Computerorientierte Physik, SS 13, Übung 4 Christof Gattringer

Bei der Verwendung einer d-dimensionalen Gitterstruktur empfiehlt es sich die Gitterpunkte mit nur einem einzigen, einem sogenannten "aufgerolltem" Index anzusprechen.

Es seien die Gitterpunkte des d-dimensionalen $N_1 \times N_2 \times ... \times N_d$ Gitters gegeben durch Vektoren $(n_1, n_2, ... n_d)$, mit Indexwerten $n_i = 0, 1, ... N_i - 1$ für i = 1, 2, ... d. Durch die Abbildung

$$k = n_1 + n_2 * N_1 + n_3 * N_1 * N_2 + \dots + n_d * N_1 * N_2 * \dots * N_{d-1}, \quad (1)$$

werden die Gitterpunkte in umkehrbar eindeutiger Weise durch die Adressen $k \in \{0, 1, \dots * N_1 * N_2 * \dots * N_d - 1\}$ indiziert.

Es ist hilfreich, zu jedem Punkt mit Adresse k auch die Adressen seiner 2d Nachbarn in einem Feld $\mathtt{neib}(k,\mu)$ mit $\mu=1,2,\dots 2d$ anzugeben. Dabei ist k die Adresse des zentralen Punktes, $\mathtt{neib}(k,\mu)$ mit $\mu=1,2,\dots d$ enthält die Adressen der Nachbarn in die positive μ -Richtung, und $\mathtt{neib}(k,d+\mu)$ mit $\mu=1,2,\dots d$ die Adressen der Nachbarn in die negative μ -Richtung.

Studieren Sie insbesondere den zweidimensionalen Fall d=2, und schreiben Sie ein Unterprogramm welches das Nachbarnfeld $\mathtt{neib}(k,\mu)$ füllt, wobei in beiden Richtungen periodische Randbedingungen implementiert werden sollen. Testen Sie das befüllte Nachbarnfeld, etwa durch Ausgabe einzelner Einträge.