For 本空间负责计算的所有cell (cell1)

If(cell1 中有原子) then

For cell1的所有邻居cell (cell2)

If(cell2 中有原子) then

For cell1中的所有原子(atom1)

For cell2中的所有原子(atom2)

If(原子atom1序号大于原子atom2的序号) then

计算原子atom1和原子atom2的距离

根据势函数求导所得，计算两原子间的相互作用力f

Atom1.force -= f;

Atom2.force +=f;