

Matematikai kémia 2/0/2/v/5

Tárgyfelelős: Tóth János

Az alkalmazott matematikus néhány fontos eszköze

Speciális függvények, Laplace-transzformáció, kvalitatív vizsgálatok, nemlineáris rendszerek, túl az elemi statisztikán, matematikai programcsomagok. Optimumszámítási modellek, differenciálegyenletek paramétereinek becslése.

Modellekről: statikus és dinamikus, diszkrét és folytonos, sztochasztikus és determinisztikus, lineáris és nemlineáris modellek.

A fizikai kémia problémái. A homogén reakciókinetika modelljei és problémái. Sztöchiometria: lineáris algebrai és számelméleti módszerek. Tömeghatás típusú kinetika: gráfokon értelmezett differenciálegyenletek. Egyensúly, oszcilláció, káosz. Érzékenységvizsgálat. Modellredukció. Sztochasztikus reakciókinetika: ugró Markov-folyamatok. Biokémiai alkalmazások, enzimkinetika, farmakokinetika, gyógyszeradagolás, gyógyszertervezés. Kvantitatív összefüggések molekulák szerkezete és hatása között. Kvantumkémiai alkalmazásokról. Neurobiológia. Reakciódifúzió-modellek. Mintázatképződés kémiai, biológiai és közgazdasági modellekben.

Irodalom:

Bazsa Gy. (szerk.): *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, Egyetemi jegyzet (Kézirat), Debrecen, Budapest, Gödöllő, 1992

Érdi, P., Tóth, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Princeton University Press, Princeton, 1989

Feinberg, M.: *Lectures On Chemical Reaction Networks* (Lecture notes)

<http://www.che.eng.ohio-state.edu/~FEINBERG/LecturesOnReactionNetworks/>

Farkas Miklós: *Dynamical Models in Biology*, Academic Press, New York, 2001

Murray, J. D.: *Mathematical biology*, Springer, 2004

Mathematical chemistry 2/0/2/v/5

Responsible: Janos Tóth

A few tools of the applied mathematician

Special functions, Laplace transform, qualitative investigations, nonlinear systems, mathematical program packages, looking for the optimum, beyond elementary statistics, estimating the parameters of differential equations.

Model types: static and dynamic, discrete and continuous, stochastic and deterministic, linear and nonlinear models.

Problems of physical chemistry. Models and problems of homogeneous reaction kinetics. Stoichiometry: applied linear algebra and number theory. Mass action type kinetics: differential equations on graphs. Stationary points, oscillation, chaos. Sensitivity analysis. Reduction of models, lumping. Stochastic models of chemical reactions: Markovian pure jump processes. Applications in biochemistry, enzyme kinetics, pharmacokinetics, drug dosage and drug design. Quantitative structure activity relationships. Applying quantum chemistry. Neurobiological models. Reaction diffusion models. Pattern formation in chemical, biological and economic models.

References:

Érdi, P., Tóth, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Princeton University Press, Princeton, 1989

Feinberg, M.: *Lectures On Chemical Reaction Networks* (Lecture notes)

<http://www.che.eng.ohio-state.edu/~FEINBERG/LecturesOnReactionNetworks/>

Farkas Miklós: *Dynamical Models in Biology*, Academic Press, New York, 2001

Murray, J. D.: *Mathematical Biology*, Springer, 2004

Póta, Gy.: *Mathematical Problems for Chemistry Students*, Elsevier, 2006

Papers in the *Journal of Mathematical Chemistry*