Beräkningsfysik

Computational Physics
6 hp

Programkurs

TFYA90

Gäller från: 2027 VT

Fastställd av	**Huvudområde**	
Programnämnden för elektroteknik, fysik och matematik, EF	Teknisk fysik, Fysik	
Fastställandedatum	**Utbildningsnivå**	**Fördjupningsnivå**
2026-08-26	Avancerad nivå	A1F
Reviderad av	**Utbildningsområde**	
	Naturvetenskapliga området	
Revideringsdatum	**Ämnesgrupp**	
	Fysik	
Gavs första gången	**Gavs sista gången**	
HT 2018		
Institution	**Ersätts av**	
Institutionen för fysik, kemi och biologi		

Kursen ges för

- Civilingenjörsprogram i teknisk fysik och elektroteknik - internationell
- Civilingenjörsprogram i teknisk fysik och elektroteknik

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

Efter fullgjord kurs ska studenten kunna:

- förklara grundläggande begrepp och teorier inom beräkningsfysik baserade på både klassiska och kvantmekaniska metoder
- förklara huvudkomponenterna i de beräkningsprogram som används för att simulera material och för att finna numeriska lösningar till mångpartikelproblem i kvantmekaniken
- använda datorberäkningar och simuleringar för att förutsäga egenskaper hos material och molekylära system.

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 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 (18 h) med laborationer (3x4 h).

Examination

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

Muntlig och skriftlig redovisning av inlämningsuppgifter.

Betyg på delmoment/modul beslutas i enlighet med de bedömningskriterier som presenteras vid kursstart.

Betygsskala

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

Övrig information

Om undervisnings- och examinationsspråk

Undervisningsspråk visas på respektive kurstillfälle på fliken "Översikt". Examinationsspråk relaterar till undervisningsspråk enligt nedan:

- Om undervisningsspråk är ”Svenska” kan kursen ges i sin helhet på svenska eller delvis på engelska. Examinationsspråk är svenska, men delar av examinationen kan ske på engelska.
- Om undervisningsspråk är Engelska ges kursen i sin helhet på engelska. Examinationsspråk är engelska.
- Om undervisningsspråk är ”Svenska/Engelska” ges kursen i sin helhet på engelska om studenter utan tidigare kunskap i svenska språket deltar. Examinationsspråk följer undervisningsspråk.

Övrigt

Kursen bedrivs på ett sådant sätt att likvärdiga villkor råder med avseende på kön, könsöverskridande identitet eller uttryck, etnisk tillhörighet, religion eller annan trosuppfattning, funktionsnedsättning, sexuell läggning och ålder.

Planering och genomförande av kurs skall utgå från kursplanens formuleringar. Den kursvärdering som ingår i kursen skall därför genomföras med kursplanen som utgångspunkt.

Kursen är campusförlagd på den ort som anges för kurstillfället om inget annat anges under ”Undervisnings – och arbetsformer”. I en campusförlagd kurs kan dock enstaka moment på distans ingå.

Generella bestämmelser

Övergripande regelverk

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 vad gäller användning av andras text, bilder, idéer, data etc. Detta sker genom referenser eller citat med angivande av källa. Det ska även framgå ifall författaren återbrukat egen text, bilder, idéer, data etc från tidigare genomförd examination, exempelvis från kandidatarbete, projektrapporter etc. (ibland kallat självplagiering).

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 Fusk och plagiat.

Användning av generativ AI

Linköpings universitet har tagit fram en vägledning för lärares och studenters användning av generativ AI i utbildningen (Dnr LiU-2023-02660), https://liuonline.sharepoint.com/sites/student-rattigheter-och-skyldigheter/SitePages/generativ-ai-i-utbildning.aspx. Studenter förväntas ta reda på vad som gäller för respektive kurs (inklusive examensarbetet). Generellt gäller tydlighet för var och hur generativ AI har använts.

Ljud och bildupptagning

Huvudregeln är att ljud- och bildupptagning i undervisningssituationer inte är tillåten. Ett nekande besked till en student som vill göra en ljud- eller bildupptagning behöver inte motiveras. Det kan finnas anledning att tillåta ljud- och bildupptagning och därför är det möjligt att göra undantag från huvudregeln se Riktlinjer för studenters möjlighet till ljud- och bildupptagning i undervisningssituationer, Dnr LiU-2024-02048
https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622637

Kvalitetsansvar

Respektive programnämnd har det övergripande ansvaret för kvaliteten i

utbildningsprogrammen.

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 https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/Innehall.

Anvisningar och föreskrifter rörande kurs

Kursplan

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

Schemaläggning

Schemaläggning av programkurser görs enligt beslutad blockindelning för respektive kurs. Fristående kurser kan schemaläggas på andra tider.

Avbrott och avanmälan på kurs

Enligt beslut vid Linköpings universitet skall avbrott i studier registreras i Ladok, se Riktlinjer för villkor vid antagning samt för reservantagning och andra antagningsrelaterade frågor, Dnr LiU-2024-00782 (https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/764582). Alla studenter som inte deltar i kurs man registrerat sig på är alltså skyldiga att anmäla avbrottet så att detta kan noteras i Ladok. Avanmälan eller avbrott från kurs görs via webbformulär Blanketter och formulär

Inställd kurs eller avvikelse från kursplanen

Kurser med få anmälda 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 dekan. För fristående kurser måste inställande av kurs ske innan studenter har antagits på kursen (i enlighet med LiUs antagningsordning Dnr LiU-2025-02899, https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622645).

Examination

Se Beslut om Riktlinjer för utbildning och examination på grundnivå och

avancerad nivå vid Linköpings universitet Dnr LiU-2026-02449, (http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592).

Examinator

Examinator för en kurs ska inneha en läraranställning vid LiU i enlighet med LiUs anställningsordning, Dnr LiU-2026-01407 (https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622784). För kurser på avancerad nivå kan följande lärare vara examinator: professor (även adjungerad och gästprofessor), biträdande professor (även adjungerad), universitetslektor (även adjungerad och gästlektor), biträdande universitetslektor eller postdoktor. För kurser på grundnivå kan följande lärare vara examinator: professor (även adjungerad och gästprofessor), biträdande professor (även adjungerad), universitetslektor (även adjungerad och gästlektor), biträdande universitetslektor, universitetsadjunkt (även adjungerad och gästadjunkt) eller postdoktor. I undantagsfall kan även en Timlärare utses som examinator på både grund- och avancerad nivå, se Tekniska fakultetsstyrelsen vidaredelegationer.

Principer för tentamina (TEN, MUN, DIT, DAT)

Skriftlig och muntlig tentamen (TEN, MUN) samt digital salstentamen (DIT) och datortentamen (DAT) ges minst tre gånger per år; 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 januari
- kurser som ges Ht1 förstagångstenteras i oktober och omtenteras i januari och augusti
- kurser som ges Ht2 förstagångstenteras i januari och omtenteras i mars 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 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 och/eller inställandet av kursen.

När en kurs, eller ett tentamensmoment (TEN, DIT, DAT, MUN), ges för sista gången ska ordinarie tentamen och två omtentamina erbjudas. Därefter fasas examinationen ut under en avvecklingsperiod med tre tentamina samtidigt som tentamen ges i eventuell ersättningskurs under det följande läsåret. Undantaget är kurser som gavs i perioden HT1, där de tre examinationstillfällena blir januari, mars och augusti. Om ingen ersättningskurs finns ges tre tentamina i omtentamensperioder under det följande läsåret. Annan placering beslutas av programnämnden. I samtliga fall ges dessutom tentamen ytterligare en gång

under det därpå följande året om inte programnämnden föreskriver annat. Totalt erbjuds alltså 6 omtentamenstillfällen, varav 2 ordinarie omtentamenstillfällen. I tentaanmälningssystemet markeras tentamina som ges för näst sista respektive sista gången.

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.

För fristående kurser med tentamensmoment som inte följer blockplacering kan andra tider förekomma.

Principer för övriga examinerande moment

För övriga examinerande moment (tex, PRA, UPG, LAB, KTR mm) ska examination normalt ske innan kursen avslutas, det vill säga innan tentamensperioden.

Det bör erbjudas minst två ytterligare examinationstillfällen inom ett år från det ordinarie examinationstillfället, se generella LiU-riktlinjerna för utbildning och examination på grundnivå och avancerad nivå, Dnr LiU-2026-02449 (http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592).

Även dessa examinationsmoment ska principmässigt hanteras på samma sätt som ett tentamensmoment när de ges för sista gången. Dock kan tidpunkterna för examinationen variera utifrån momentets karaktär jämfört med tentamenstiderna.

Nedlagd kurs

För Beslut om Rutiner för administration vid avveckling av utbildningsprogram, fristående kurser och kurser inom program, se Dnr LiU-2021-04782 (https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/1156410). Efter beslut om nedläggning och efter avvecklingsperiodens slut hänvisas studenterna till ersättande kurs (eller motsvarande) enligt information i kursplan eller utbildningsplan. Om en student har godkänt i något/några delmoment (men inte alla) i en avvecklad programkurs och det finns en åtminstone delvis ersättande kurs så kan en bedömning om eventuellt tillgodoräknande ske. Vid eventuella frågor om tillgodoräkning av del av kurs, kontaktas studievägledare.

Anmälan till tentamen

För deltagande i skriftlig tentamen, digital salstentamen och datortentamen är anmälan obligatorisk, se riktlinjer för genomförande av salstentamina Dnr LiU-2024-00708 (https://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682). En oanmäld student kan således *inte* erbjudas plats. Anmälan till tentamen är öppen 30 kalenderdagar före provdatum och stänger 10 kalenderdagar innan provdatum om inget annat anges. Anmälan görs av studenten i Studentportalen eller via LiU-appen. Anvisad sal meddelas fyra dagar före tentamensdagen via e-post.

Ordningsföreskrifter för studerande vid tentamensskrivningar

Se riktlinjer för genomförande av salstentamina LiU-2024-

00708 (http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682).

Plussning

Vid Tekniska fakulteten vid LiU har studerande rätt att genomgå förnyad examination (s.k. plussning) för högre betyg på skriftliga tentamina, digital salstentamina och datortentamina, dvs samtliga provmoment med modulkod TEN, DIT och DAT. På övriga examinationsmoment ges inte möjlighet till plussning, om inget annat anges i kursplan.

Plussning är ej möjlig på kurser som ingår i utfärdad examen.

Kursbetyg och examinationsformer

Företrädesvis skall kursbetygen underkänd (U), godkänd (3), icke utan beröm godkänd (4) och med beröm godkänd (5) användas.

- Kurser med skriftlig tentamen och digital salstentamen skall ge betygen (U, 3, 4, 5).
- Kurser med stor del tillämpningsinriktade moment såsom laborationer, projekt eller grupparbeten får ge betygen underkänd (U) eller godkänd (G).
- Examensarbete samt självständigt arbete skall ge betyg underkänd (U) eller godkänd (G).

Examinationsmoment och modulkoder

Nedan anges vad som gäller för de examinationsmoment med tillhörande modulkod som tillämpas vid Tekniska fakulteten vid Linköpings universitet.

- Skriftlig tentamen (TEN) och digital salstentamen (DIT) skall ge betyg (U, 3, 4, 5).
- Examinationsmoment som får ge betygen underkänd (U) eller godkänd (G) är laboration (LAB), projekt (PRA), kontrollskrivning (KTR), digital kontrollskrivning (DIK), muntlig tentamen (MUN), datortentamen i datorsal (DAT), uppgift (UPG), hemtentamen (HEM), digital kontrollskrivning i datorsal (DAK).
- Övriga examinationsmoment där examinationen uppfylls framför allt genom aktivt deltagande som basgrupp (BAS) eller moment (MOM) skall ge betyg underkänd (U) eller godkänd (G).
- Examinationsmomenten Opposition (OPPO) och Auskultation (AUSK) inom examensarbetet skall ge betyg underkänd (U) eller godkänd (G).

Allmänt gäller att:

- Obligatoriska kursmoment skall vara poängsatta och ges en modulkod.
- Examinationsmoment som ej är poängsatt får ej vara obligatoriskt. Det är frivilligt att delta på dessa moment och information om det samt tillhörande villkor skall tydligt framgå i den beskrivande texten.
- För kurser med flera examinationsmoment med graderad betygsskala skall det anges hur slutbetyg på kursen vägs samman.

För obligatoriska moment gäller att (i enlighet med Riktlinjer för utbildning och

examination på grundnivå och avancerad nivå vid Linköpings universitet, Dnr LiU-2026-02449 http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592):

- Om det finns särskilda skäl, och om det med hänsyn till det obligatoriska momentets karaktär är möjligt, får examinator besluta att ersätta det obligatoriska momentet med en annan likvärdig uppgift.

För möjlighet till anpassade examinationsmoment gäller att (i enlighet med Riktlinjer för utbildning och examination på grundnivå och avancerad nivå vid Linköpings universitet, Dnr LiU-2026-02449 http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/917592):

- Om LiU: s koordinator för studenter med funktionsnedsättning har beviljat en student rätt till anpassad examination vid salstentamen har studenten rätt till det.
- Om koordinatorn har gett studenten en rekommendation om anpassad examination eller alternativ examinationsform, får examinator besluta om detta om examinator bedömer det möjligt utifrån kursens mål.
- Examinator får också besluta om anpassad examination eller alternativ examinationsform om examinator bedömer att det finns synnerliga skäl och examinator bedömer det möjligt utifrån kursens mål.

Rapportering av examinationsresultat

Rapportering av den studerandes examinationsresultat sker på respektive institution.