$$q = 3$$

$$r_{n+1} = r_n + h v_n + h^2 \sum_{p=1}^{q-1} b_p a_{n-q+1}$$

$$\sum_{p=1}^{2} b_p a_{n-2}$$

$$\sum_{p=1}^{2} b_1 a_{n-2} + b_2 a_{n-2}$$

La sumatoria esta erronea y este es el error pues la aceleracion es una constante que sale de la aceleracion y p, el cual es el termino que varia afecta coeficientes, no funciones. Este error se soluciona realizando la serie de Taylor al rededor de tn con $f(t) = f(t+h)$

(1) $\dot{r} = a(r)$ $\quad$ $a = \frac{dr}{dt} = V$ $\quad$ $F = ma$

r = Posición (x)

v = velocidad (y)

a = aceleración (z)

N = # de moléculas (≈ 1000)

$\dot{r} = v$

$\ddot{r} = a$

$\Rightarrow F = m\ddot{r}$

$\Rightarrow \frac{dr}{dt} =$

$v = \frac{dr}{dt}$

$a = \frac{dv}{dt} = \frac{dr^2}{dt^2}$

$\Rightarrow F = m \frac{dr^2}{dt^2}$

$F = m v \frac{dv}{dt}$

$a_i(r_i) = \frac{-\nabla V(r_i)}{\text{Masa molecular}}$ $\Rightarrow$ aceleración de la i-ésima molécula

$F = m \cdot a$

$\frac{F}{m} = a$

$\frac{F}{m} = \frac{dv}{dt}$

$\frac{dr}{dt}\left(\frac{dr}{dt}\right)$

$\frac{dr}{dt}\left(\frac{dv}{dt}\right)$

$V(r_i)$ = energía potencial de la molécula

$$V(r) = 4\epsilon \sum_{j=1}^{N} (\sigma/R_{ij})^{12} - (\sigma/R_{ij})^{6}$$

Verlet

a.) $r_{n+1} = 2r_n - r_{n-1} + h^2 a_n$

b.) $V_n = \frac{(r_{n+1} - r_{n-1})}{2h}$

c.) $h = t_{n+1} - t_n$

Rahman

$r_{n+1} = r_n + (23 v_n - 16 v_{n-1} + 5 v_{n-2})\, h/12$ (i)

$v_{n+1} = v_n + (5 a_{n+1} + 8 a_n - a_{n-1})\, h/12$ (ii)

$r_{n+1} = r_n + (5 v_{n+1} + 8 v_n - v_{n-1})\, h/12$ (iii)

$\Rightarrow$ Al realizar correctamente la serie de Taylor se llega al Integrador $h = t - t_n$

$h = t_{n+1} - t_n$

Serie de Taylor centrada en t_n

$h = \Delta t$

$$f(t_n) + f'(t_n)(t - t_n) + \frac{f''(t_n)}{2}(t - t_n)^2 + \frac{f'''(t_n)}{3!}(t - t_n)^3$$

↳ No se incluyen más para que no sobren terminos

$$f(t+h)$$

$$\Rightarrow f(t) + \overset{\dot{r}}{f'(t)}h + \overset{\ddot{r}}{f''(t)}\frac{h^2}{2} + \overset{\dddot{r}}{f'''(t)}\frac{h^3}{6}$$

$$r(t) + v(t)h + a(t)\frac{h^2}{2} + a'(t)\frac{h^3}{6}$$

al obtener $a'(t)$ se evalua para el algoritmo predictor y corrector, lo cual lleva a las formulas esperadas