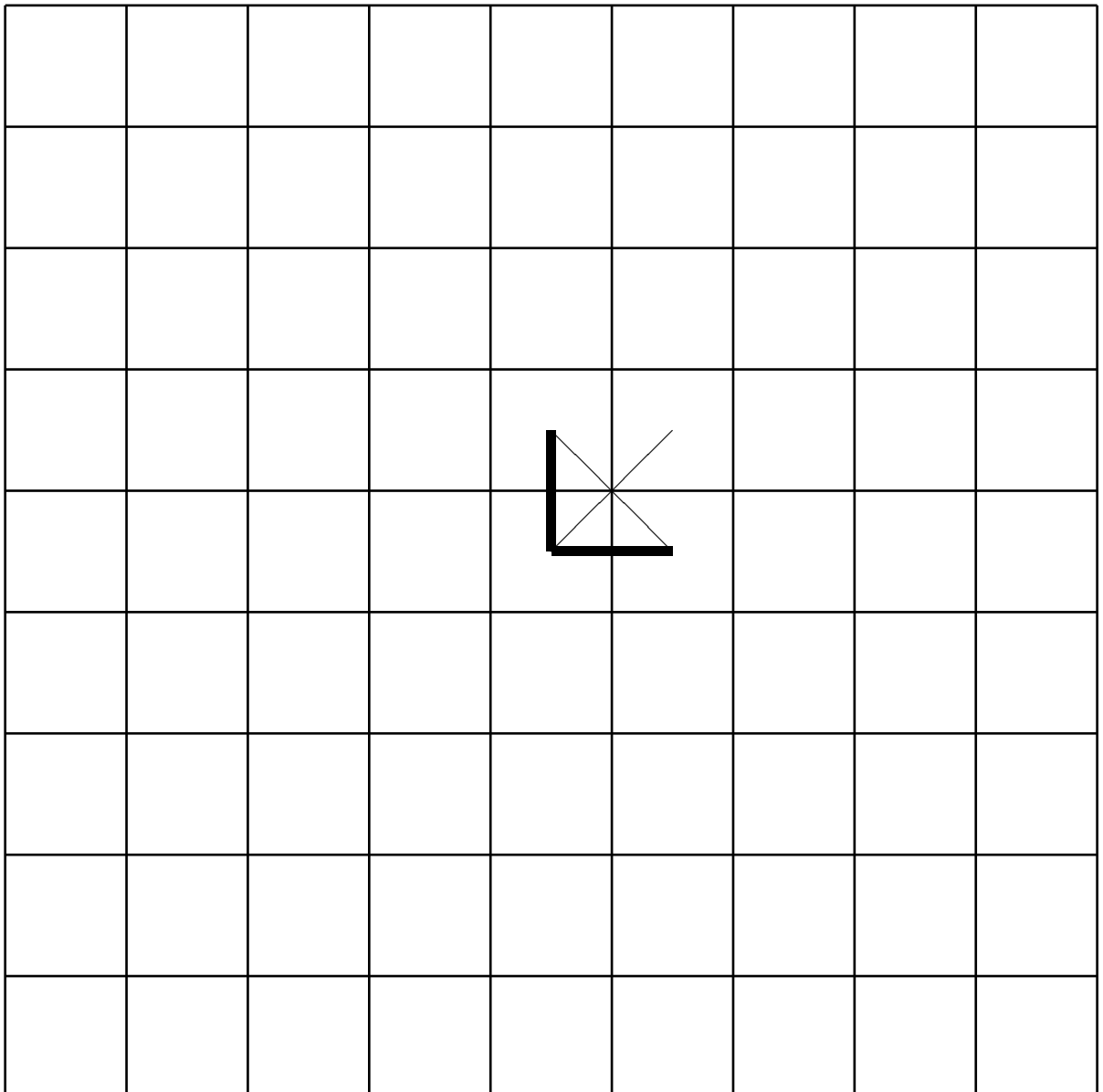


# ParticleGrid

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
- $\sigma$  ???
- $\epsilon$  ???

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

## Verlet Algorithmus

- $n$  Zeitschritt Nummer
- $x_n$  Position zum Zeitpunkt n
- $\Delta t$  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 !!

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

## Alles Zusammen

$$\vec{x}_{n+1} = 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2 \quad (1)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{a_n}{r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (2)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\frac{f_{n,ij}}{m_i}}{r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (3)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{f_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (4)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^8\right] r_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (5)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^8\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (6)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}^{14}}{r_{n,ij}^{14}}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}^8}{r_{n,ij}^8}\right)\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (7)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{(48\epsilon_{n,ij}\sigma_{n,ij}^6) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}^6}{r_{n,ij}^{14}}\right) - \left(\frac{0.5}{r_{n,ij}^8}\right)\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (8)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{(48\epsilon_{n,ij}\sigma_{n,ij}^6) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}^6}{r_{n,ij}^{14}}\right) - \left(\frac{0.5r_{n,ij}^6}{r_{n,ij}^{14}}\right)\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (9)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{(48\epsilon_{n,ij}\sigma_{n,ij}^6) \left[\frac{\sigma_{n,ij}^6 - 0.5r_{n,ij}^6}{r_{n,ij}^{14}}\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (10)$$

$$(11)$$

## Datenstrukturen

- Partikel
  - letzte Position
  - aktuelle Position
  - nächste Position
  - Partikel-Typ
- Partikel-Typ
  - Masse
  - $\sigma$  in Verbindung mit jedem beliebigen anderen Partikel-Typ
  - $\epsilon$  in Verbindung mit jedem beliebigen anderen Partikel-Typ