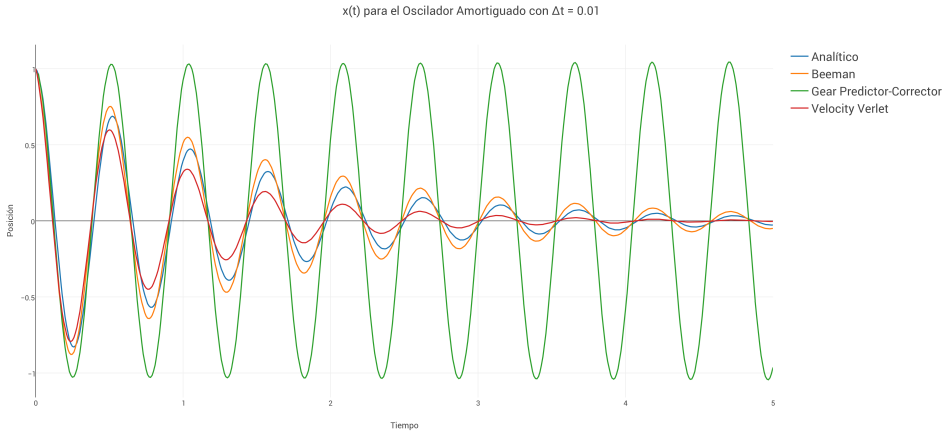
Error total normalizado por el número total de pasos para distintos valores de Δt

Δt	Método	E
0.01	Beeman	?
0.01	Verlet	?
0.01	Gear	?
0.001	Beeman	?
0.001	Verlet	?
0.001	Gear	?
0.0001	Beeman	?
0.0001	Verlet	?
0.0001	Gear	?

Tabla: Suma de las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales normalizado por el número total de pasos

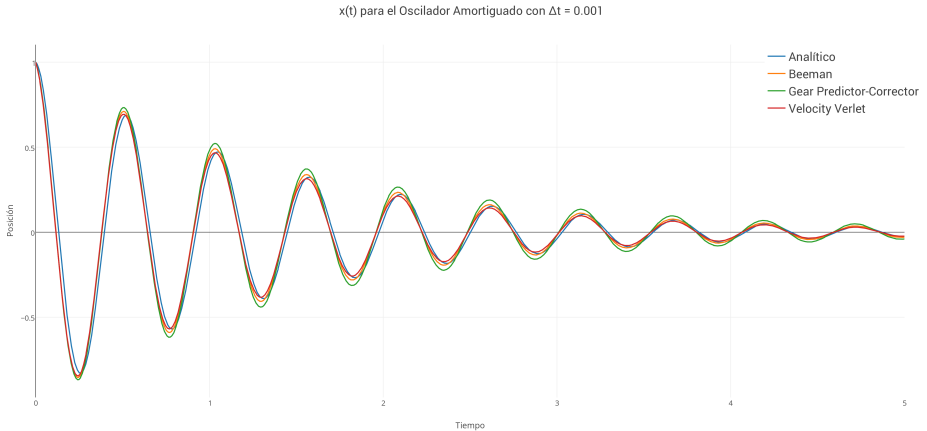
Resultados

Gráfico de $x(t)$ para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,01$



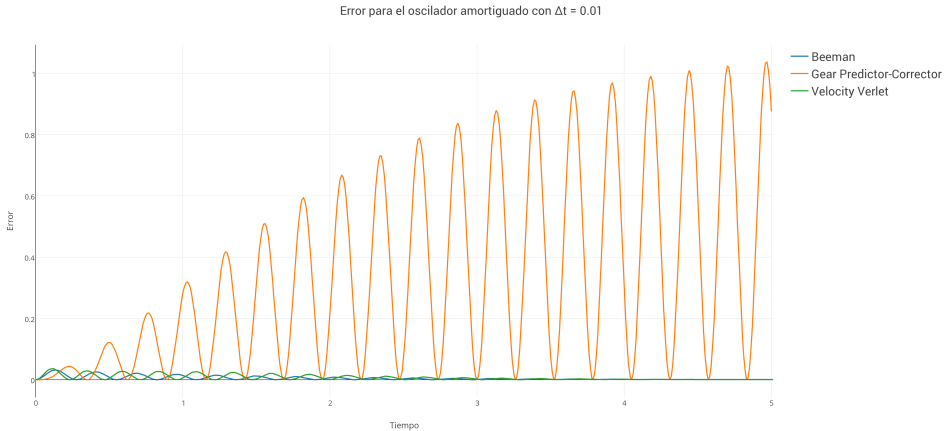
Resultados

Gráfico de $x(t)$ para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,001$



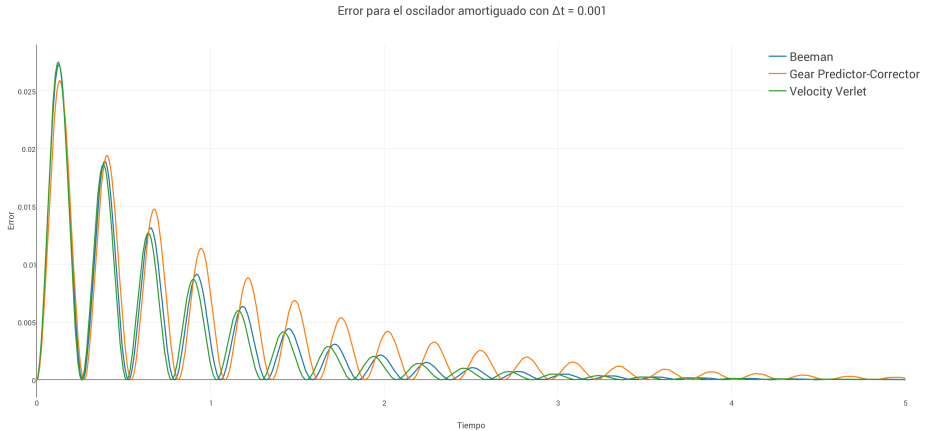
Resultados

Gráfico de E para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,01$



Resultados

Gráfico de E para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,001$



Conclusiones

- Con un $\Delta t = 0,001$ obtuvimos resultados con errores muy bajos para los tres métodos.
- *Gear Predictor-Corrector* es el que dio peores resultados para el caso puntual.
- Para una cantidad de pasos baja ($\Delta t = 0,001$), el error de *Gear Predictor-Corrector* aumenta, simulando un oscilador que no disipa energía.
- Las diferencias de los errores entre *Beeman* y *Velocity Verlet* son menores.
- **El esquema de integración que resulta mejor para este sistema es ?.**

Gracias