



# FSF3564 Matematiska och numeriska metoder från mikro- till makro-skalar 7,5 hp

Mathematical and Computational Methods from Micro to Macro Scales

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

## Fastställande

Kursplan för FSF3564 gäller från och med VT19

## Betygsskala

G

## Utbildningsnivå

Forskarnivå

## Särskild behörighet

Civilingenjörskurs- eller Masterexamen med minst 30 hp inom matematik (inklusive differentialekvationer och numerisk analys).

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

## Lärandemål

Efter kursen kan studenterna använda, relatera och kritiskt analysera matematiska och numeriska metoder på olika skalor.

## Kursinnehåll

Schrödingerekvationen, som noggrant beskriver partikelsystem utan okända parametrar är grunden för beräkningskemi och fysik för kondenserad materia. En väsentlig egenskap är dess höga beräkningskomplexitet, t.ex. formuleras Schrödingerekvationen för en vattenmolekyl som en partiell differentialekvation i 39 rumsdimensioner. Beräkningsapproximationer behövs därför och målet med kursen är att beskriva, använda och förstå beräkningsmetoder för approximationer på olika skalor.

Beräkningskomplexiteten reduceras med klassisk approximation av kärnornas banor, genom Born-Oppenheimerdynamik. För att numeriskt lösa det kvantmekaniska egenvärdeproblemet för elektronerna är Hartree-Fock och täthetsfunktionalteori viktiga och leder till ab initio molekylodynamik som kan lösas även för stora partikelsystem. Ab initio molekylodynamik kan ytterligare förenklas med empiriska potentialer. Termiska fluktuationer i en kanonisk ensemble med konstant temperatur, volym och antal partiklar, leder till stokastisk Langevin dynamik. På långa tidskalor och vid hög friktion kan denna dynamik beskrivas utan hastigheter med Smoluchowskis ekvation. Nästa steg i förgrovnigen i skalor är att härleda de partiella differentialekvationerna för massa, rörelsemängd och energi för en fluid på kontinuum nivå, vilket bestämmer de annars ospecificerade spänningstensorerna och värmeflödena.

## Kursupplägg

### 1. Schrödingerekvationen

- Introduktion och postulat
- Egenskaper
- Numeriska metoder för Schrödingerekvationen
- Approximationer (Born-Oppenheimer, Hartree-Fock och täthetsfunktionalteori)

### 2. Molekyldynamik

- Mikrokanonisk och kanonisk ensemble
- Stokastisk Langevindynamik
- Numeriska metoder för molekylodynamik
- Reaktionsfart och reaktionsvägar
- Från ab initio till empiriska potentialer

### 3. Kontinuumnivån

- Kontinuum fluiddynamik härledd från molekylodynamik

- En fasfältsmetod härledd från Smoluchowski-dynamik

## Kurslitteratur

Cances E., De franceschi M., Kutzelnigg W., LeBris C., Maday Y., Computational Chemistry: a primer, n Handbook of Numerical Analysis, X, North-Holland 2003. some pages.

Elliott H. Lieb and Robert Seiringer, The Stability of Matter in Quantum mechanics, Cambridge University Press 2010, chapter 2 and 3.

E Weinan, Principles of Multiscale Modeling, Cambridge University Press 2011.

## Examination

- INL1 - Inlämningsuppgift, 7,5 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.

Hemuppgifter

Datorlaborationer

Tentamen

## Övriga krav för slutbetyg

Godkända hemuppgifter och datorlaborationer

Godkänd på skriftlig tentamen

## 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.