

Számítógépes szimuláció a statisztikus fizikában / Computer simulation in statistical physics (2/0/0/v/3)

Tárgyfelelős / Responsible lecturer: Kertész János

A tantárgy a BSc-képzés során elsajátított statisztikus fizikai és programozási ismeretekre építve bemutatja a legalapvetőbb szimulációs technikákat és betekintést nyújt az újabb fejleményekbe. Kiemelt témakörök: Monte Carlo módszer (véletlen számok generálása, fontossági mintavétel, Metropolis algoritmus, határfeltételek, sokaságok, átlagok, karakterisztikus idők). Fázisátalakulások (véges méret skálázás, kritikus lelassulás, gyorsítási technikák). Diszkrét modellek algoritmikus vonatkozásai (perkoláció, mágneses modellek, rácsgázok, sejtautomaták, növekedési modellek). Sztochasztikus differenciálegyenletek (osztályozásuk, a zajok fajtái, módszerek, instabilitások). Molekuláris dinamika (kölcsonhatások, megoldási módszerek, sokaságok, eseményvezérelt MD, instabilitások).

This course builds on the knowledge acquired during the BSc studies in statistical physics and programming. It presents the basic simulation techniques and gives insight to the newer developments. Important topics are: Monte Carlo method (generation of random numbers, importance sampling, Metropolis algorithm, boundary conditions, ensembles, averages, characteristic times). Phase transitions (finite size scaling, critical slowing down, accelerating techniques). Algorithmic aspects of discrete models (percolation, magnetic models, lattice gases, cellular automata, growth models). Molecular dynamics (interactions, solvers, ensembles, event driven MD, instabilities).

Irodalom / Literature: órai jegyzetelés / lecture notes