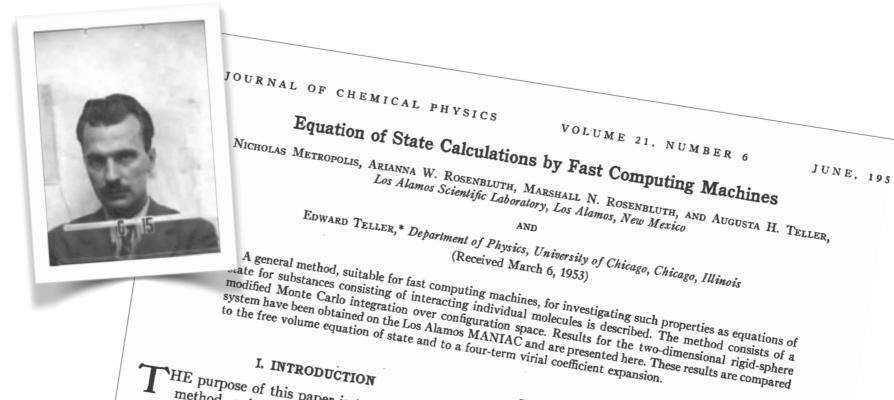
# METROPOLIS MONTE CARLO

- entstanden vor anderen MD Simulationen
- basiert auf Wahrscheinlichkeitsverteilungen
- effizient zu berechnen



HE purpose of this paper is to describe a general method, suitable for fast electronic computing machines, of calculating the properties of any substance which may be considered as composed of interacting individual molecules. Classical statistics :

II. THE GENERAL METHOD FOR AN ARBITRARY POTENTIAL BETWEEN THE PARTICLES In order to reduce the problem to a fe numerical work we can

### IMPLEMENTIERUNG & HERAUSFORDERUNG

- ▶ 1 Ausgangskonfiguration, bekannte potentielle Energie
- 2 Nehme zufällige Änderung (hier: an Position) vor
- 3 Berechne potentielle Energie nach Änderung
- > 4 Potentielle Energie hat abgenommen -> behalte Änderung, gehe zu 7
- ullet 5 Potentielle Energie hat zugenommen -> MC test  $e^{-\Delta E_{pot}/kT} > u \sim \mathrm{unif}(0,1)$
- ▶ 6 Wenn MC-Test erfüllt: Änderung behalten, sonst verwerfen
- > 7 Bis Zielanzahl Durchgänge erreicht -> gehe zu 1<sub>0.8</sub>
- 8 Endkonfiguration ist Resultat

▶ Wie die Änderung bemessen so dass "behalten" : "verwerfen"



Leap-Frog, ΔE

## RESULTATE: NVT ENSEMBLE (N=1000, T=120K)

--- Leap-Frog, E

100

75



MC DURCHGANG

-4200

-4400

-4600

-4800

-5000

