mdspass2改良点

2016年6月21日

主にメモリリーク関係のバグをつぶしました。

* delete[] x, y, z 🡪 delete[] x; delete[] y; delete[] z と書かなければいけなかったので、この点を修正。（対象ファイル多数）ｓ
* array\_set.cpp の中を、new と delete 文に統一(malloc,free等の使用を止めた)。ただしメモリリークはこれが原因ではなかった。
* e\_force\_mishin.cpp 内で delete[] の所のバグを修正（typoのため配列が解放されていなかった）。
* e\_force\_mishin.cpp 内で、メッシュデータを呼ぶときに引数がデータ範囲外となった場合にセグフォで落ちる現象があったので、データ範囲を強制的にmax/min内に収めるようにした。NEB等で構造が変になった時に起こる現象。

2016年6月22日

* NEB計算において、原子が変位する最大距離を見積もり、自動的にブックキーピングし直すようにした。従来はユーザーがあらかじめ大きめのカットオフ距離を設定してやる必要があり、それが足りないとエネルギーカーブが正しく得られない（不連続点ができる）という問題があったが、これを解消した。