

Tantárgy kódja: PMB2512

Tantárgy neve: Számítógépes szimulációk módszertana

Előfeltétel (tantárgyi kód): PMB1209 vagy MTB1000

Ajánlott félév: 5

### 1. A tantárgy elsajátításának célja

Fizikai és általában a természettudományi jelenségek, folyamatok szimulációjához a matematikai alapok és a programozási módszertanok elsajátítása.

### 2. Tantárgyi program

Stochasztikus módszerek, Monte Carlo szimulációk. Véletlenszám generálási algoritmusok, programnyelvi implementálásuk, tesztelési módszerek. A számítógépes fizikai módszer, kapcsolata az elméleti és kísérleti fizikával. Numerikus analízis elemei. Statisztikus fizikai, szilárdtestfizikai és részecskefizikai alkalmazások. Véges méret effektusok, skálázás. Sejtautomata modellek. Alkalmazások: perkoláció, bolyongás, fraktálok, stb.

### 3. Évközi tanulmányi követelmények

Zárthelyi dolgozatok

### 4. A megszerzett ismeretek értékelése (félévközi jegy, vizsgajegy)

Gyakorlati jegy

### 5. Az értékelés módszere: A zárthelyi dolgozatok értékelése

### 6. Az ismeretek, készségek és kompetenciák elsajátításához rendelkezésre álló segédanyagok

### 7. Kötelező, ajánlott irodalom

Kötelező irodalom:

I. M. Szobol: A Monte Carlo módszerek alapjai (Műszaki K., 1981)

Kun Ferenc: Számítógépes fizika (oktatási segédlet, DE, kiadás alatt)

Ajánlott irodalom:

Press, Flannery, Teukolsky and Vetterling: Numerical Recipes in C (Cambridge, 1990)

Heermann: Computer Simulation Methods in Theoretical Physics (Springer, 1987)

A tematika heti lebontásában:

#### 1. A számítógépes szimulációk előfordulása, alkalmazási lehetőségei és szerepe

#### 2. A véletlenszám generátorok

A valódi és ál-véletlenszám sorozatok statisztikus tulajdonságai.

A sorozatok tesztelési módszerei.

Egyenletes eloszlású véletlenszám generálási algoritmusok.

Transzformálás, tetszőleges eloszlású, nem egyenletes eloszlású valószínűségű változó generálása.

Numerikus integrálás Monte Carlo módszerrel.

Egyszerű és gyorsított konvergenciájú módszerek.

#### 3. Fraktálok mindenütt

Determinisztikus és stochasztikus fraktál modellek.

Térbeli és dinamikai skálázás. A fraktáldimenzió mérése. Multifraktálok.

4. Egyszerű mintavételezésű Monte Carlo szimulációk

A véletlen bolyongás matematikai alapjai és numerikus megvalósítása.

Alkalmazások.

Polimermodellek, diffúzió limitált aggregáció, sejtkolóniák növekedése az Eden-modell segítségével.

5. Perkolációs jelenségek. Fázisátalakulások.

Fürtök azonosítása, a Hoshen-Kopelman algoritmus, fürtstatisztika, a fürtök skálatulajdonságai.

Véges méret problémák és kezelésük.

Véges méret skálázás szerepe a kritikus viselkedés leírásában.

A radioaktív bomlások szimulációja.

6. Egyensúlyi Monte Carlo szimulációk

A fontossági mintavétel.

7. Markov-folyamatok, ergodicitás, részletes egyensúly.

A Metropolis-algoritmus.

Az Ising-modell, Potts-modell.

8. Egyéb, hatékony algoritmusok

A Wolff-algoritmus.

A Swendsen-Wang algoritmus.

Hibabecslés, relaxációs idők, időskálák.

A Kawasaki-dinamika.

9. Folytonos változójú, un. „off-lattice” modellek

Folyadékok.

Polimerek.

10. Nem-egyensúlyi Monte Carlo szimulációk

Fázisszétválás az Ising modellben.

11. Doménnövekedés dinamikája.

Felületnövekedési modellek.

12. Molekuláris dinamika szimulációk

A molekuláris dinamikai szimulációk alapelve.

Különböző potenciálok.

Határfeltételek.

13. Numerikus algoritmusok, Euler-módszer, másod- és negyedrendű Runge-Kutta, prediktor-korrektor módszer.

Ab initio molekula dinamika

14. Sejtautomata modellek

Egy és kétdimenziós automaták, Wolfram-féle osztályzás, Conway életjáték modellje.

Alkalmazások.

15. Elmaradt anyagrészek pótlása