

# Dinámica Molecular regida por el paso temporal

## Trabajo Practico Nro. 4

Badi Leonel, Buchhalter Nicolás Demián y Meola Franco  
Román

2 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

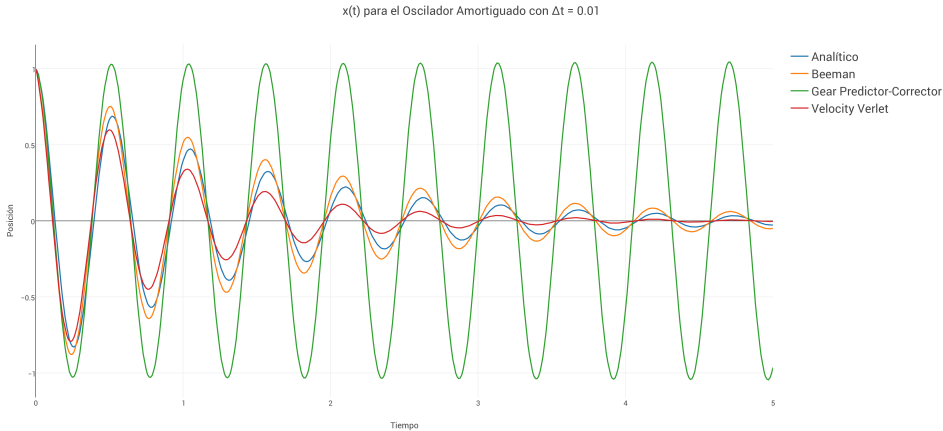
Error total normalizado por el número total de pasos para distintos valores de  $\Delta t$

$\Delta t$	Método	$E$
0.01	Beeman	0,00471
0.01	Verlet	0,00663
0.01	Gear	0,33624
0.001	Beeman	0,00235
0.001	Verlet	0,00225
<b>0.001</b>	<b>Gear</b>	<b>-0,00199</b>
0.0001	Beeman	0,00225
0.0001	Verlet	0,00224
0.0001	Gear	0,00228

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

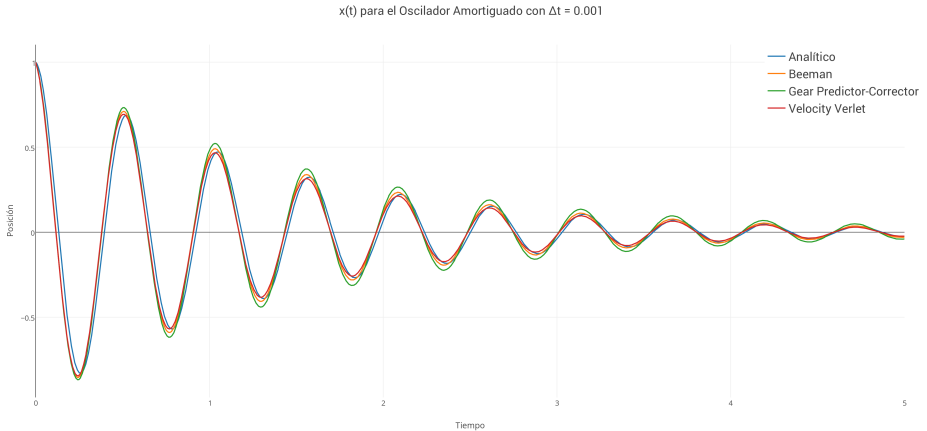
# Resultados

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



# Resultados

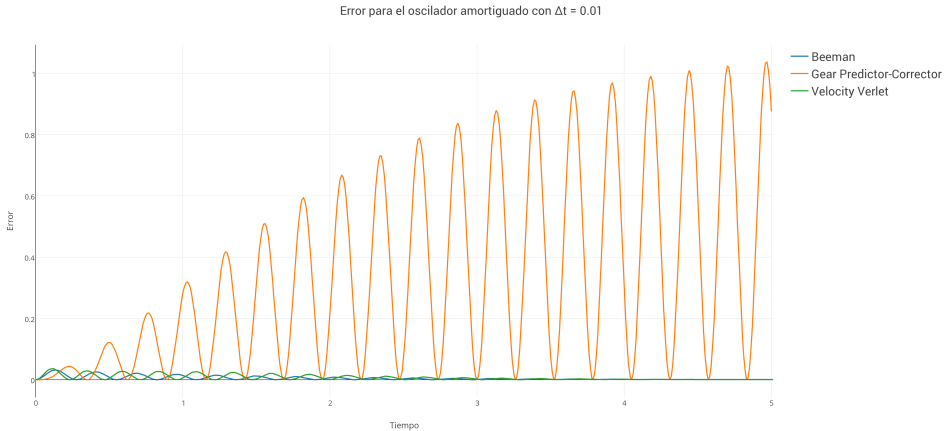
Gráfico de  $x(t)$  para el oscilador puntual amortiguado con  $\Delta t = 0,001$





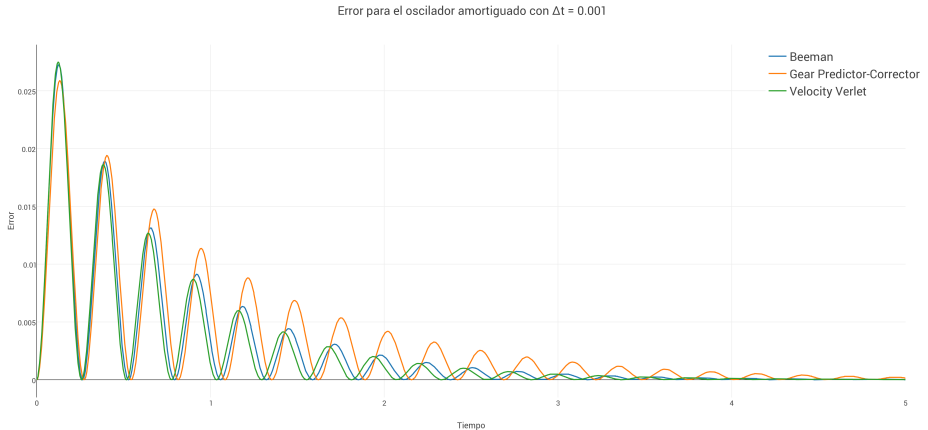
# Resultados

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

- Para una cantidad de pasos baja (500 pasos,  $\Delta t = 0,01$ ), el error de *Gear Predictor-Corrector* aumenta, simulando un oscilador no amortiguado.
- Con un  $\Delta t = 0,001$  obtuvimos resultados con errores muy bajos para los tres métodos.
- Con 50000 pasos ( $\Delta t = 0,0001$ ), los tres métodos tienen un error que varía recién en la quinta cifra decimal.
- El esquema de integración que mejor resulta para este sistema es *Gear Predictor-Corrector* para  $\Delta t = 0,001$ , es decir, 5000 pasos.

# Gracias