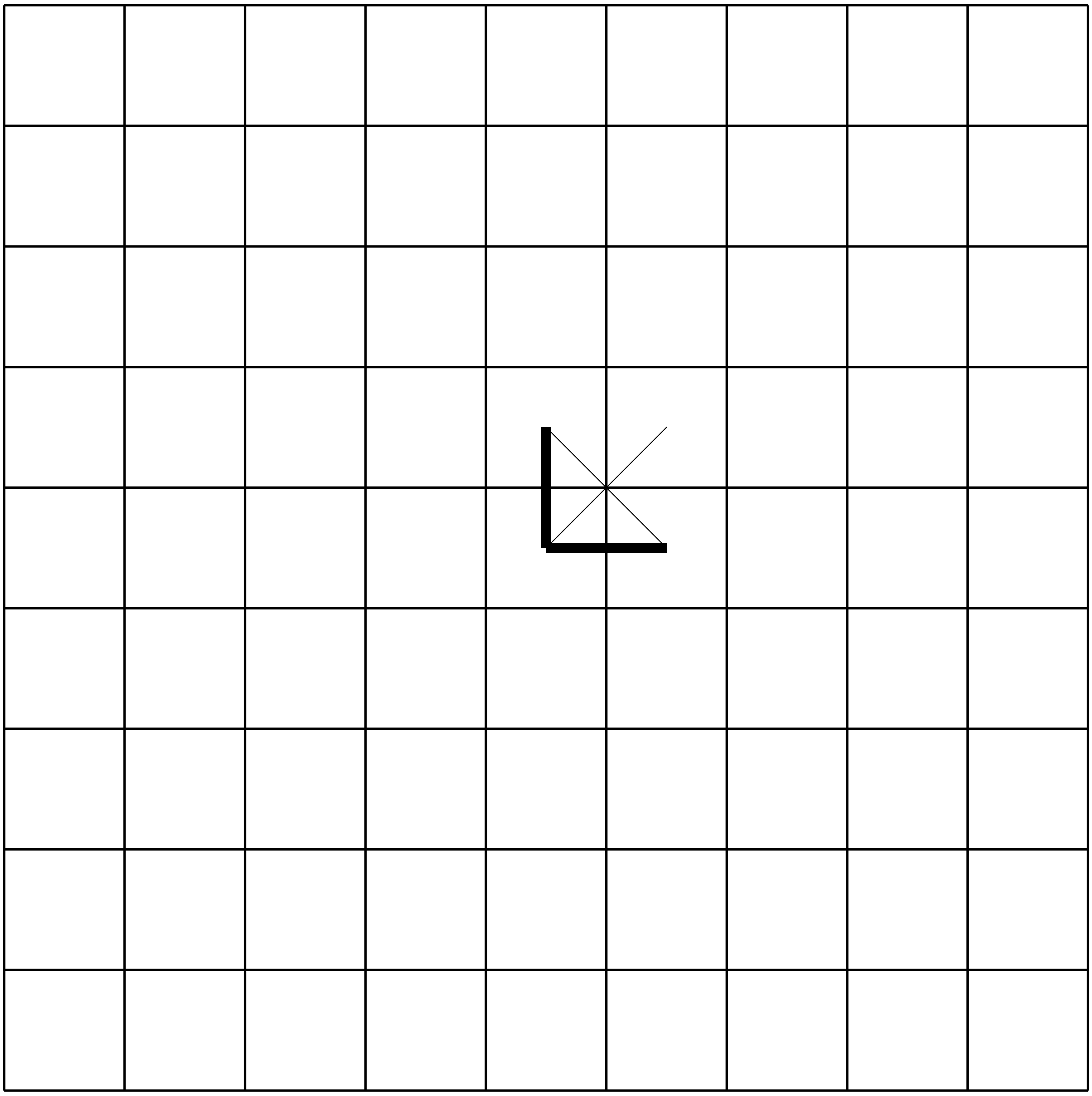
ParticleGrid

Benjamin Warnke

November 18, 2016

Skizze 1



Lennard Jones

Siehe Rapport The Art of Molecular Dynamics Simulation Seite 12 unten.

- i, j Partikel Indices
- r_{ij} Abstand der Partikel i und j
- σ ???
- ϵ ???

$$f_{ij} = \left(\frac{48\epsilon}{\sigma^2}\right)\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{8}\right] r_{ij}$$

Verlet Algorithmus

- n Zeitschritt Nummer
- x_n Position zum Zeitpunkt n
- Δt Zeitschritt Größe

Siehe Wikipedia `https://de.wikipedia.org/wiki/Verlet-Algorithmus`

$$\begin{aligned} \vec{x}_1 &= \vec{x}_0 + \vec{v}_0 t + \frac{1}{2}\vec{a}_0 \Delta t^2 \\ \vec{x}_{n+1} &= 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2 \end{aligned}$$

Kraft $\leftrightarrow$ Beschleunigung

$$\begin{aligned} f &= ma \\ a &= \frac{f}{m} \end{aligned}$$

gerichtete Kraft von i nach j

- x_i Position des Partikels i
- x_j Position des Partikels j
- a Kraft

Achtung Normieren der Richtung !!

$$\vec{a} = \frac{a}{r_{ij}}\left(\vec{x}_j - \vec{x}_i\right)$$

Alles Zusammen

$$
\begin{aligned}
\vec{x}_{n+1} &= 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2 && (1)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{a_n}{r_{n,ij}} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (2)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\frac{f_{n,ij}}{m_i}}{r_{n,ij}} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (3)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{f_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (4)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma^2_{n,ij}}\right)\left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{8}\right] r_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (5)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma^2_{n,ij}}\right)\left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{8}\right]}{m_i} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (6)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma^2_{n,ij}}\right)\left[\left(\frac{\sigma^{14}_{n,ij}}{r^{14}_{n,ij}}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\sigma^{8}_{n,ij}}{r^{8}_{n,ij}}\right)\right]}{m_i} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (7)\\
&= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(48\epsilon_{n,ij}\sigma^6_{n,ij}\right)\left[\left(\frac{\sigma^{6}_{n,ij}}{r^{14}_{n,ij}}\right) - \left(\frac{0.5}{r^{8}_{n,ij}}\right)\right]}{m_i} \left(\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}\right) \Delta t^2 && (8)\\
& && (9)
\end{aligned}
$$

Datenstrukturen

- Partikel
  - letzte Position
  - aktuelle Position
  - nächste Position
  - Partikel-Typ
- Partikel-Typ
  - Masse
  - σ in Verbindung mit jedem beliebigen anderen Partikel-Typ
  - ϵ in Verbindung mit jedem beliebigen anderen Partikel-Typ