



DN2280 Beräkningsmetoder från mikro- till makroskalor 7,5 hp

Computational Methods from Micro to Macro Scales

Fastställande

Kursplan för DN2280 gäller från och med HT09

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Särskild behörighet

För fristående kursstuderande krävs 90 högskolepoäng varav 45 högskolepoäng inom matematik eller informationsteknik. Dessutom krävs engelska B eller motsvarande.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs kan studenten modellera, analysera och beräkna lösningar till problem med flera skalor, från Schrödingerekvationen för elektron-kärnsystem över molekylodynamik till Euler och Navier-Stokes ekvationer för kontinuumproblem.

Kursinnehåll

Differentialekvationer är fundamentala för modellering. Den växande beräkningskapaciteten gör det möjligt att använda noggrannare differentialekvationer och lösa svårare ekvationer: t.ex. att bestämma indata från fundamentala principer, och att optimalt rekonstruera indata med hjälp av mätningar. Kursen inkluderar föreläsningar, datorlaborationer och studentpresentationer om modeller, analys och beräkningsmetoder från elektron-kärnmikrosystem till Euler och Navier-Stokes makro-system med en generell matematisk metod för att härleda och förklara koppling mellan modellerna på olika skalor.

- Relation mellan Schrödinger-molekylodynamik- kontinuum partiella differentialekvationer
- Ehrenfest dynamik och surface-hopping
- Born-Oppenheimer approximationen
- metoder för elektronstrukturberäkningar- kopplingen mellan ab initio och empirisk molekylodynamik
- molekylodynamik: termodynamik och statistisk mekanik
- molekylodynamik: ensembler och simuleringar
- stokastisk Langevin och Smoluchowski molekylodynamik
- reaktionsvägar för molekylodynamik
- Euler och Navier-Stokes ekvationer härledda från molekylodynamik
- projektpresentationer.

Kurslitteratur

Föreläsningsanteckningar

Examination

- TEN1 - Tentamen, 4,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- LAB1 - Laboration, 3,5 hp, betygsskala: P, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

I denna kurs tillämpas skolans hederskodex, se: <http://www.kth.se/csc/student/hederskodex>.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.