Listas de vecinos

Dividimos el recinto de simulación en celdas más chicas, de lado mayor a $\sigma + \mathrm{skin}$.

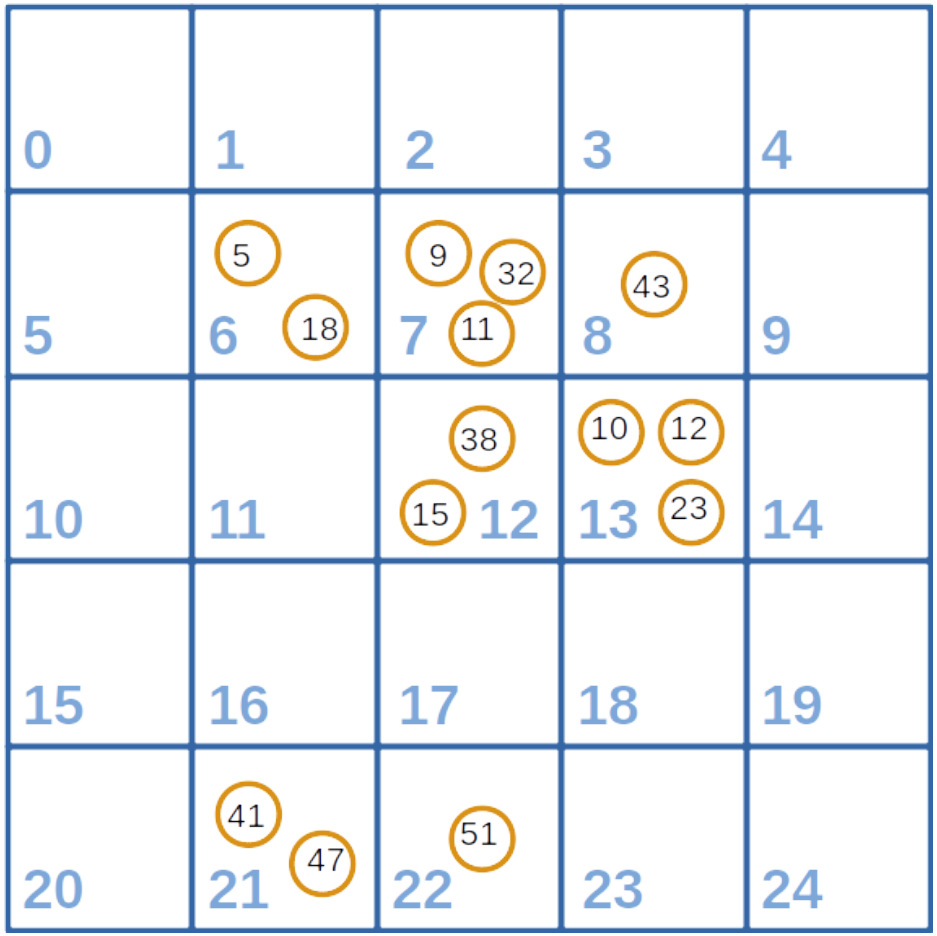


Figure: Celdas numeradas con partículas.

Organización de los datos

Las partículas se pueden ordenar como una "lista encadenda".

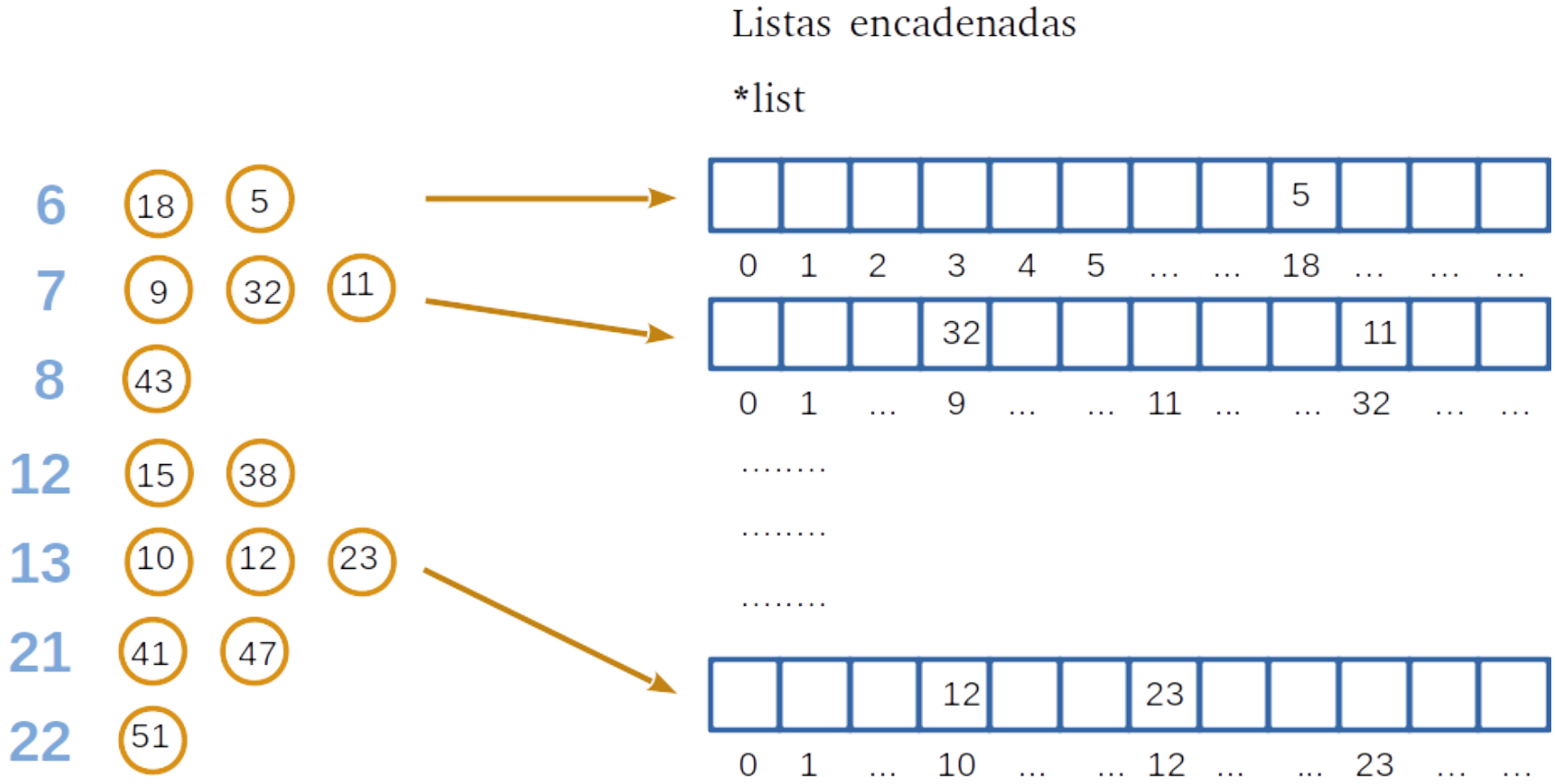


Figure: Ordenamiento de los datos.

La lista de vecinos

(a) Podemos armar una lista única porque no hay repetición de índices ni datos entre los vectores. Llamamos al puntero que almacena esto *list.

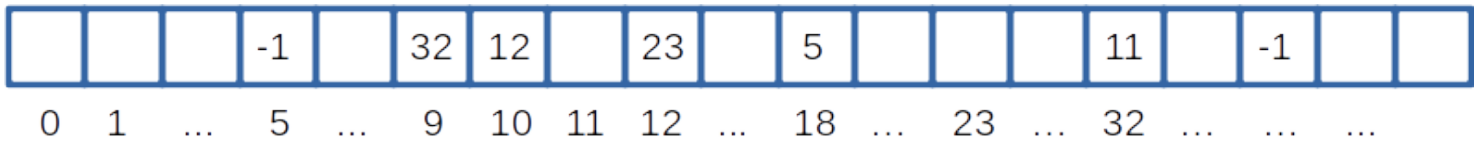


Figure: Puntero *list.

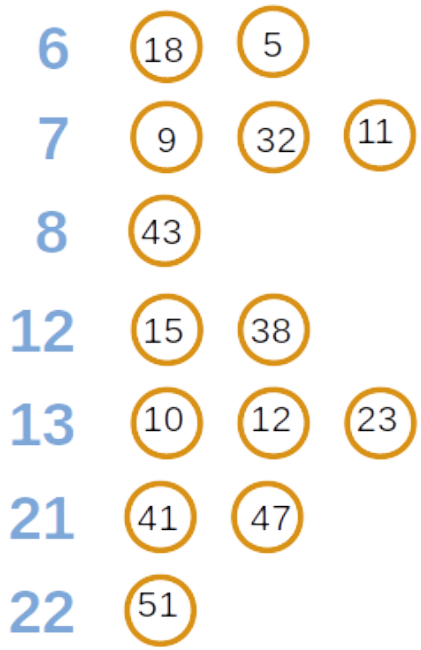
(b) Para recorrer la lista sólo hace falta una instrucción:
j= *(list+j);

(c) Necesitamos un mecanismo para "terminar el recorrido" en la lista encadenada. Para "terminarlo" ponemos un valor -1.

while (j != -1) j = *(list+j);

Cabeza de la lista

(d) Necesitamos otro puntero para "iniciar el recorrido" en cada celda.



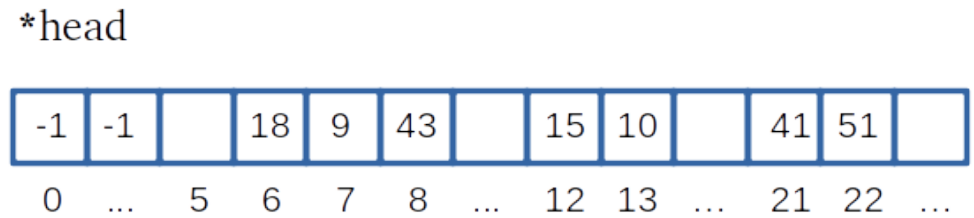


Figure: Encabezamiento de la lista.

```
j = *(head+cell);
while (j != -1)    j = *(list+j);
```

Construcción de *head y *list

Pasos para construir ambos punteros (¡antes de comenzar la simulación!)

(1) Inicializo *head con "-1".

(2) Divido el recinto de simulación en celdas pequeñas. Genero la numeración de las celdas para cada partícula. Asigno *list y *head.

```
for(h=0;h<N;h++) {
    i = (int)((*(x+3*h+0))/C);
    j = (int)((*(x+3*h+1))/C);
    k = (int)((*(x+3*h+2))/C);

    cell = i*M*M+j*M+k;

    *(list+h) = (*(head+cell));
    *(head+cell) = h;
}
```

Ejemplo

Consideramos la celda 6:

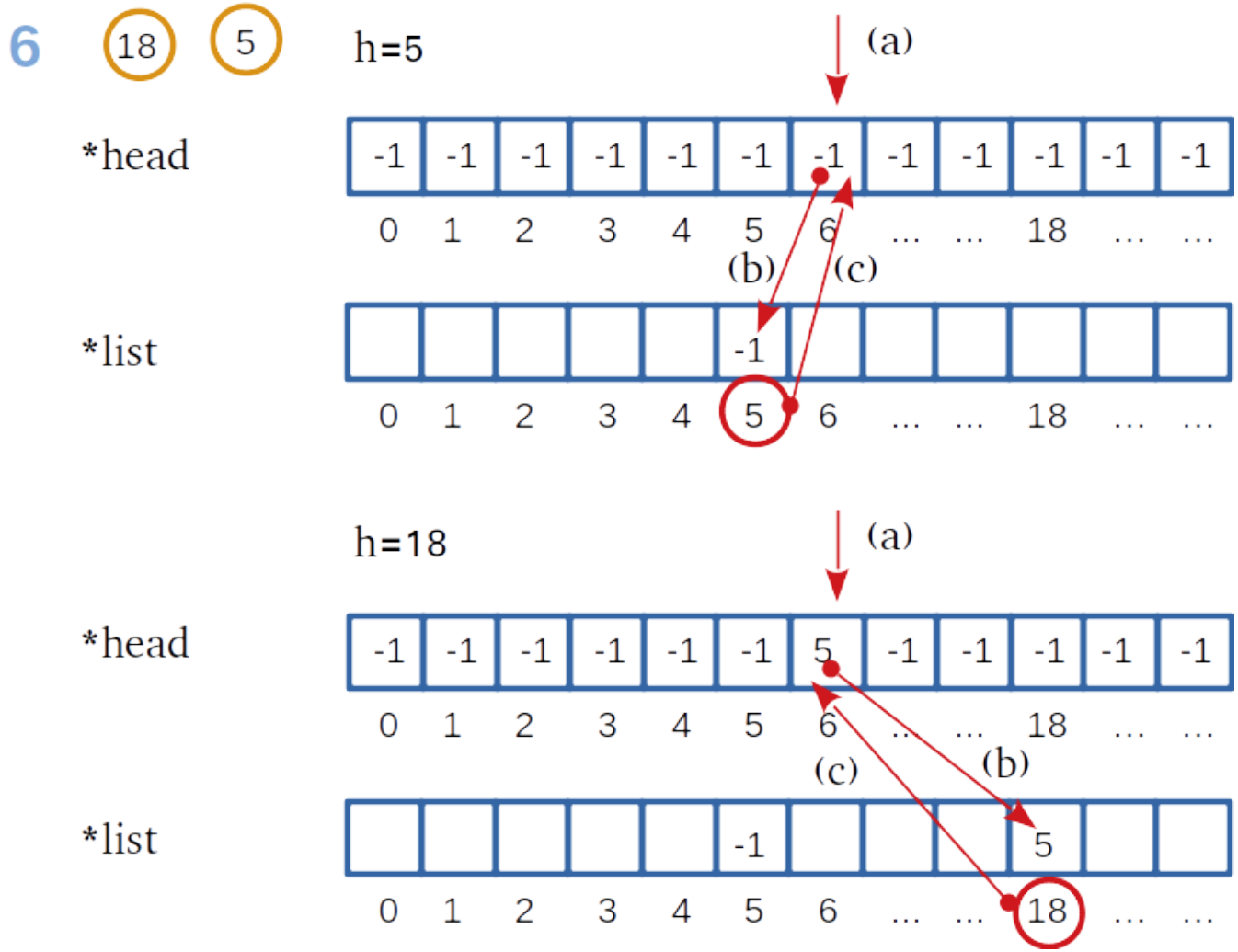


Figure: Encabezamiento de la lista.

Lectura de la lista

```
for(i=0;i<M;i++) {
for(j=0;j<M;j++) {
for(k=0;k<M;k++) {
      c = i*M*M+j*M+k;
      for(ii=i-1;ii<=i+1;ii++) {
      for(jj=j-1;jj<=j+1;jj++) {
      for(kk=k-1;kk<=k+1;kk++) {
          cc = ((ii+M)%M)*M*M+((jj+M)%M)*M+((kk+M)%M);
          h = *(head+c);
          while (h != -1) {
              hh = *(head+cc);
              while (hh != -1) {
                  [ if (h<hh) calcular fuerzas entre h y hh ]
              }
          }
      }}}
}}}
```