

# Számítógépes fizika tételsor

1. Digitális számítógépek bels számábrázolása, kerekítési hibák. Numerikus deriválás véges differenciákkal. Numerikus integrálás klasszikus módszerei (trapéz, Simpson, Romberg, Gauss-kvadratúrák).
2. Nemlineáris egyenletek ill. egyenletrendszerek numerikus megoldása. Optimalizációs módszerek (Newton módszer, konjugált gradiens módszer, simulated annealing)
3. Fourier transzformáció: DFT, FFT; és egyszer alkalmazásai a fizikában (korreláció, konvolúció, szrés, stb.)
4. Közönséges differenciálegyenletrendszerek kezdetiérték problémáinak numerikus megoldási módszerei. (Runge-Kutta lépésközszabályozással, predictor-korrektor, backward differencing módszerek)
5. Közönséges differenciálegyenletek peremérték problémái. Egydimenziós időfüggetlen Schrödinger egyenlet megoldása Numerov módszerrel.
6. Molekuladinamikai szimulációk. (Molekulamechanikai értékek. A klasszikus molekuladinamika differenciálegyenleteinek integrálási eljárásai. Az NVT, NPT sokaságok modellezése.)
7. Monte Carlo módszerek alapjai, és legfontosabb alkalmazási elvei a (statisztikus) fizikában (mintavételezés, Markov láncok, ergodicitás)
8. Hullámterjedési problémák numerikus megoldása (tipikus kezdetiérték problémák és peremfeltételek; Lax módszer, Neumann-féle stabilitásvizsgálat; numerikus disszipáció és diszperzió; idben másodrend módszerek)
9. Diffúziós problémák numerikus megoldása (tipikus kezdetiérték problémák és peremfeltételek; Crank-Nicholson módszer; időfügg Schrödinger-egyenlet unitér diszkrétizálása; operátor bontás módszere).
10. Poisson egyenlet numerikus megoldása (tipikus peremfeltételek; véges differencia módszerek: direkt mátrix módszerek, Fourier módszer, relaxációs módszer, operátor bontása; multigríd módszerek alapjai; végelelemes módszerek alapjai)
11. Szimbolikus matematikai szoftverek (pl. Mathematica, Maple) legfontosabb képességei a fizikai alkalmazások szempontjából (deriválás, integrálás, optimalizáció, egyenletmegoldás, differenciálegyenletek, stb.).

## **Ajánlott irodalom:**

1. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery: Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 2nd edition, 1992.
2. I. N. Bronstein, K. A. Szemengyajev, G. Musiol, H. Mühling: Matematikai kézikönyv, Typotex Kiadó, Budapest, 2002.
3. Michael T. Heath: Scientific Computing: An Introductory Survey McGraw-Hill, New York, 2002.
4. Bogár - Ferency - Hoffmann - Körtvélyesi - Németh - Paragi - Rajkó: COMPUTATIONAL BIOCHEMISTRY, 2013. Chapters 2 and 6. ([http://eta.bibl.u-szeged.hu/1297/1/computational\\_biochemistry.pdf](http://eta.bibl.u-szeged.hu/1297/1/computational_biochemistry.pdf))