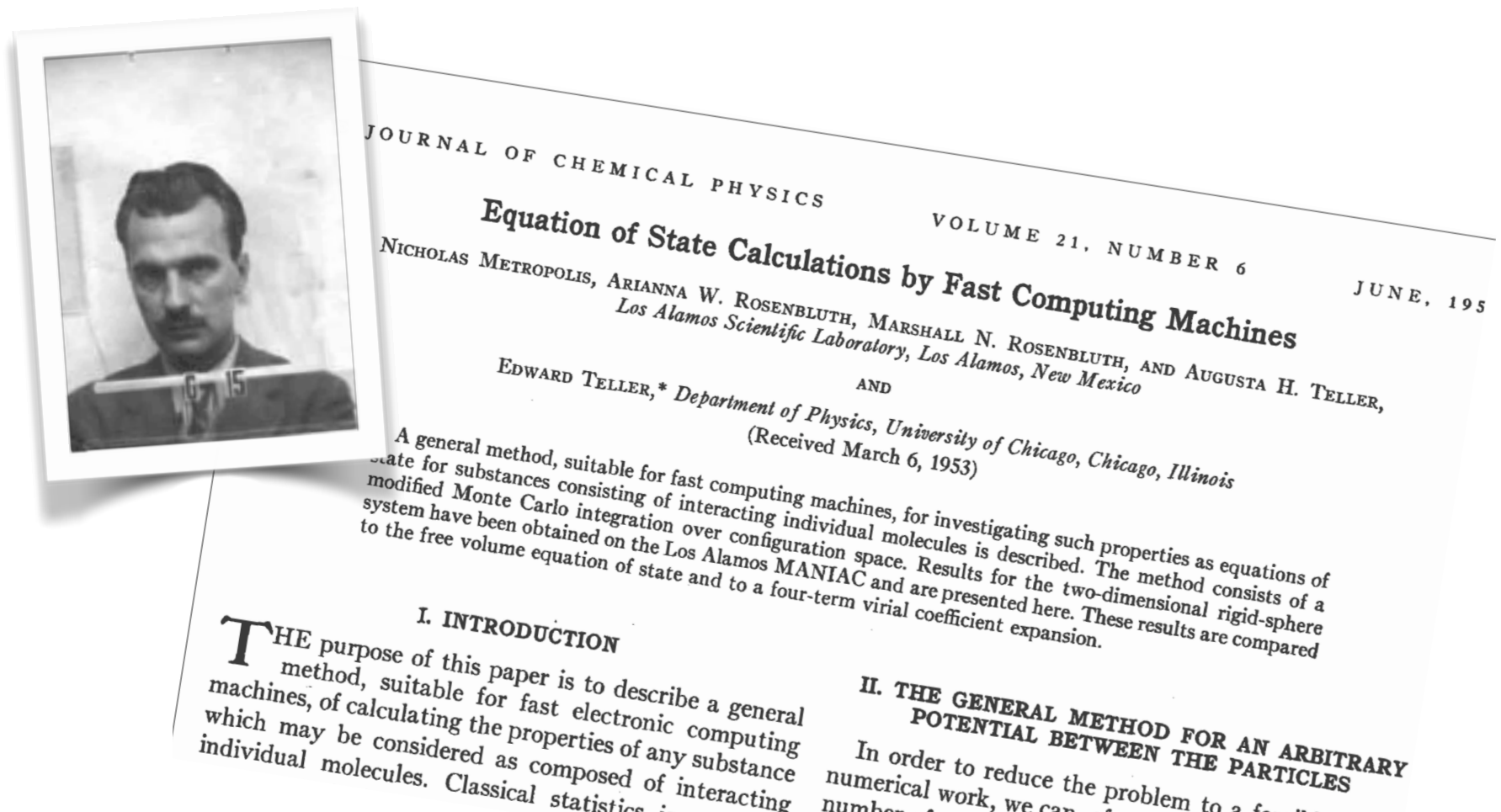


METROPOLIS MONTE CARLO

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



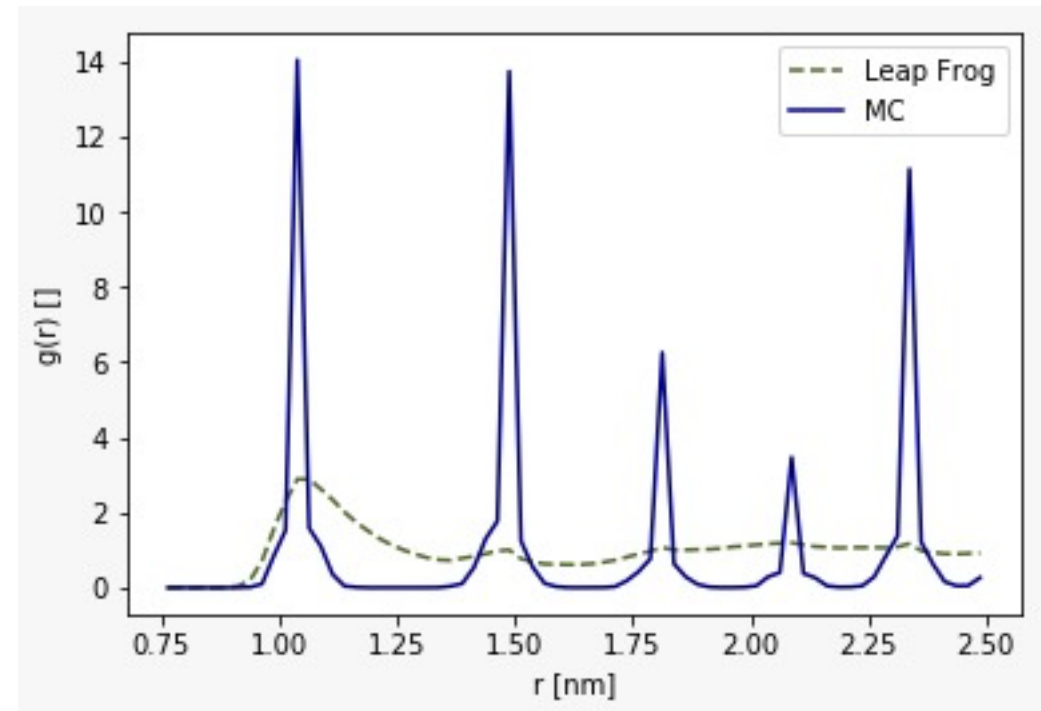
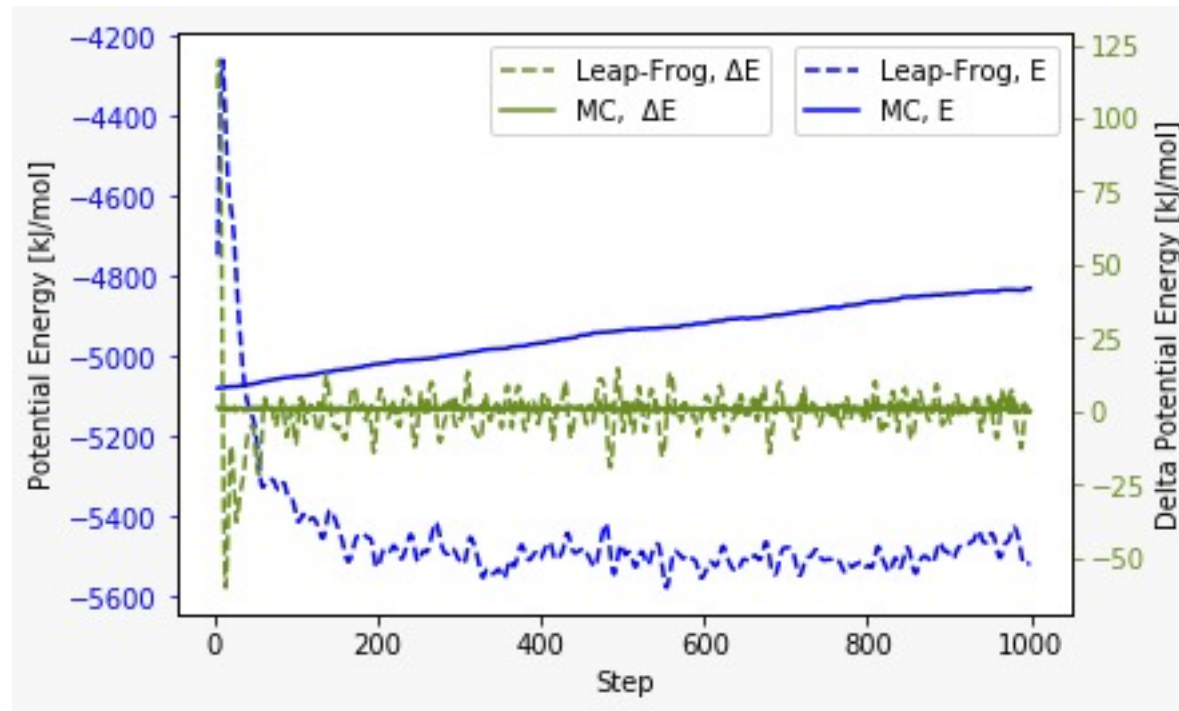
IMPLEMENTIERUNG & HERAUSFORDERUNG

- ▶ 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
 - ▶ 5 Potentielle Energie hat zugenommen -> MC test $e^{-\Delta E_{pot}/kT} > u \sim \text{unif}(0, 1)$
 - ▶ 6 Wenn MC-Test erfüllt: Änderung behalten, sonst verwerfen
 - ▶ 7 Bis Zielanzahl Durchgänge erreicht -> gehe zu 1
 - ▶ 8 Endkonfiguration ist Resultat
- ▶ Wie die Änderung bemessen so dass "behalten" : "verwerfen" etwa 1:1?



RESULTATE: NVT ENSEMBLE ($N=1000$, $T=120\text{K}$)

1 PARTIKEL BEWEGT /
MC DURCHGANG



N PARTIKEL BEWEGT /
MC DURCHGANG

