

**Fysikaliska beräkningar på högprestandatorer,
fördjupningskurs, 5 poäng**
(Computational Physics, specialized course, 5 credits)

Kursplanen är fastställd av matematisk-naturvetenskapliga fakultetsnämnden
2000-06-07.

1. Placering i utbildningen och förkunskapskrav

Kursen ingår i matematisk-datalogiska linjens inriktning mot beräkningsteknik, men kan också läsas som fristående kurs. För tillträde till kursen krävs kunskaper motsvarande totalt 80 poäng, hämtade från ämnena beräkningsteknik och matematik.

2. Mål

Kursens mål är att introducera de grundläggande koncept och tekniker av molekylodynamik och andra metoder för simulering av kondenserad materia, presentera och diskutera simuleringens roll som en oberoende forskningsmetod inom kondenserade materiens fysik samt visa några resultat som erhållits genom datorsimulering som utgör en väsentlig del av den moderna kondenserade materiens fysik, så att studenterna ska kunna förstå och använda molekylodynamisk simulering.

3. Innehåll

Numeriska metoder inom teoretisk fysik; karaktären hos matematiska experiment. Statistiska mekanikens beståndsdelar. Ensembler och ergodicitet. Genomgång och jämförelse av olika molekylodynamiska algoritmer. Beskrivning av makroskopiska egenskaper med användning av kollektivvariabler och korrelationsfunktioner. Användande av simulering för tolkning av laboratorieexperiment (icke-elastisk neutronspridning etc). Statistisk korrekthet och systematiska fel. Simulering av olika faser av kondenserad materia: kristallina solider, vätskor, glas och kvasikristaller. Bivillkorsmetoder. Icke-Newtonmetoder i molekylodynamik. Högprestandametoder inom simulering. Användande av parallellprocessning. Översikt över Monte-Carlo metoder. Metoder för strukturkaraktisering med användning av invers Monte-Carlo. Kvantsimulering.

4. Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar.

Deltagande i laborationer är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator, efter samråd med kursansvarig lärare, medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i vissa obligatoriska moment.

5. Examination

Examinationen utgörs av en projektuppgift.

Studerande som godkänts på examinationsmoment får ej undergå förnyad examination för högre betyg. Studerande som underkänts vid ordinarie examinationstillfälle har rätt att delta vid ytterligare examinationstillfällen. Studerande som underkänts på en examination två gånger har rätt att begära att annan lärare än den kursansvarige utses för att bestämma betyg på kursen. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen.

Som betyg på kursen används något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd.

6. Litteratur

Kurslitteratur fastställs av institutionsstyrelsen.