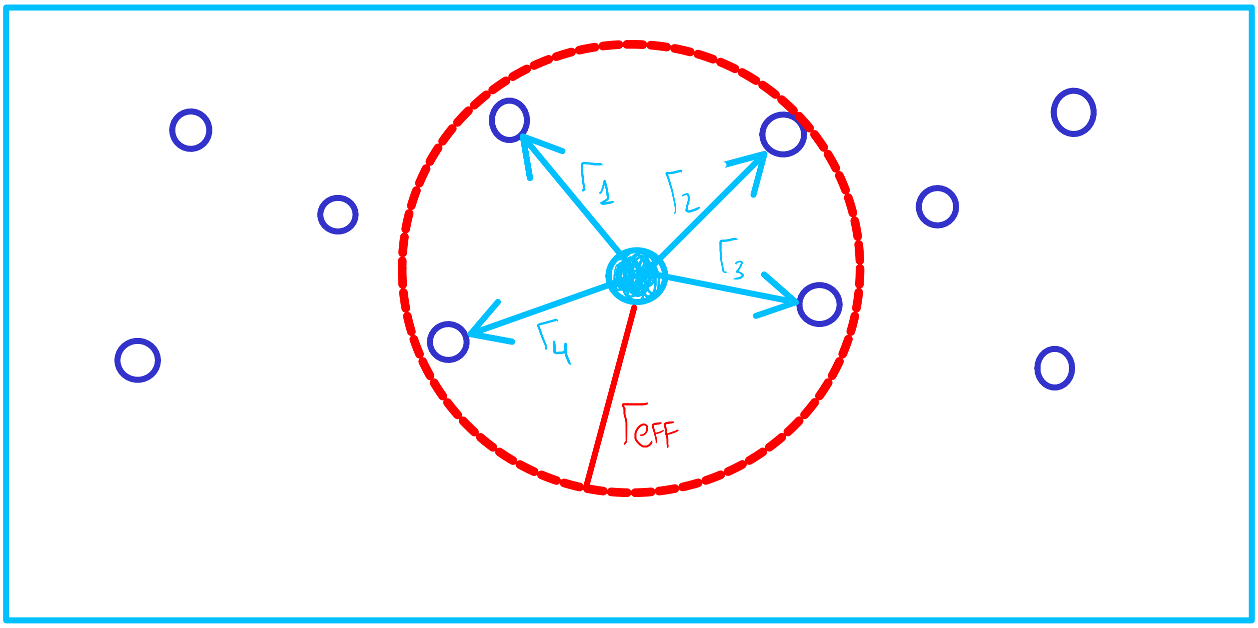
Calculo de matriz de distancias:

Partimos de que vamos a calcular todo con r

Entonces el Pot de Lennard-Jones dará:

$$v(r) = 4\varepsilon\left(-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right),$$

Ahora la idea es lograr calcular esto solo cuando esten dentro de un radio efectivo



Para lograr esto hay que conocer la distancia entre todas las particulas, aunque puedo aplicar algunos trucos de optimización. Voy crear una matriz de $N \times N$ que almacene las distancias entre particulas

$$\mathbb{R} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} & \cdots & R_{1N} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} & & \vdots \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ R_{N1} & R_{N2} & R_{N3} & \cdots & R_{NN} \end{bmatrix}$$

: En donde R_{12} : Será la distancia entre 1 y 2 (Particulas)

Luego: R_{nn} siempre será cero, puesto que la distancia entre la partícula y sí misma, es cero.

Luego $R_{N1} = R_{1N}$ porque la matriz es simétrica entonces

$$\mathbb{R} = \begin{bmatrix} 0 & R_{12} & R_{13} & \cdots & R_{1N} \\ & 0 & R_{23} & & \vdots \\ & & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ Solo me van a importar estas componentes.

Entonces si fabrico una matriz en C podría ahorrar espacio haciendo

$$\mathbb{R} : \left[\begin{bmatrix} R_{12} \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} R_{13} \\ R_{23} \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} R_{14} \\ R_{24} \\ R_{34} \end{bmatrix} ; \cdots \begin{bmatrix} R_{1N} \\ R_{2N} \\ R_{3N} \\ \vdots \\ R_{NN-1} \end{bmatrix} \right]$$

Optimización: Si la componente X, Y o Z de una partícula es mas grande que el radio del área de cálculo, ponemos valor negativo en la matriz, es decir

$$\text{Si } (X_1 - X_2)^2 > r_{EFF} \Rightarrow R^2_{12} = -1$$
$$(Y_1 - Y_2)^2 > r_{EFF} \Rightarrow R^2_{12} = -1$$
$$(Z_1 - Z_2)^2 > r_{EFF} \Rightarrow R^2_{12} = -1$$

(en el programa ni lo miro, lo salteo al calcular energía)

Aplica la misma lógica para la matriz de fuerzas

$$\mathbb{F} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{F}_{12} & \vec{F}_{13} & \vec{F}_{14} & \cdots & \vec{F}_{1N} \\ & 0 & \vec{F}_{23} & \vec{F}_{24} & \cdots & \vec{F}_{2N} \\ & & 0 & \vec{F}_{34} & \cdots & \vec{F}_{3N} \\ & & & 0 & & \vdots \\ & & & & \ddots & \vec{F}_{N-1,N} \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

Ejemplo para 5×5

$$\begin{bmatrix} 0 & \vec{F}_{12} & \vec{F}_{13} & \vec{F}_{14} & \vec{F}_{15} \\ \vec{F}_{21} & 0 & \vec{F}_{23} & \vec{F}_{24} & \vec{F}_{25} \\ \vec{F}_{31} & \vec{F}_{32} & 0 & \vec{F}_{34} & \vec{F}_{35} \\ & & & 0 & \vec{F}_{45} \\ & & & & 0 \end{bmatrix}$$

Para conocer por ejemplo la fuerza total en 1 será $\mathbb{F}(1;:)$

Para conocer las fuerzas en la partícula 3 será $\mathbb{F}(3;:)$

Calculo de la Fuerza

Regla de la Cadena

$$f_i = \sum_{j=1,N,j\neq i} -\nabla_{\mathbf{r}_i} v(r)|_{r_{ij}} \qquad -\nabla_{r_i} v(r)\Big|_{r_{ij}} = -\frac{dv}{dr_{ij}} \cdot \nabla_{r_i} r_{ij} \Rightarrow$$

$\Rightarrow \nabla_{r_i} r_{ij} = \dfrac{r_i - r_j}{\|r_i - r_j\|}$: Dirección de máximo crecimiento del vector : $\hat{r}$

$\Rightarrow -\dfrac{dv}{dr_{ij}}$: tasa de decrecimiento del potencial en la dirección opuesta a $\hat{r}$

Entonces queda: $-\nabla_{r_i} v(r)\Big|_{r_{ij}} = -\dfrac{dv}{dr_{ij}}\hat{r}$ Si el Potencial es: $v(r^2) = 4\varepsilon\left(-\dfrac{\sigma^6}{(r^2)^3} + \dfrac{\sigma^{12}}{(r^2)^6}\right)$

Luego queda: $\dfrac{dv}{dr} = \left[4\varepsilon\left(-\dfrac{\sigma^6}{r^6}+\dfrac{\sigma^{12}}{r^{12}}\right)\right]' \Rightarrow 4\varepsilon\left(-\sigma^6 \cdot r^{-7}\cdot(-6) + \sigma^{12}\cdot r^{-13}\cdot(-12)\right) \Rightarrow$

$\Rightarrow 4\varepsilon\left(\dfrac{6\sigma^6}{r^7} - \dfrac{12\sigma^{12}}{r^{13}}\right) = \dfrac{dv}{dr} \Rightarrow -\nabla_{r_i} v(r)\Big|_{r_{ij}} = -4\varepsilon\left(\dfrac{6\sigma^6}{r^7}-\dfrac{12\sigma^{12}}{r^{13}}\right)\hat{r}$

Para el programa:

$\hat{r} = \left(\dfrac{r_{j_x} - r_{i_x}}{\|r_i - r_j\|} ; \dfrac{r_{j_y} - r_{i_y}}{\|r_i - r_j\|} ; \dfrac{r_{j_z} - r_{i_z}}{\|r_i - r_j\|}\right)$ Donde $\|r_i - r_j\|$: Distancia entre i y j