

Molekylær Statistik, Eksamens Projekter

Anders S. Christensen
andersx@nano.ku.dk

Jimmy C. Kromann
jimmy@charnley.dk

Kemisk Institut
Københavns Universitet

May 27, 2013

- 1 Diffusion Coefficient of the Lennard-Jones Fluid
- 2 Genetic Algorithm
- 3 Ising Spin-Lattice Model

Projekt 1: Diffusion

Projekt 3: 2D Ising Model

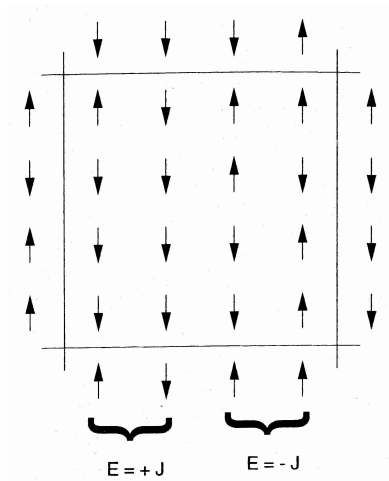
Representation of 2D magnetic solid

- Monte Carlo is used to simulate fluctuations

- $\epsilon_{ij} = -J \cdot S_i \cdot S_j$

- Boltzmann Distribution:

$$p(E_i) \propto \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$$



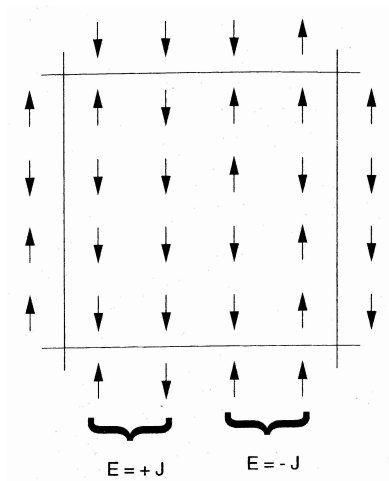
Representation of 2D magnetic solid

- Monte Carlo is used to simulate fluctuations

- $\epsilon_{ij} = -J \cdot S_i \cdot S_j$

- Boltzmann Distribution:

$$p(E_i) \propto \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$$



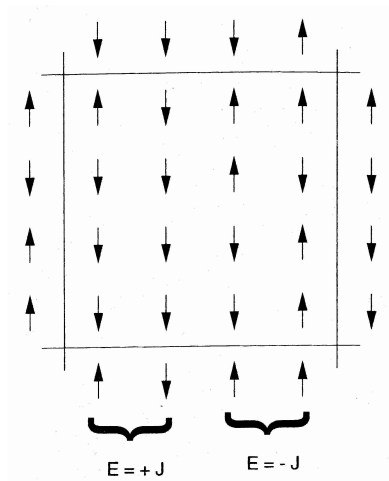
Representation of 2D magnetic solid

- Monte Carlo is used to simulate fluctuations

- $\epsilon_{ij} = -J \cdot S_i \cdot S_j$

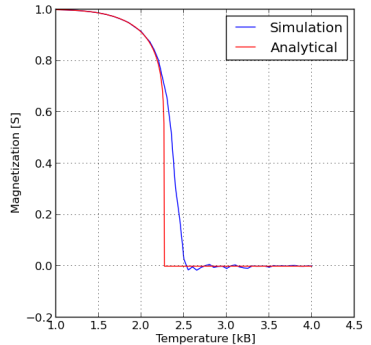
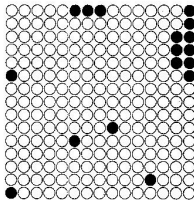
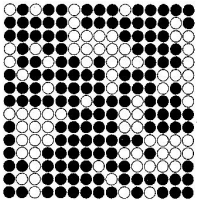
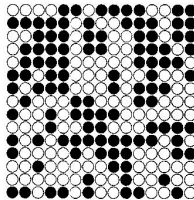
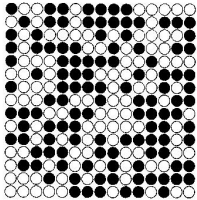
- Boltzmann Distribution:

$$p(E_i) \propto \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$$



Projekt 3: 2D Ising Model

Phase transitions: High \rightarrow low temperature



Project description:

- Implement the Monte Carlo Metropolis-Hastings algorithm in Python (with Numpy).
- Simulate the 2D Ising spin lattice.
- Calculate interesting properties such as heat capacity, magnetization, and magnetic susceptibility.

Project description:

- Implement the Monte Carlo Metropolis-Hastings algorithm in Python (with Numpy).
- Simulate the 2D Ising spin lattice.
- Calculate interesting properties such as heat capacity, magnetization, and magnetic susceptibility.

Project description:

- Implement the Monte Carlo Metropolis-Hastings algorithm in Python (with Numpy).
- Simulate the 2D Ising spin lattice.
- Calculate interesting properties such as heat capacity, magnetization, and magnetic susceptibility.

Generelt:

- Programmeringen udføres i små grupper.
- Rapporterne er individuelle.

Vejledere:

- Jimmy er vejleder på diffusion og genetisk algoritme.
- Anders er vejleder på Ising-modellen.

Hvis I sidder fast:

- 1 Arbejd sammen med en anden gruppe.
- 2 Skriv en mail og aftal at mødes med vejlederen.

Generelt:

- Programmeringen udføres i små grupper.
- Rapporterne er individuelle.

Vejledere:

- Jimmy er vejleder på diffusion og genetisk algoritme.
- Anders er vejleder på Ising-modellen.

Hvis I sidder fast:

- 1 Arbejd sammen med en anden gruppe.
- 2 Skriv en mail og aftal at mødes med vejlederen.

Generelt:

- Programmeringen udføres i små grupper.
- Rapporterne er individuelle.

Vejledere:

- Jimmy er vejleder på diffusion og genetisk algoritme.
- Anders er vejleder på Ising-modellen.

Hvis I sidder fast:

- 1 Arbejd sammen med en anden gruppe.
- 2 Skriv en mail og aftal at mødes med vejlederen.

Generelt:

- Programmeringen udføres i små grupper.
- Rapporterne er individuelle.

Vejledere:

- Jimmy er vejleder på diffusion og genetisk algoritme.
- Anders er vejleder på Ising-modellen.

Hvis I sidder fast:

- 1 Arbejd sammen med en anden gruppe.
- 2 Skriv en mail og aftal at mødes med vejlederen.

Generelt:

- Programmeringen udføres i små grupper.
- Rapporterne er individuelle.

Vejledere:

- Jimmy er vejleder på diffusion og genetisk algoritme.
- Anders er vejleder på Ising-modellen.

Hvis I sidder fast:

- 1 Arbejd sammen med en anden gruppe.
- 2 Skriv en mail og aftal at mødes med vejlederen.