

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	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
Master of Science in Physics and Astronomy	6	A
Uitwisselingsprogramma fysica en sterrenkunde (niveau master)	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: Computationale 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*

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.