

# Számítógépes fizika

tételsor

(SZTE fizika doktori szigorlati melléktárgy)

1. Digitális számítógépek belső számábrázolása, kerekítési hibák. Numerikus deriválás véges differenciákkal. Numerikus integrálás klasszikus módszerei (trapéz, Simpson, Romberg, Gauss-kvadraturák).
2. Nemlineáris egyenletek ill. egyenletrendszerek numerikus megoldása. Optimalizációs módszerek (Newton módszer, konjugált gradiens módszer, simulated annealing)
3. Fourier transzformáció: DFT, FFT; és egyszerű alkalmazásai a fizikában (korreláció, konvolúció, szűrés, 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 erők. 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; időben másodrendű módszerek)
9. Diffúziós problémák numerikus megoldása (tipikus kezdetiérték problémák és peremfeltételek; Crank-Nicholson módszer; időfüggő Schrödinger-egyenlet unitér diszkretizálása; operátor bontás módszere).
10. Poisson egyenlet numerikus megoldása (tipikus peremfeltételek; véges differencia módszerek: direkt mátrix módszerek, Fourier módszer, relaxációs módszer, operátor bontása; multigrid módszerek alapjai; végesesemes módszerek alapjai)
11. Szimbolikus matematikai szoftverek (pl. Mathematica, Maple) legfontosabb képességei a fizikai alkalmazások szempontjából (deriválás, integrálás, optimalizáció, egyenletmegoldás, differenciálegyenletek, stb.).