Apéndice A

Algoritmo de Verlet

En el capítulo 3, se mencionó uno de los elementos de una simulación en DM: el algoritmo de integración. El algoritmo de integración estudiado en este trabajo ha sido el *algoritmo de Verlet*, el cual fue usado por primera vez en 1967. Este algoritmo presenta un error local en la posición de Δt^4 y en velocidad de Δt^2. Como se puede observar, el error en velocidad es muy grande comparado con el de posición.

Para deducir el algoritmo de Verlet, la posición $\vec{r}$ en un tiempo $t + \Delta t$ se expande en una serie de Taylor alrededor de t

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}\,(t) + \Delta t\,\vec{v}\,(t) + \frac{1}{2}\,\Delta t^2\,\vec{a}\,(t) + \frac{1}{6}\,\Delta t^3\,\vec{b}\,(t) + o(\Delta t^4) \tag{A.1}$$

Donde la aceleración está definida como $\vec{a} = \dfrac{F\,(t)}{m}$ y $\vec{b}\,(t)$ denota la tercera derivada de la posición.

Luego, se hace el mismo procedimiento con la posición para un tiempo previo $t - \Delta t$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}\,(t) - \Delta t\,\vec{v}\,(t) + \frac{1}{2}\,\Delta t^2\,\vec{a}\,(t) - \frac{1}{6}\,\Delta t^3\,\vec{b}\,(t) + o(\Delta t^4) \tag{A.2}$$

Sumando ambos desarrollos, se obtiene

$$\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \Delta t^2\,\vec{a}\,(t) + o(\Delta t^4) \tag{A.3}$$

El error estimado que contiene la nueva posición $\vec{r}$ es del orden de Δt^4, donde δt se define como el paso de tiempo ("Time step") en la simulación de DM. Nótese que para evaluar la nueva posición, solo se necesita tener conocimiento de la posición anterior (en el tiempo $t - \Delta t$) y la posición actual (tiempo t); no se depende de la velocidad.

Para calcular la expresión de la velocidad, se restan las ecuaciones **(A.1)** y **(A.2)** y se despeja la variable $\vec{v}\,(t)$, para obtenerse

$$\vec{v}\,(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\,\Delta t} + o(\Delta t^2) \tag{A.4}$$

Donde, el error en la velocidad como se mencionó es Δt^2 $\square$