

```

INTEGER N počet atomů
VECTOR r[1..N] konfigurace { $\mathbf{r}_i$ }i=1N
REAL Epair[1..N,1..N] tabulka párových energií
REAL Ezkus[1..N] párové energie zkušební konfigurace
REAL Utot, Uzkus, U
REAL u(VECTOR r1,r2) funkce vracející párovou energii  $u(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$  atomů s polohami  $\mathbf{r}_1$  a  $\mathbf{r}_2$ 
                    (vzhledem k okrajovým podmínkám – viz algoritmus 5.1 nebo 5.2)
REAL rnd() funkce vracející náhodné číslo v intervalu (0,1)
INTEGER i, j
REAL d velikost zkušebního posunutí

Předem: naplnění tabulky párových energií
FOR i := 1 TO N-1 DO
  FOR j := i+1 TO N DO nyní (i,j) prochází všechny páry částic,  $i < j$ 
    Epair[i,j] := u(r[i],r[j])
    Epair[j,i] := Epair[i,j]

Jeden cyklus MC simulace (1 MC krok s každým atomem)
Utot := 0
FOR i := 1 TO N DO
  zkušební posunutí atomu i
  VECTOR rzkus
  rzkus.x := r[i].x + d*(rnd()-0.5)
  rzkus.y := r[i].y + d*(rnd()-0.5)
  rzkus.z := r[i].z + d*(rnd()-0.5)

  výpočet staré a nové energie: součet přes všechny atomy různé od i
  Uzkus := 0
  U := 0
  FOR j := 1 TO N DO IF j <> i THEN
    Ezkus[j] := u(r[j],rzkus)
    Uzkus := Uzkus + Ezkus[j]
    U := U + Epair[i,j]

Metropolisův test; k je Boltzmannova konstanta
IF rnd() < exp(-(Uzkus-U)/(k*T)) THEN
  konfigurace přijata
  r[i] := rzkus
  Utot := Utot + Uzkus
  FOR j := 1 to N do
    Epair[j,i] := Ezkus[j]
    Epair[i,j] := Ezkus[j]
ELSE konfigurace odmítnuta
  Utot := Utot + U

PRINT "energie konfigurace =", Utot/2
příspěvek od každého páru jsme započítali dvakrát, proto Utot/2

```

Algoritmus 4.2: Metropolisova MC simulace N atomů a výpočet vnitřní energie.