

Simulation of a many-particle system using space partitioning

Roald Frederickx Kasper Meerts

10 November 2010

Titularis: Prof. Walter Troost
Met dank aan Matthijs van Dorp

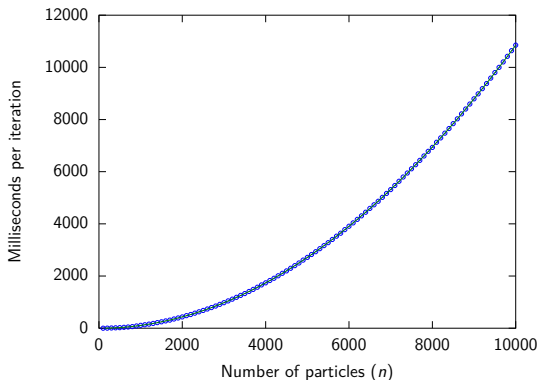
- 1 Inleiding
- 2 Implementatie
- 3 Performance
- 4 Toepassingen
- 5 Conclusie

Veel fysische systemen te modelleren door interagerende deeltjes
Bijvoorbeeld

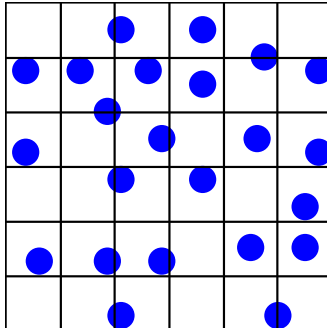
- Ideaal gas
- Elektronen in metaal
- Diffusie
- Warmtegeleiding
- Adsorptie

Enkel korte-afstand interactie (“botsen”)!

- Elk paar apart bekijken
- $n(n-1)/2$ paren $\Rightarrow O(n^2)$
- Veel overbodig werk



- Ruimte onderverdelen in “dozen”
- n deeltjes
- x deeltjes per doos
- n/x dozen
- Complexiteit $O(n/x \cdot x^2) = O(nx) = O(n)$



- Programmeertaal: C
- Harde bollen
- Elastische botsingen
 - A posteriori
 - Backtracking
- “Doos” = lijst

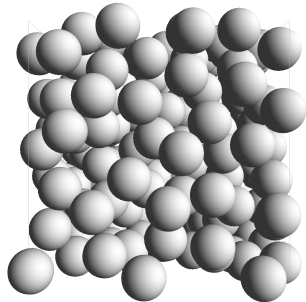
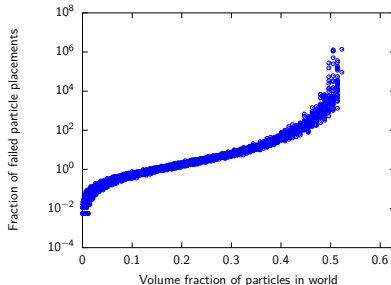
Testen op botsingen

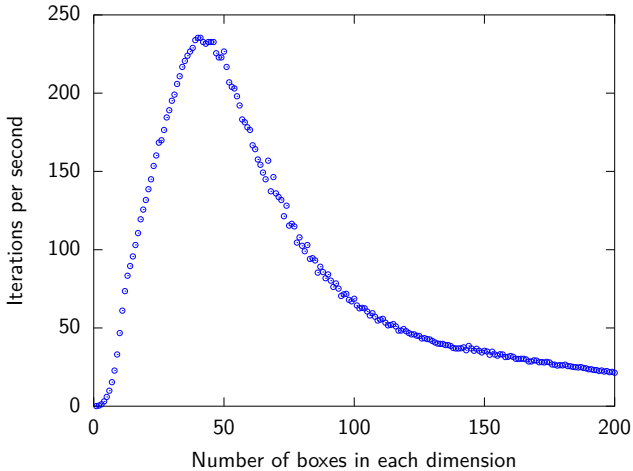
- Binnen eigen doos
- Buurdozen

- Genereer willekeurige positie
- Zolang botsing: probeer opnieuw

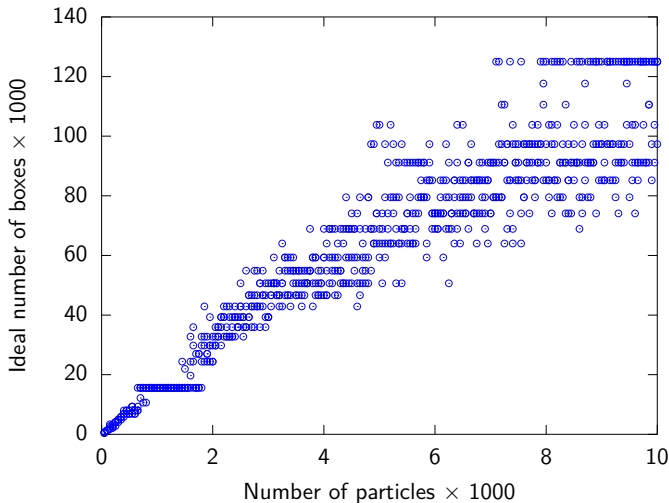
Volume fractie gestapelde bollen:

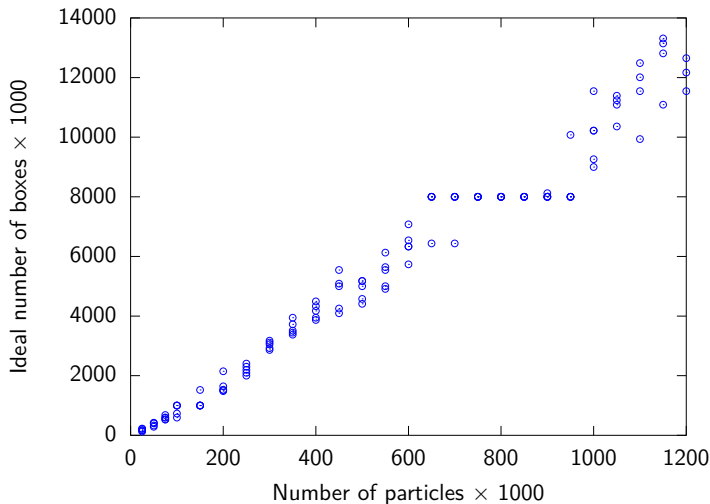
- Maximaal $\approx 74\%$ op een regelmatig rooster
- Willekeurig $\approx 63\%$ mits “schudden”
- Ons algoritme $\approx 52\%$

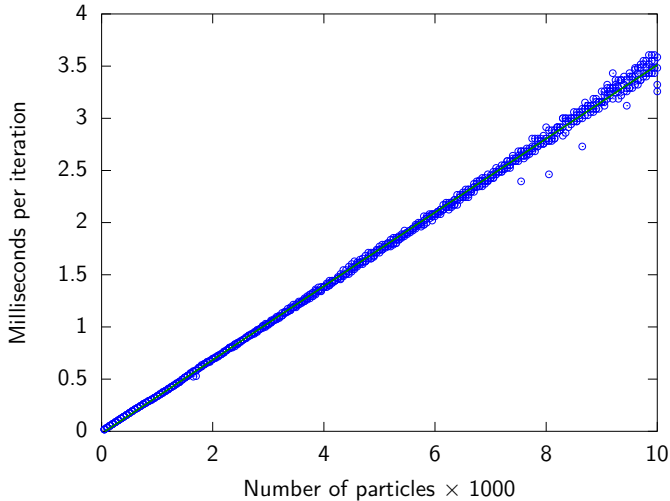


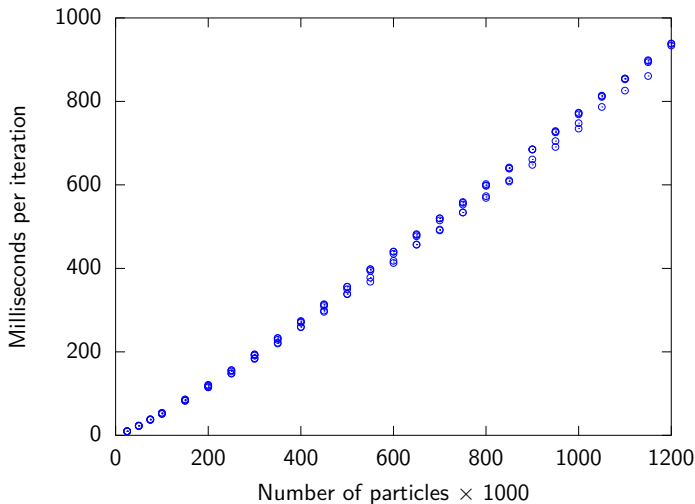


10 000
deeltjes

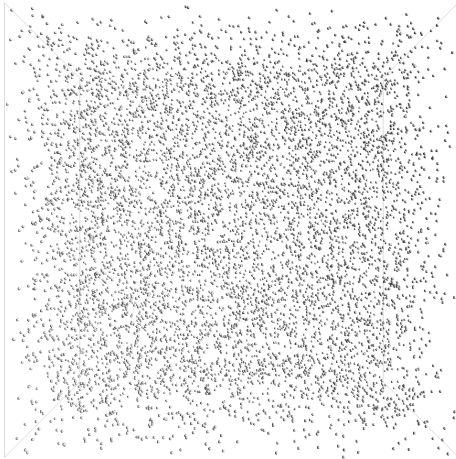




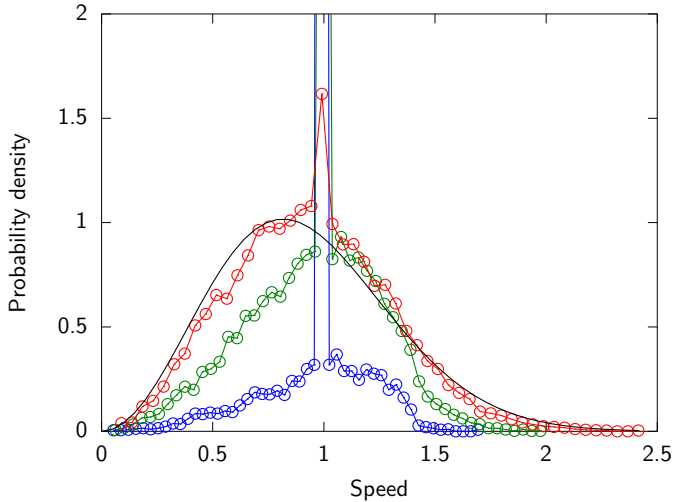


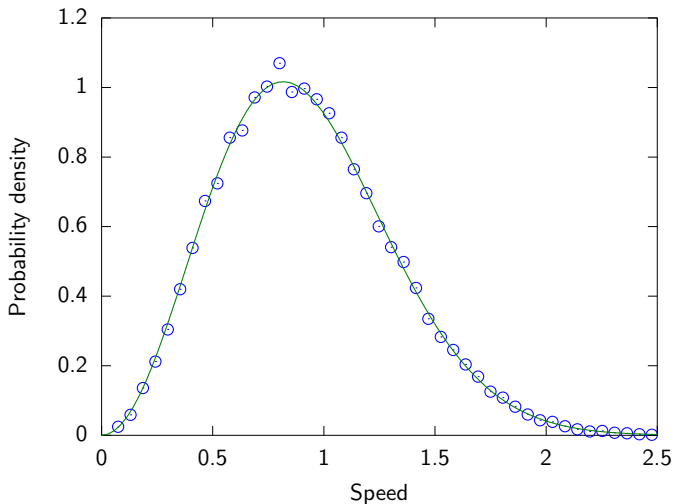


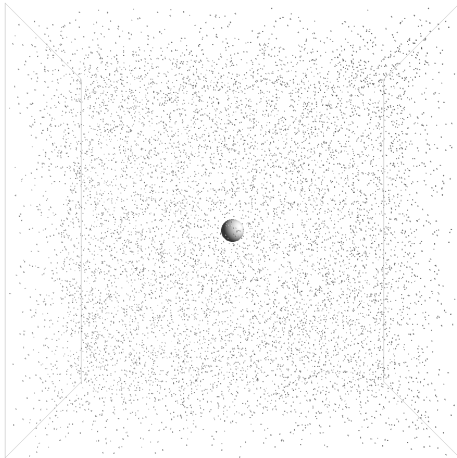
- ~ 10 dozen per deeltje
- $O(n^2) \rightarrow O(n)$
- 5 jaar \rightarrow 1 seconde



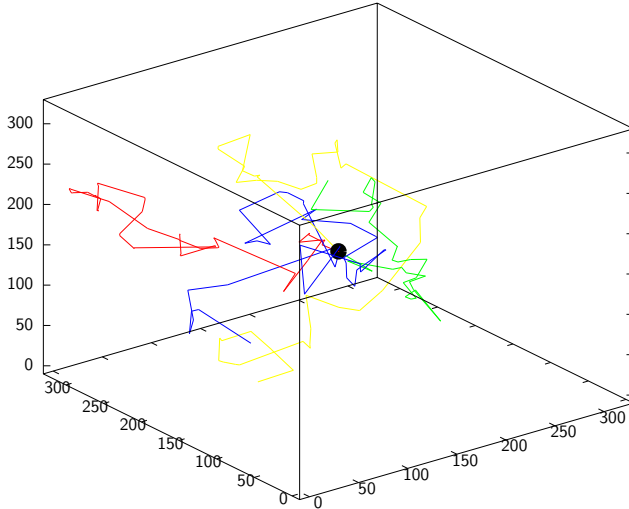
8 000 deeltjes







10 000 deeltjes
1 groot deeltje



- Van der Waals correctie
- Diffusie
- Warmte-geleiding
- Klassiek adsorptiemodel

Space partitioning:

- Korte-afstand interacties
- $O(n^2) \rightarrow O(n)$
- Zonder verlies van correctheid