

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

- Lorem
- Ipsum
- Dolor

Implementación

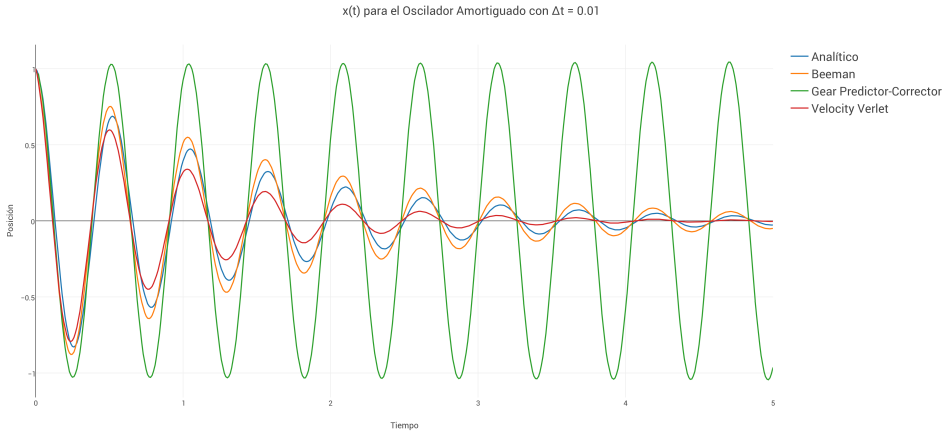
Cálculo Numérico

```
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.

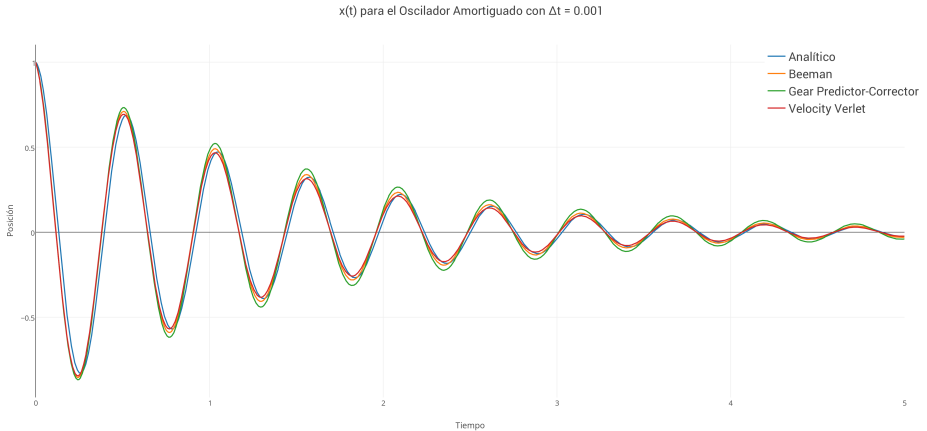
Resultados

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



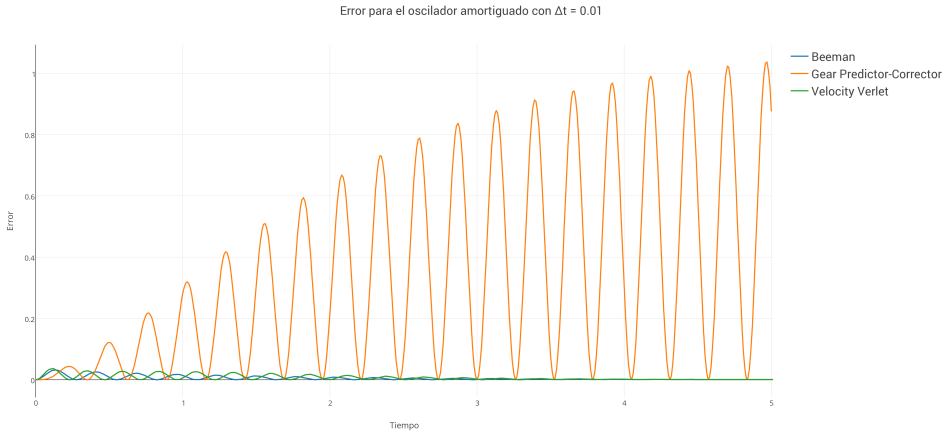
Resultados

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



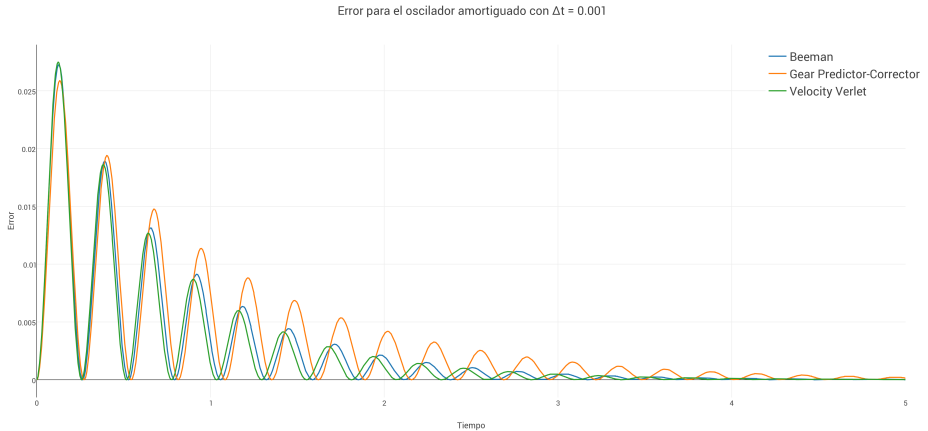
Resultados

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



Resultados

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



Gracias