

PMB2512L (Számítógépes szimulációk)

Kurzusinformációk

2017 ősz

Előfeltétel: PMB1209L vagy MTB1000L

Félévi követelmény: gyakorlati jegy

Elérhetőség: szolnoki.attila@nyef.hu

Fogadóóra: Szerda 16:00

Tematika

1. A számítógépes szimulációk előfordulása, alkalmazási lehetőségei és szerepe, 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. Fraktálok mindenütt, Determinisztikus és stochasztikus fraktál modellek, Térbeli és dinamikai skálázás. A fraktáldimenzió mérése. Multifraktálok.

2. Egyszerű mintavételezésű Monte Carlo szimulációk, A véletlen bolyongás matematikai alapjai és numerikus megvalósítása, Alkalmazások, Polimermodellek, diffúzió limitált aggregáció, sejtkolonciák növekedése az Eden-modell segítségével. 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. Egyensúlyi Monte Carlo szimulációk, A fontossági mintavétel, Markov-folyamatok, ergodicitás, részletes egyensúly, A Metropolis-algoritmus. Az Ising-modell, Potts-modell.

3. Egyéb, hatékony algoritmusok, Wolff-algoritmus, A Swendsen-Wang algoritmus. Hibabecslés, relaxációs idők, időskálák, A Kawasaki-dinamika. Folytonos változójú, ún. „off-lattice” modellek, folyadékok, Polimerek. Nem-egyensúlyi Monte Carlo szimulációk, Fázisszétválás az Ising modellben. Doménnövekedés dinamikája, Felületnövekedési modellek. Molekuláris dinamika szimulációk, A molekuláris dinamikai szimulációk alapelve. Különböző potenciálok, Határfeltételek. Numerikus algoritmusok, Euler-módszer, másod- és negyedrendű Runge-Kutta, prediktor-korrektor módszer, Ab initio molekula dinamika Sejtautomata modellek, Egy és kétdimenziós automaták, Wolfram-féle osztályzás, Conway életjáték modellje, Alkalmazások.

A hallgatók a konzultációk során folyamatosan beszámolnak az egyénileg elkészített programjaikról. A programok elkészítéséhez külső dokumentált segítség használható, de az algoritmust ebben az esetben is ismerni kell. Egymás programjainak a másolása nem megengedett, az a kurzusból való kizárást vonja maga után. Szeretnék mindenkit figyelmeztetni arra, hogy ilyen esetekben nem fogom vizsgálni az információ „forrását” ezért a következmények az érintett felek mindegyikét sújtják.

Értékelés:

elégséges: annak a hallgatónak a teljesítménye, aki kisebb pontatlanságoktól eltekintve minden feladatát megcsinálja, de kreatív módon nem képes azokhoz viszonyulni

közepes: annak a hallgatónak a teljesítménye, aki minden feladatát jellemzően hiba nélkül megcsinálja, és irányítással további általánosításokra is képes

jó: annak a hallgatónak a teljesítménye, aki minden speciális feladatát kifogástalanul és bizonyos részeket általánosan is megoldja

jeles: annak a hallgatónak a teljesítménye, aki minden feladatát kifogástalanul és általánosságban is kreatív módon végzi el