



# SI2530 Beräkningsfysik 7,5 hp

## Computational Physics

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

### Fastställande

Kursplan för SI2530 gäller från och med HT07

### Betygsskala

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

### Utbildningsnivå

Avancerad nivå

### Huvudområden

Fysik, Teknisk fysik

### Särskild behörighet

Rekommenderade förkunskaper: Statistisk fysik motsvarande SI1161 (5A1340), modern fysik samt viss vana vid datorer och datorprogrammering.

### Undervisningspråk

Undervisningspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

### Lärandemål

Kursen avser att ge en introduktion till det område av fysiken, beräkningsfysiken, som växt fram vid sidan av den experimentella och teoretiska fysiken. Målsättningen är att studenterna efter genomgången kurs skall:

- 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 molekylodynamikmetoderna. Simuleringar i olika statistisk mekaniska ensembler. Fria energiberäkningar. Stokastisk dynamik. Tillämpningar på spinsystem, vätskor, polymerer och biologiska makromolekyler.

## Kurslitteratur

M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer simulations of liquids kompetterad med eget material som finns tillgängligt på web-sidan.

## Examination

- INL1 - Inlämningsuppgift, 4,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- LAB1 - Datorlaborationer, 3,0 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.

## Övriga krav för slutbetyg

Datorlaborationer (LAB1; 3 hp)  
Hemuppgifter (INL1; 4,5 hp)

## 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.