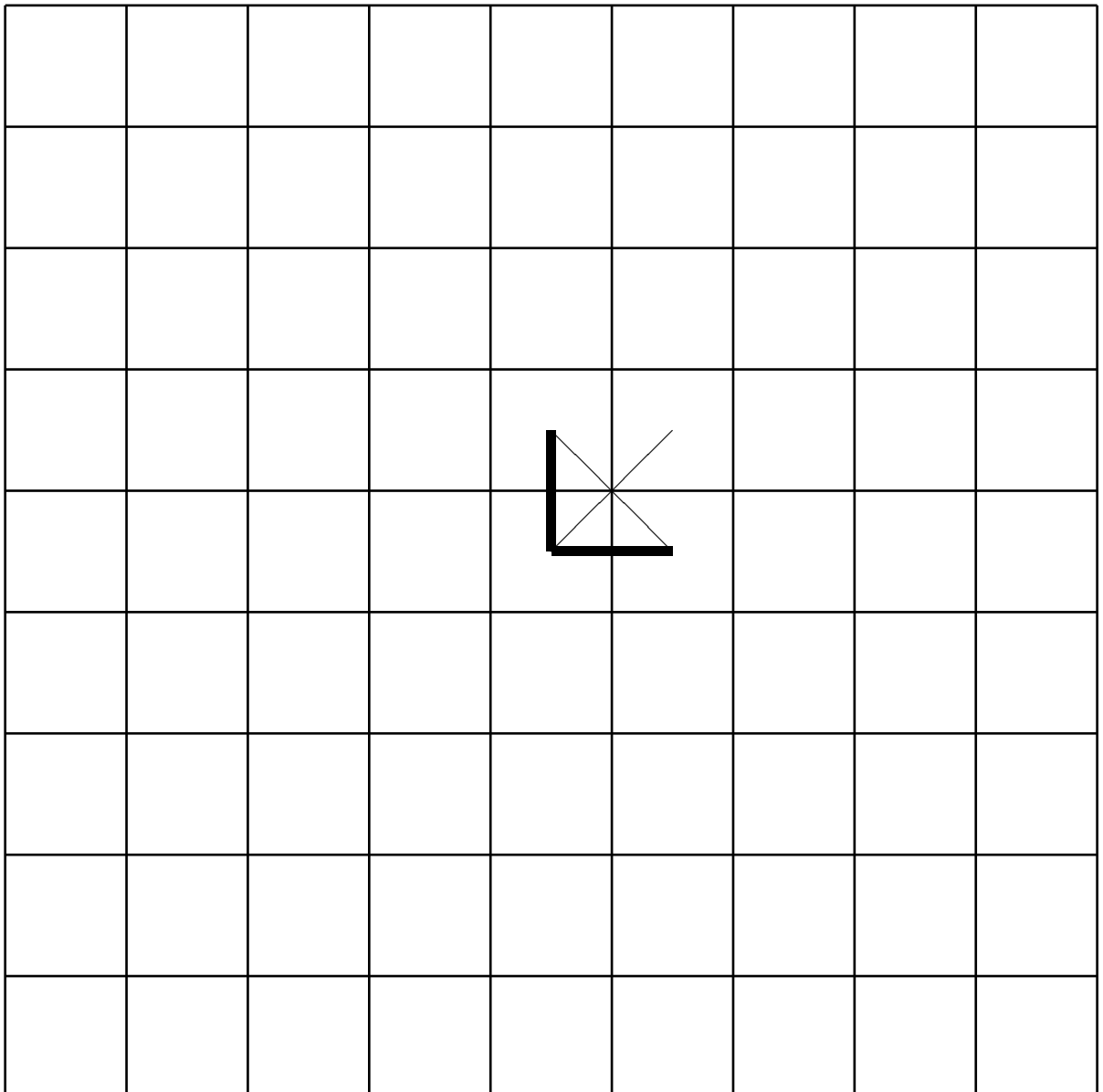


ParticleGrid

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 !!

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

Alles Zusammen

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{m_i}{\left(\frac{48\epsilon_{ij}}{\sigma_{ij}^2}\right) \left[\frac{\sigma_{ij}^{14}}{r_{n,ij}^{12}} - \frac{\sigma_{ij}^8}{2r_{n,ij}^6}\right]} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (9)$$

$$(10)$$

$$\vec{x}_{n+1} = 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2 \quad (11)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{a_n}{r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (12)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\frac{f_{n,ij}}{m_i}}{r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (13)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{f_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (14)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}}{r_{n,ij}}\right)^8\right] r_{n,ij}}{m_i r_{n,ij}} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (15)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}^{14}}{r_{n,ij}^{14}}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}^8}{r_{n,ij}^8}\right)\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (16)$$

$$= 2\vec{x}_{i,n} - \vec{x}_{i,n-1} + \frac{\left(\frac{48\epsilon_{n,ij}}{\sigma_{n,ij}^2}\right) \left[\left(\frac{\sigma_{n,ij}^{14}}{r_{n,ij}^{14}}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{n,ij}^8}{r_{n,ij}^8}\right)\right]}{m_i} (\vec{x}_{n,j} - \vec{x}_{n,i}) \Delta t^2 \quad (17)$$

$$(18)$$

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