

Oblig 3

Molekylær dynamikk.

Fyll inn kandidatnummer.

November 21, 2014

Samandrag

Me må ha ei trippel-løkke for alle indeksane til ei celle og ei indre trippel løkke for alle nabocellene ((i-1, i, i+1), (j-1, j, j+1), (k-1, k, k+1)). Hugs å sjekke med boundary conditions. Når me konstruerar kvar celle vil me lagre dei ved indeks

```
void index(inti, intj, intk){  
    posisjon = i * nx * nz + j * ny * nz + k;  
}
```

kor n_x , n_y og n_z er storleiken på kvar celle i x , y og z -retning. Storleiken bestemmer me ved

$$int\ nx = \left\lceil \frac{L_x}{r_{cut}} \right\rceil,$$

kor L_x er storleiken på systemet i x -retning. Metoden for å legge til eit atom tek imot ein atom peikar og sjekkar om atomet ligg i cella.

```
void addAtom(Atom * atom){  
    if(atom->position.x()/(systemSize.x()) * cell->position.x())  
        addtheatom;  
}
```

Ekstra oppgåve: Prøv å lagre cellene med indeks. Oppdater deretter indeksane på kvart atom i kvar celle slik at me kan bruke N3L for å rekne ut krafta kun ei gong. Viss ikkje må me køyre testar på kvart atom to gonger frå to celler for å hindre at me rekner ut krafta to gonger.