# FSI3250 Avancerade simuleringsmetoder i statistisk fysik 7,5 hp

**Advanced Simulation Methods in Statistical Physics**

## Fastställande

Kursplan för FSI3250 gäller från och med VT09

## Betygsskala

G

## Utbildningsnivå

Forskarnivå

## Särskild behörighet

Förtrogenhet med datorer och grundläggande programmeringsförmåga.
Grundläggande statistisk fysik.
Elementär sannolikhetslära.
Grundkurs i datorsimulationer rekommenderas, men är inte obligatorisk.

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

# Lärandemål

Doktoranden ska efter genomgången kurs:

- ha en djup teoretisk förståelse av flera Monte Carlo- och molekyldynamikmetoder.
- ha praktisk erfarenhet av att implementera och använda dessa tekniker.
- kunna utföra simuleringar i olika ensembler.
- kunna utföra avancerad dataanalys med hjälp av t.ex. omviktning.
- veta när det är lämligt att tillämpa olika metoder.
- kunna utveckla nya simuleringsmetoder.

# Kursinnehåll

- Grunderna i molekyldynamik
- Grunderna i Monte Carlo-simuleringar
- Teori för Markov-kedjor, Detaljerad balans, Metropolis-metoden, osv, Konvergens, dynamik, simulering av sällsynta händelser.
- Dataanalys: Feluppskattning. Autokorrelationstider. Histogramomviktning.
- Simuleringar i olika ensembler: MC i NPT, Storkanonisk ensembel. MD i kanonisk, NPT ensembel, etc.
- Simuleringar i utökade ensembler: Parallell-tempering (replica exchange MC), Multikanonisk, Simulerad tempering, etc. Wang-Landau-metoden.
- Fria energiberäkningar: Integrationsmetoden (temperatur, densitet eller andra parametrar), Umbrella sampling, Partikelinsättning,
- Klusteruppdateringar: Swendsen-Wang, Wolff
- Kvant-Monte Carlo: Vägintegrals-MC, Avbildning till klassiska problem, Stokastisk serieutveckling (SSE), Worm-algoritmen.

# Kursupplägg

Den här kursen kommer att ge dig en teoretisk förståelse av avancerade simuleringsmetoder, samt ge praktisk erfarenhet av att använda "state-of-the-art"-metoder. Vi går igenom den teoretiska grunden för molekyldynamik- och Monte Carlo-algoritmer, och diskuterar olika sätt att snabba upp simuleringar med hjälp av klusteruppdateringsmetoder, parallell-tempering, etc. Vi diskuterar hur man använder det insamlade datat på ett effektivare sätt och metoder för beräkning av den fria energin, som inte är helt okomplicerad. Även om tillämpningsområdet i kursen är statistisk fysik, är metoderna som diskuteras här applicerbara för många andra problem också.

# Kurslitteratur

Föreläsningsanteckningar, artiklar och böcker.

## 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

Datorlabbar/projektarbeten. Ett kort seminarium.

## 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.