根据初始位置r(t)，求F(t).已有初始速度v(t)

While(当前步数 < 总迭代步数)

{

For(本空间负责计算的区域内的所有原子)

{

atom.momenta + = atom.force \* 0.5 \* dt;

atom.pos += dt \* atom.momenta/M;

}

MPI\_Sendrecv(…..); // 将更新的原子数据与其他进程通信，并接收其他进程原子数据

ComputeForce(); // 重新计算本空间计算区域内的所有原子的受力，即F(t+dt)

For(本空间负责计算的区域内的所有原子)

{

atom.momenta + = atom.force \* 0.5 \* dt;

}

}