FSI3080 Beräkningsfysik 7,5 hp

Computational Physics

Fastställande

Kursplan för FSI3080 gäller från och med VT09

Betygsskala

G

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Statistisk fysik, modern fysik samt viss vana vid datorer och datorprogrammering.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Doktoranden ska efter genomgången kurs kunna:

- kunna identifiera skillnaden mellan simuleringar och andra approximativa och analytiska metoder.
- kunna utföra simuleringar och beräkningar med några befintliga program.
- ha tillräcklig insikt om programmens uppbyggnad för att själv kunna skriva enkla program och modifiera befintliga program.

- kunna beskriva betydelsen och begränsningarna hos ett antal grundläggande modeller med mycket breda tillämpningar.
- kunna kritiskt bedöma resultaten med hänsyn tagen till begränsningar hos modellerna och den statistiska naturen hos metoderna.

Kursinnehåll

Monte Carlo och molekyldynamikmetoderna. Simuleringar i olika statistisk mekaniska ensembler. Fria energiberäkningar. Stokastisk dynamik. Tillämpningar på spinnsystem, vätskor, polymerer och biologiska makromolekyler.

Kurslitteratur

M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer simulations of liquids kompetterad med eget material.

Examination

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.

Övriga krav för slutbetyg

Datorlaborationer. Hemuppgifter.

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.