

Computationele fysica (C001827)

Cursusomvang *(nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)*

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Contacturen

52.5u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2022-2023

A (semester 1)

Nederlands

Gent

werkcollege: PC-
klasoefeningen
hoorcollege
project

22.5u

30.0u

16.25u

Lesgevers in academiejaar 2022-2023

Ryckebusch, Jan

WE05

Verantwoordelijk lesgever

Verstraelen, Toon

WE05

Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2022-2023

stptn

aanbodsessie

Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting
fysica en sterrenkunde)

6

A

Master of Science in de fysica en de sterrenkunde

6

A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

Computationele fysica, numerieke technieken, simulatietechnieken, algoritmes,
onzekeerheidskwantificatie

Situering

Slechts een beperkt aantal problemen uit de fysica hebben een analytische oplossing. Heel wat fysische problemen kunnen efficiënt opgelost worden met de hulp van computersimulaties, numerieke technieken en op fysica gebaseerde algoritmes. Vandaar dat computationele fysica vaak als een derde tak naast theoretische en experimentele fysica wordt gezien. Een caleidoscopisch overzicht van de belangrijkste methodes in de computationele fysica wordt gegeven. Binnen de context van dit opleidingsonderdeel worden voorbeelden uit de kwantummechanica, statistische fysica en vastestoffysica in detail uitgewerkt. Dit is geen opleidingsonderdeel "programmeren", maar een cursus die aan de hand van concrete voorbeelden uit de hedendaagse fysica aantoont hoe men fysica kan bedrijven met behulp van een computer.

Inhoud

De fysica problemen die aan bod komen zijn:

* Kwantumverstrooiing in een sferische symmetrische potentiaal.

* De variationele techniek voor het numeriek oplossen van de Schrödingervergelijking.

* Random systemen (random walks, diffusie en de arrow of time, percolatie)

* Simulaties in klassieke moleculaire dynamica (fases, diffusie, correlatiefuncties, de smeltransitie)

* Kwantummechanische elektronische structuur berekeningen van atomen en moleculen

* De Monte-Carlo methode toegepast op spinsystemen en vloeistoffen

Daarbij komen de volgende numerieke technieken aan bod: iteratieve procedures voor speciale functies, de wortels en de maxima bepalen van een functie, numerieke integratie en differentiatie, het oplossen van gewone differentiaalvergelijkingen (Runge-Kutta methode, Verlet algoritmes, Numerov's

methode), numerieke bewerkingen met matrices, het genereren van random getallen, Gaussische integralen, symplectische integratoren, Markov chain Monte Carlo (MCMC) methode, importance sampling in hoog-dimensionale ruimtes, variationele optimalisatie

Begincompetenties

Elementaire kennis van kwantummechanica en statistische fysica.

Eindcompetenties

- 1 Verwerven van diepe kennis van modellerings- en simuleringstechnieken.
- 2 In staat zijn om op een zelfstandige manier een fysisch probleem te doorgronden en een oplossingsmethode met behulp van de computer op te stellen. In staat zijn om fysische wetten te testen met behulp van de computer ("computerexperimenten").
- 3 Vertrouwd zijn met de numerieke technieken die gebruikt worden bij de oplossing van problemen uit de Fysica en Sterrenkunde.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk mits gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Hoorcollege, Project, Werkcollege: pc-klasoefeningen

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Oefeningen : onder begeleiding in kleine groepen

Leermateriaal

Cursusnota's zijn beschikbaar. Al het leermateriaal is vrij beschikbaar op het elektronisch leerplatform van de UGent.

Verplicht handboek : J.M. Thijssen "Computational Physics" (Cambridge University Press, Second Edition, 2007). In de handel nieuw te koop voor ongeveer 80 Euro (E-Book voor ongeveer 40 Euro).

Referenties

- 1 J.M. Thijssen "*Computational Physics*" (Cambridge University Press, Second Edition, 2007)
- 2 Nicolas J. Giordano and Hisao Nakanishi "*Computational Physics: second edition*" (Prentice Hall, 2006)
- 3 Mark Newman "*Computational Physics*" (Createspace Independent Publishing, 2013)
- 4 Luca Bottcher and Hans J. Herrmann "*Computational Statistical Physics*" (Cambridge University Press, 2021)
- 5 Rubin H. Landau, Manuel J. Paez, and Cristian C. Bordeianu "*Computational Physics: Problem Solving with Python*" (Wiley, 2015)

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

De studenten wordt de mogelijkheid geboden om individueel of in kleine groepen extra informatie rond de leerstof te bekomen.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondeling examen, Werkstuk

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondeling examen, Werkstuk

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Studenten worden beoordeeld op het maken van een project en een presentatie van dit project. Op die manier wordt het adequaat rapporteren van

wetenschappelijke resultaten aangemoedigd en aangeleerd.

Eindscoreberekening

Mondeling examen (50%) + werkstuk (50%). Indien je slaagt voor het onderdeel werkstuk, dient dit onderdeel niet hernomen te worden bij de tweede examenkans. Je hebt evenwel steeds het recht om toch je volledige tweede examenkans te benutten indien je nog niet slaagt voor het volledige opleidingsonderdeel. Het laatst behaalde examencijfer telt bij de berekening van het eindresultaat.