

## La liste des voisins

La liste des voisins est une méthode pour améliorer l'efficacité du calcul des interactions entre les particules.

Dans cette simulation, nous utiliserons une liste de voisins (liste de Verlet) pour optimiser le calcul des interactions entre les particules, afin d'améliorer l'efficacité de la simulation.

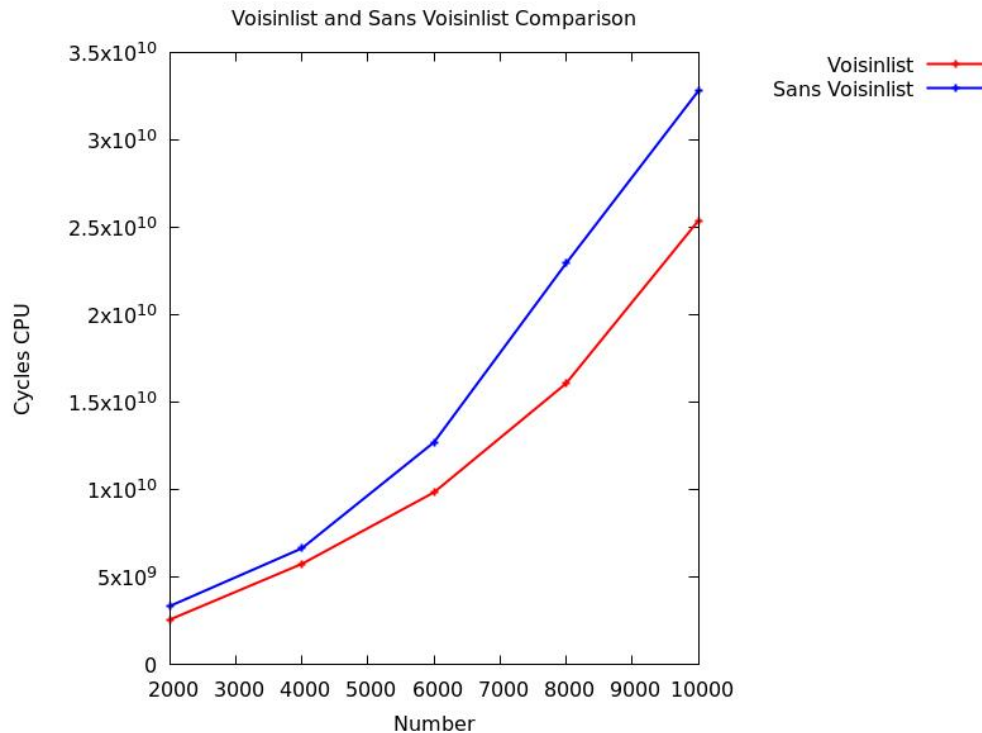
Pour `voisinlist3.cpp`, plus précisément:

1. Inclure les fichiers d'en-tête et les constantes nécessaires.
2. Définir la fonction **rayonverlet1**, utilisée pour gérer les conditions aux limites périodiques.
3. Définir la fonction **rayonverlet**, utilisée pour calculer les distances entre les particules corrigées par les conditions aux limites périodiques.
4. Définir la fonction **Voisin**, utilisée pour construire la liste des voisins (liste de Verlet).
  - (1) Les paramètres d'entrée comprennent le système de **particules p**, le rayon de coupure **r\_cut**, **r\_skin**, les trois dimensions des limites (**b\_x**, **b\_y**, **b\_z**) et le nombre de voisins **NN** et la liste des voisins **NL**.
  - (2) Calculez le carré du rayon de coupure plus l'épaisseur de la peau (**r\_cut\_verlet**) pour améliorer l'efficacité du calcul des comparaisons de distance.
  - (3) Initialisez le nombre de voisins de toutes les particules à 0.
  - (4) Pour chaque paire de particules dans le système, calculez la distance entre elles et appliquez les conditions aux limites périodiques. Si la distance entre elles est inférieure à **r\_cut\_verlet**, ajoutez-les à la liste des voisins de l'autre.
  - (5) Si le nombre de voisins dépasse le nombre maximum de voisins **MN**, lancez une exception et terminez le programme.

La liste des voisins contient des paires de particules à l'intérieur de la distance de coupure **r\_cut\_verlet**.

En utilisant la valeur **r\_cut\_verlet** (égal à la somme de la distance de coupure **r\_cut** et de **r\_skin**), seules les paires de particules dont la distance est inférieure à **r\_cut\_verlet** sont ajoutées à la liste des voisins. Ainsi, lors du calcul des forces d'interaction, il suffit de prendre en compte les paires de particules de la liste des voisins, et non toutes les paires de particules possibles.

Afin de mieux comprendre le rôle de la liste de Verlet, j'ai collecté des données d'efficacité en utilisant et en n'utilisant pas la liste de Verlet pour le même nombre de particules, à la même température et avec le même nombre d'itérations. J'ai ensuite tracé un graphique en ligne pour visualiser les résultats.



Dans le code, deux boucles imbriquées parcourent toutes les paires de particules, calculant la distance entre elles. Ensuite, les paires de particules dont la distance est inférieure à `r_cut_verlet2` (c'est-à-dire le carré de `r_cut_verlet`) sont ajoutées à la liste des voisins.

Cela signifie que les forces d'interaction ne sont calculées qu'entre les paires de particules suffisamment proches, réduisant ainsi la complexité du calcul.

## Rencontré des problèmes

Malheureusement, il y a eu quelques problèmes pendant le processus expérimental. Le même code d'expérimentation peut parfaitement fonctionner sur l'ordinateur de mon collègue, mais pas sur le mien.

Pour les parties de code que j'ai achevées, après dix essais répétés sans aucun changement, environ six d'entre eux affichent "**core dumped**", et pendant l'exécution, mon ordinateur se fige ou redémarre automatiquement. J'ai essayé de trouver des solutions, mais sans succès.

Ensuite, au fur et à mesure de l'avancement du projet, le code du programme a été modifié et amélioré. Finalement, le programme de la branche 'main' a bien

fonctionné sur l'ordinateur du membre de mon groupe, mais sur le mien, il ne pouvait pas du tout l'exécuter. J'ai essayé d'effectuer une série d'opérations telles que modifier les autorisations, mais tout affiche "**core dumped**":

```
./launch.sh: line 61: 55691 Segmentation fault (core dumped) ./Bin/simulation $N  
$nb_iteration $dt $b_x $b_y $b_z
```

Pour cette raison, je ne peux pas fusionner le code de la liste de voisins avec le code actuel, donc je l'ai affiché sur ma propre branche.