Beräkningsfysik

Programkurs

6 hp

Computational Physics

TFYA90

Gäller från: 2019 VT

Fastställd av
Programnämnden för elektroteknik, fysik och matematik, EF

Fastställandedatum
2018-08-31

Huvudområde
Teknisk fysik, Fysik

Utbildningsnivå
Avancerad nivå

Fördjupningsnivå
A1X

Kursen ges för
- Masterprogram i fysik och nanovetenskap
- Masterprogram i Materials Science and Nanotechnology
- Civilingenjör i teknisk fysik och elektroteknik - internationell
- Civilingenjör i teknisk fysik och elektroteknik

Förkunskapskrav
OBS! Tillträdeskrav för icke programstudenter omfattar vanligen också tillträdeskrav för programmet och ev. tröskelkrav för progression inom programmet, eller motsvarande.

Rekommenderade förkunskaper
Termodynamik och statistisk mekanik (TFYA12) och Kvantmekanik (TFFY54), eller motsvarande kurser som täcker samma material och förkunskaper. Grundläggande kunskaper i datorer och programmering.

Lärandemål

Kursen är en introduktion till modern beräkningsfysik som används i fysik, materialvetenskap, kvantkemi och biologi. Kursen går igenom grundläggande principer i simulationer baserade på både klassisk fysik och kvantmekanik, huvudkomponenterna i programvara för datorberäkningar, och praktiska tillämpningar. Inkluderat är klassisk och ab-inito molekyldynamik och Monte Carlo-simuleringar, variationskalkyl, kvantmekanik för mångpartikelsystem, och täthetsfunktionalteori (DFT). Detta är metoder som idag används flitigt både inom grundforskning och i tillämpade sammanhang som t.ex. simulering av kristalltillväxt, design av nya läkemedel och bioteknologi, både inom akademi och industri. Efter fullgjord kurs ska studenten kunna:

- Behärska grundläggande huvudidéer och teorier för både klassisk och kvantmekanisk beräkningsfysik.
- Förstå huvudkomponenterna i de beräkningsprogram som används för att simulera material och för att finna numeriska lösningar till mångpartikelproblem i kvantmekaniken.
- Använda datorberäkningar för att förutsäga egenskaper för material och molekylsystem.

Kursinnehåll

Kursen behandlar teori och praktiskt handhavande av datorsimuleringar av både klassiska och kvantmekaniska mångpartikelsystem. Kursen inleds med en översikt över den del av den statistiska mekaniken som ligger till grund för datorsimuleringar. Därefter introduceras simuleringsteknikerna Monte Carlo (MC) och molekyldynamik (MD). Kursen tar sedan upp MC-integration, viktsampling, Metropolis-algoritmen, integrering av rörelseekvationerna för mångpartikelsystem i MD, Verlets algoritm, MC och MD i olika ensembler. Kursen ger vidare en introduktion till variationskalkyl och kvantmekanik för mångpartikelsystem. Sedan härleds och diskuteras metoderna Hartree, Hartree-Fock och täthetsfunktionalteori, samt även ab-inito molekyldynamik. Kursen täcker grundläggande teori i dessa ämnen och översiktligt hur de implementeras i programvara för datorberäkningar, samt, några exempel på hur metoderna används. Kursen har fyra datorlaborationer med praktiska övningar med programvaror för datorberäkningar där man genererar data och sedan analyserar och visualiserar resultatet.

Undervisnings- och arbetsformer

Kursen består av en teoridel (22 h) med laborationer (4x4 h).

Examination

LAB1	Laborationskurs	2 hp	U, G
UPG1	Inlämningsuppgifter	4 hp	U, 3, 4, 5

Betygsskala
Fyrgradig skala, LiU, U, 3, 4, 5

Institution
Institutionen för fysik, kemi och biologi

Studierektor eller motsvarande
Magnus Boman

Examinator
Valeriu Chirita

Kurshemsida och andra länkar
http://www.ifm.liu.se/undergrad/fysikgtu/coursepage.html?selection=all&sort=kk

Undervisningstid
Preliminär schemalagd tid: 38 h
Rekommenderad självstudietid: 122 h

Kurslitteratur

Böcker

M.P. Allen & D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* Oxford Science Publications
ISBN: ISBN 0-19-855645-4

Kompendier

Irina Yakymenko, Lecture notes on Computational Physics for Quantum Mechanical Many-Particle Systems

Generella bestämmelser

Kursplan

För varje kurs finns en kursplan. I kursplanen anges kursens mål och innehåll samt de särskilda förkunskaper som erfordras för att den studerande skall kunna tillgodogöra sig undervisningen.

Schemaläggning

Schemaläggning av kurser görs efter, för kursen, beslutad blockindelning. För kurser med mindre än fem deltagare, och flertalet projektkurser läggs inget centralt schema.

Avbrott på kurs

Enligt rektors beslut om regler för registrering, avregistrering samt resultatrapportering (Dnr LiU-2015-01241) skall avbrott i studier registreras i Ladok. Alla studenter som inte deltar i kurs man registrerat sig på är alltså skyldiga att anmäla avbrottet så att kursregistreringen kan tas bort. Avanmälan från kurs görs via webbformulär, www.lith.liu.se/for-studenter/kurskomplettering?l=sv.

Inställd kurs

Kurser med få deltagare (< 10) kan ställas in eller organiseras på annat sätt än vad som är angivet i kursplanen. Om kurs skall ställas in eller avvikelse från kursplanen skall ske prövas och beslutas detta av programnämnden.

Föreskrifter rörande examination och examinator

Se särskilt beslut i regelsamlingen:
http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622678

Examination

Tentamen

Skriftlig och muntlig tentamen ges minst tre gånger årligen; en gång omedelbart efter kursens slut, en gång i augustiperioden samt vanligtvis i en av omtentamensperioderna. Annan placering beslutas av programnämnden.

Principer för tentamensschemat för kurser som följer läsperioderna:

- kurser som ges Vt1 förstagångstenteras i mars och omtenteras i juni och i augusti
- kurser som ges Vt2 förstagångstenteras i maj och omtenteras i augusti och i oktober
- kurser som ges Ht1 förstagångstenteras i oktober och omtenteras i januari

och augusti
- kurser som ges Ht2 förstagångstenteras i januari och omtenteras i påsk och i augusti

Tentamensschemat utgår från blockindelningen men avvikelser kan förekomma främst för kurser som samläses/samtenteras av flera program samt i lägre årskurs.

- För kurser som av programnämnden beslutats vara vartannatårskurser ges tentamina 3 gånger endast under det år kursen ges.
- För kurser som flyttas eller ställs in så att de ej ges under något eller några år ges tentamina 3 gånger under det närmast följande året med tentamenstillfällen motsvarande dem som gällde före flyttningen av kursen.
- Har undervisningen upphört i en kurs ges under det närmast följande året tre tentamina samtidigt som tentamen ges i eventuell ersättningskurs, alternativt i samband med andra omtentamina. Dessutom ges tentamen ytterligare en gång under det därpå följande året om inte programnämnden föreskriver annat.
- Om en kurs ges i flera perioder under året (för program eller vid skilda tillfällen för olika program) beslutar programnämnden/programnämnderna gemensamt om placeringen av och antalet omtentamina.

Anmälan till tentamen

För deltagande i tentamina krävs att den studerande gjort förhandsanmälan i Studentportalen under anmälningsperioden, dvs tidigast 30 dagar och senast 10 dagar före tentamensdagen. Anvisad sal meddelas fyra dagar före tentamensdagen via e-post. Studerande, som inte förhandsanmält sitt deltagande riskerar att avvisas om plats inte finns inom ramen för tillgängliga skrivningsplatser.

Teckenförklaring till tentaanmälningssystemet:
** markerar att tentan ges för näst sista gången
* markerar att tentan ges för sista gången

Ordningsföreskrifter för studerande vid tentamensskrivningar

Se särskilt beslut i regelsamlingen: http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682

Plussning

Vid Tekniska högskolan vid LiU har studerande rätt att genomgå förnyat prov för högre betyg på skriftliga tentamina samt datortentamina, dvs samtliga provmoment med kod TEN och DAT. På övriga examinationsmoment ges inte möjlighet till plussning, om inget annat anges i kursplan.

Regler för omprov

För regler för omprov vid andra examinationsformer än skriftliga tentamina och datortentamina hänvisas till LiU-föreskrifterna för examination och examinator,

http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622678.

Plagiering

Vid examination som innebär rapportskrivande och där studenten kan antas ha tillgång till andras källor (exempelvis vid självständiga arbeten, uppsatser etc) måste inlämnat material utformas i enlighet med god sed för källhänvisning (referenser eller citat med angivande av källa) vad gäller användning av andras text, bilder, idéer, data etc. Det ska även framgå ifall författaren återbrukat egen text, bilder, idéer, data etc från tidigare genomförd examination.

Underlåtelse att ange sådana källor kan betraktas som försök till vilseledande vid examination.

Försök till vilseledande

Vid grundad misstanke om att en student försökt vilseleda vid examination eller när en studieprestation ska bedömas ska enligt Högskoleförordningens 10 kapitel examinator anmäla det vidare till universitetets disciplinnämnd. Möjliga konsekvenser för den studerande är en avstängning från studierna eller en varning. För mer information
se https://www.student.liu.se/studenttjanster/lagar-regler-rattigheter?l=sv.

Betyg

Företrädesvis skall betygen underkänd (U), godkänd (3), icke utan beröm godkänd (4) och med beröm godkänd (5) användas. Kurser som styrs av tekniska fakultetsstyrelsen fastställt tentamensschema skall därvid särskilt beaktas.

1. Kurser med skriftlig tentamen skall ge betygen (U, 3, 4, 5).
2. Kurser med stor del tillämpningsinriktade moment såsom laborationer, projekt eller grupparbeten får ges betygen underkänd (U) eller godkänd (G).

Examinationsmoment

1. Skriftlig tentamen (TEN) skall ge betyg (U, 3, 4, 5).
2. Examensarbete samt självständigt arbete ger betyg underkänd (U) eller godkänd (G).
3. Examinationsmoment som kan ge betygen underkänd (U) eller godkänd (G) är laboration (LAB), projekt (PRA), kontrollskrivning (KTR), muntlig tentamen (MUN), datortentamen (DAT), uppgift (UPG), hemtentamina (HEM).
4. Övriga examinationsmoment där examinationen uppfylls framför allt genom aktiv närvaro som annat (ANN), basgrupp (BAS) eller moment (MOM) ger betygen underkänd (U) eller godkänd (G).

Rapportering av den studerandes examinationsresultat sker på respektive institution.

Regler

Universitetet är en statlig myndighet vars verksamhet regleras av lagar och förordningar, exempelvis Högskolelagen och Högskoleförordningen. Förutom lagar och förordningar styrs verksamheten av ett antal styrdokument. I Linköpings universitets egna regelverk samlas gällande beslut av regelkaraktär som fattats av universitetsstyrelse, rektor samt fakultets- och områdesstyrelser.

LiU:s regelsamling angående utbildning på grund- och avancerad nivå nås på http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/Innehall/Utbildning_pa_grund-_och_avancerad_niva.