

Computational Physics (C004504)

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

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodssessies in academiejaar 2026-2027

A (semester 1)

Engels

Gent

Lesgevers in academiejaar 2026-2027

Verstraelen, Toon

WE05

Verantwoordelijk lesgever

Caluwaerts, Steven

WE05

Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2026-2027

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

stptn

aanbodssessie

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. 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

Elementaire kennis van kwantummechanica 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 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

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: 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*"

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

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

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is niet mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

- Niet-periodegebonden evaluatie: werkstuk met schriftelijk verslag en mondelinge presentatie. De evaluatiecriteria houden rekening met de kwaliteit van het verslag en de presentatie, het nemen van initiatief, het aanwenden technische vaardigheden en een gepaste onderzoeksattitude.
- Periodegebonden evaluatie: mondelinge ondervraging met schriftelijke voorbereiding. Het belangrijkste evaluatiecriterium is het inzicht in de theorie en de toepassingen besproken tijdens de hoorcolleges, 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.

Eindscoreberekening

Werkstuk (50%) + Mondeling examen (50%). De examiner kan studenten die zich onttrekken aan periodegebonden en/of niet-periodegebonden evaluaties voor dit opleidingsonderdeel niet-geslaagd verklaren. Het laatst behaalde examencijfer telt bij de berekening van het eindresultaat.

Faciliteiten voor werkstudenten

geen extra faciliteiten