

Computationele fysica (C001827)

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

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2025-2026

A (semester 1)

Nederlands

Gent

werkcollege

hoorcollege

Lesgevers in academiejaar 2025-2026

Verstraelen, Toon

WE05

Verantwoordelijk lesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2025-2026

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, onzekerheidskwantificatie

Situering

Slechts een beperkt aantal problemen uit de fysica hebben een analytische oplossing. Veel 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, vastestoffysica, en weer- en klimaatmodellering 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:

- De variationele techniek voor het numeriek oplossen van de Schrödingervergelijking.
- Simulaties in klassieke moleculaire dynamica (thermodynamische ensembles, fases, diffusie, correlatiefuncties, Langevindynamica)
- Kwantummechanische elektronische structuur berekeningen van atomen en moleculen
- De Monte-Carlo methode toegepast op spinsystemen en vloeistoffen
- Weer- en klimaatmodellering

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), 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, fast Fourier transform.

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van "Programmeren", "Python for Scientists", "Kwantummechanica 1" en "Statistische Fysica".

Eindcompetenties

- 1 Modellerings- en simulatiestechnieken toelichten, verklaren en motiveren vanuit hun theoretische beschrijving.
- 2 Zelfstandig een fysisch probleem begrijpen en een computationele oplossing opstellen.
- 3 Numerieke technieken kennen en toepassen die relevant zijn voor problemen uit de Fysica en Sterrenkunde.
- 4 Fysische wetten en hypothese testen met behulp van de computer (computerexperimenten).

Creditcontractvoorwaarde

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

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege, Zelfstandig werk

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

De theorielessen worden in de vorm van hoorcolleges gegeven. Werkcolleges bestaan uit het onder begeleiding en zelfstandig oplossen van computationele projecten waarin de theorie toegepast wordt.

Studiemateriaal

Type: Handboek

Naam: Computational Physics
Richtprijs: € 63
Optioneel: nee
Taal : Engels
Auteur : Jos Thijssen
ISBN : 978-1-13917-139-7
Aantal pagina's : 640
Oudst bruikbare editie : 2
Online beschikbaar : Nee
Beschikbaar in de bibliotheek : Ja

Type: Slides

Naam: Computationele Fysica
Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
Optioneel: nee
Taal : Engels
Aantal slides : 600
Beschikbaar op Ufora : Ja
Online beschikbaar : Ja
Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Type: Software

Naam: Jupyter Notebooks met computationele opdrachten (werkcolleges)
Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
Optioneel: nee
Beschikbaar op Athena : Ja
Online beschikbaar : Ja

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

Onder begeleiding oplossen van computationele projecten. Mogelijkheid tot vraagstelling voor, tijdens en na de les, en online.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

- Theorie: mondelinge ondervraging met schriftelijke voorbereiding. Er wordt gepeild naar het inzicht in de theorie, in het bijzonder fysische en computationele aspecten. Voor dit onderdeel mogen studenten gebruik maken van hand-outs van de hoorcolleges waarvan een kopie voorzien wordt door de lesgevers. Ander cursusmateriaal mag niet geraadpleegd worden tijdens het examen.
- Werkstuk: mondelinge presentatie en verdediging. De evaluatiecriteria houden rekening met de kwaliteit van de presentatie, het nemen van initiatief, het aanwenden technische vaardigheden en een gepaste onderzoeksattitude.

Eindscoreberekening

Theorie-examen (50%) + werkstuk (50%). Studenten die slagen voor het werkstuk hoeven dit niet opnieuw af te leggen 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.

Faciliteiten voor werkstudenten

geen extra faciliteiten