

## Computational Physics (C004504)

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

**Studiepunten 6.0** **Studietijd 180 u**

**Aanbodsessies in academiejaar 2024-2025**

A (semester 1) Engels Gent

**Lesgevers in academiejaar 2024-2025**

Verstraelen, Toon	WE05	Verantwoordelijk lesgever
Caluwaerts, Steven	WE05	Medelesgever

**Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025**

	stptn	aanbodssessie
<a href="#">Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting fysica en sterrenkunde)</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in de fysica en de sterrenkunde</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Physics and Astronomy</a>	6	A
<a href="#">Uitwisselingsprogramma fysica en sterrenkunde (niveau master)</a>	6	A

**Onderwijstalen**

Engels

**Trefwoorden**

Computationele fysica, numerieke technieken, simulatietechnieken, algoritmes, onzekerheidskwantificatie

**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

Werkcollege, Hoorcollege

## Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Oefeningen : onder begeleiding in kleine groepen

## 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: Computacionele Fysica  
Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding  
Optioneel: nee  
Taal : Engels  
Aantal slides : 600  
Beschikbaar op Ufora : Ja  
Online beschikbaar : Ja

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

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**

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**

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.