

# **SZÁMÍTÓGÉPES MODELLEZŐ**

## **az elméleti fizika modelljein alapuló gyakorlat-orientált szakirányú továbbképzési szak**

Az elmúlt évtizedekben a számítógépek, a számítástechnika rohamos fejlődésével párhuzamosan kialakult a fizika egy új ága, a számítógépes fizika vagy másképpen a számítógépes szimuláció, ami elsősorban bonyolult modellek számítógépen történő közelítésmentes numerikus megoldását jelenti. A közelítésmentes megoldás miatt a számítógépes szimuláció valóság-közeli modellezést tesz lehetővé, ezért olyan esetekben, amikor valódi kísérletek kivitelezése az extrém körülmények miatt nehéz, vagy csak egyszerűen költséges, kiegészítheti, sőt bizonyos esetekben helyettesítheti a méréseket. Emiatt a számítógépes szimulációt gyakran nevezik számítógépes kísérletezésnek is. A fizika számos ágától kezdve az anyagtudományon át, a tudomány számos területe támaszkodik számítógépes szimulációra, s a realiztikus modellezés révén ma már elengedhetetlen eszköz az ipari kutatásban és fejlesztésben is. Természetesen a számítógépes szimuláció túlmutat a fizika keretein, más természettudományokban, mint például a kémiában, biológiában, orvostudományban, de még a közgazdaságtanban is széles körben kerül alkalmazásra.

A kelet-magyarországi régióban jelentős számban vannak olyan kis-, közép- és nagyvállalkozások, továbbá alkalmazott kutatást végző kutatóhelyek, amelyek részéről igény mutatkozik a számítógépes modellezésre és szimulációra. Ezek általában olyan termékfejlesztéssel, kutatás-fejlesztéssel foglalkozó vállalkozások, amelyek tevékenységi köre az anyagtudományokhoz, műszaki és orvostudományhoz kapcsolódik. Fejlesztőmunkájuk sokszor szorosan kötődik aktuális tudományos kérdésekhez, a tudományos kutatás homlokterében álló problémákhoz, amelyek megoldásában a számítógépes modellezés és szimuláció hatékony eszköznek bizonyult. Mivel a vállalkozásoknak sem a pénzügyi háttere, sem a szaktudása nem teszi lehetővé, hogy maguk alakítsák ki a számítógépes szimuláció végzéséhez szükséges tudásbázist és infrastruktúrát, nem tudnak élni a szimuláció nyújtotta lehetőségekkel. Ezzel szemben az Európai Közösségben már sok éves hagyományai vannak a számítógépes modellezés kutatás-fejlesztési problémák megoldására történő alkalmazásának, ami a magyar vállalkozások versenytársainak pozícióját erősíti.

A globalizálódó világban egyre nagyobb szükségünk van bonyolult rendszerek és problémák kezelésére képes hazai szakemberekre. Hallgatóink a képzés során olyan elméleti és gyakorlati tudásra tesznek szert, amely jól hasznosítható a műszaki és általában a gyakorlati élet valamennyi területén, valamint kutatói munkakörben dolgozó szakemberek számára. Egyre több munkáltató ismeri fel a számítógépes modellezés fontosságát, így joggal várják el a hagyományos szakmai körökben otthonosan mozgó munkatársaktól az ilyen irányú továbbképzést. A munkáltató szempontjából ugyancsak lényeges, hogy a képzés során a munkavállaló nem marad távol tartóan munkahelyétől, így a képzésben való részvétel nem ró jelentős terheket a munkahelyre.

**A munkaerő-piaci igény:** A korábbi években végzett hallgatóinktól érkező visszajelzésekből folyamatosan értesülünk arról, hogy a munkaadók egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek egy új munkatárs felvételekor az önálló problémamegoldási képességekre, az ezzel kapcsolatos ismeretek mélységére. Egyre több munkáltató ismeri fel az ilyen jellegű szaktudás fontosságát. A számítógépes modellezés és szimuláció ma már kiterjedten használt módszer az ipari tervezés, folyamatirányítás és kutatás területén. A gyakorlatorientált számítógépes modellezésben szerzett ismeretek olyan plussz kompetenciákkal ruházzák fel a hallgatókat, amely segíti számukra magasan kvalifikált munkakörök betöltését az iparban.

A képzésre azoknak a diplomával rendelkezőknek a jelentkezését várjuk, akik a hagyományos osztatlan képzésben legalább főiskolai szintű, vagy az új rendszerű képzésben legalább BSc oklevelet szereztek informatikus, matematikus, fizikus, vegyész, műszaki szakok valamelyikén. Követelmény egy programozási nyelv ismerete. Igény esetén lehetőség van olyan kurzus felvételére, mely segítséget nyújt a programozási ismeretek bővítésére.

## **KÉPZÉSI ÉS KIMENETI KÖVETELMÉNYEK**

- 1. A szakirányú továbbképzés megnevezése:** Számítógépes modellező szakirányú továbbképzés
- 2. A szakképzettség oklevélben szereplő megnevezése:** Számítógépes modellező
- 3. A szakirányú továbbképzés képzési területe:** természettudomány
- 4. A felvétel feltétele:** BSc, BA (ill. főiskolai) oklevél a természet-, és műszaki tudományok képzési területein.
- 5. A képzési idő:** 2 félév
- 6. A szakképzettség megszerzéséhez összegyűjtendő kreditek száma:** 60 kredit.
- 7. A képzés során elsajátítandó kompetenciák, tudáselemek, megszerzhető ismeretek, személyes adottságok, készségek, a szakképzettség alkalmazása konkrét környezetben, tevékenységrendszerben.**

### **7.1. Elsajátítandó kompetenciák**

- A végzettek képesek lesznek komplex rendszerek viselkedésének modellezésére: a modellek alkotására, a szükséges számítógépes programok elkészítésére, a számítások elvégzésére és az eredmények értékelésére.
- Képesek lesznek az alapvégzettségük szerinti tudásukat a számítógépes modellezés és szimuláció módszereivel kiegészítve munkájukat magasabb szinten elvégezni.
- Képesek lesznek komplex rendszerekkel kapcsolatos problémákat felismerni és megoldási javaslatokat tenni olyan esetekben is, amikor mérések, mintavételek, stb. elvégzése nehézségekbe ütközik.
- Jártasságot szereznek a gyakorlati előforduló műszaki, anyagtudományi problémák számítógépes, numerikus vizsgálatában.

### **7.2. Tudáselemek, megszerzhető ismeretek**

- A számítógépes szimuláció módszerei,
- Térbeli es időbeli struktúrák nemegyensúlyi rendszerekben,
- Dinamikai instabilitás,
- Katasztrófa jelenségek,
- Számítógépes anyagtudomány elemei,
- Ipari gyártási folyamatok számítógépes optimalizálása,
- Méréssel, illetve szimulációval nyert nagymennyiségű adat hatékony numerikus feldolgozása,
- Biológiai komplexitás számítógépes modellezése,
- Hálózatok számítógépes szimulációja,
- Kvantuminformatika.

### 7.3. Személyes adottságok

- Probléma- és gyakorlatorientált látásmód a szakmai problémák megoldása terén;
- Számítógépes szimuláció és numerikus számolások iránti fogékonyság

### 7.4. A szakképzettség alkalmazása konkrét környezetben, tevékenységrendszerben

A szakképzettség birtokában a számítógépes modellező képes

- komplex rendszerek vizsgálatára, problémák megértésére, modellezésére, a számítógépes szimuláció megvalósítására, a modellekhez számítógépes programok írására,
- új numerikus módszereket, eljárásokat kidolgozni, ismert módszereket adaptálni,
- ipari gyártási folyamatok számítógépes optimalizálására,
- magas szintű szakértői feladatokat ellátni a számítógépes modellezés területén.

### 8. A szakképzettség szempontjából meghatározó ismeretkörök és azok kreditértékei

*Alapozó ismeretek:* **12 kredit** (a számítógépes szimuláció valamint a komplex rendszerek vizsgálatának módszerei)

*Szakmai törzsanyag:* **38 kredit** (a nemlineáris folyamatok elmélete, az elméleti fizika (pl. nemegyensúlyi statisztikus fizika, fázisátalakulások) speciális modelljei, modellezés az anyagtudományban)

### 9. A szakdolgozat kreditértéke: 10

## KÉPZÉSI PROGRAM

**A képzéséért felelős kar megnevezése:** Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

**A szakért felelős oktató:** Dr. Nagy Ágnes egyetemi tanár, tanszékvezető

**Képzési cél:** A résztvevők megismerik a számítógépes modellezés és szimuláció módszereit. Elsajátítják azt a szemléletmódot, mellyel a komplex rendszerek műszaki és anyagtudományi problémák, ipari folyamatok vizsgálhatók. Készség szinten elsajátítják a műszaki életben leggyakrabban használt szoftverek (matlab, octave, mathematica, ...) kezelését, továbbá hatékony szimulációs programok írását C és C++ nyelven. Megismerkednek a természet- és műszaki tudományok alapvető számítógépes modelljeivel, hatékony numerikus kezelésükkel és gyakorlati alkalmazásaikkal. Kezdetől fogva nagy hangsúlyt kap az önálló munka.

**A képzés formája:** nappali képzés

**A képzés szerkezete:** A képzés 9 tantárgyat tartalmaz, 5 illetve 4 az első illetve a második szemeszterben, amelyek kreditértéke 3 és 9 között van,. A tárgyak kötelező jellegűek. Teljesítésük gyakorlati jeggyel és/vagy kollokviummal zárul.

Az első szemeszterben a Számítógépes műhely tárgy keretében már komoly önálló feladatot kell végrehajtani egy projekt munka formájában.

A második szemeszterben a képzésben résztvevők egy 10 kreditértékű szakdolgozatot készítenek. Így összességében 60 kredittel teljesíthetik az oklevél megszerzéséhez szükséges követelményeket.

**A képzés módszerei:** A képzés nappali, a hallgatók kontakt órákon sajátítják el a tematikában foglalt témaköröket. Az előadások a Fizikai Intézet termeiben hangzanak el, a gyakorlatokra az Elméleti Fizikai Tanszék Számítógépes laboratóriumaiban kerül sor. A Számítógépes műhely tárgy keretében a hallgató otthon elkészítendő feladatot kap, mely kidolgozásánál felmerülő problémákhoz segítséget kap a hallgatóval külön foglalkozó oktatótól.

## TANTERV

<b>I. szemeszter</b>				
Tantárgy	Óraszám		Számonkérés	Kredit
	elmélet	gyakorlat		
A számítógépes szimuláció módszerei	2	4	Kollokvium, Gyakorlati jegy	9
Komplex rendszerek	2	0	Kollokvium	3
Nemlineáris jelenségek, káosz	2	2	Kollokvium, Gyakorlati jegy	5
Modellek a fázisátalakulásban	2	3	Kollokvium, Gyakorlati jegy	6
Számítógépes műhely	0	9	Gyakorlati jegy	9
<b>ÖSSZESEN</b>	8	18		32
<b>II. szemeszter</b>				
Tantárgy	Óraszám		Számonkérés	Kredit
	elmélet	gyakorlat		
Számítógépes anyagtudomány	2	3	Kollokvium, Gyakorlati jegy	7
A nemegyensúlyi statisztikus fizika modelljei	2	2	Kollokvium, Gyakorlati jegy	5
Biológiai komplexitás számítógépes modellezése	2	0	Kollokvium	3
Kvantuminformatika	2	1	Kollokvium	3
Szakdolgozat		10	Aláírás	10
<b>ÖSSZESEN</b>	8	16		28
<b>MINDÖSSZESEN</b>	16	34		60

## A RÉSZTVEVŐK TELJESÍTMÉNYÉT ÉRTÉKELŐ RENDSZER

Az ismeretek ellenőrzési rendszere a tantervben előírt tantárgyak kollokviumi jegyeinek a megszerzéséből, a gyakorlatok követelményeinek teljesítéséből, a választott szakdolgozat elkészítéséből és annak záróvizsgán történő megvédéséből tevődik össze. Ezek mellett jelentős szerepet kapnak az önállóan elvégzendő feladatok, melyek a gyakorlati jegybe számítanak bele.

### A szakdolgozat:

A szakdolgozati témák széles spektrumából választhatnak a hallgatók. Emellett lehetőséget biztosítunk arra, hogy a hallgatók a munkájukhoz kapcsolódó probléma megoldásának kidolgozását választhassák témaként. A hallgatók téma- és témavezető

választását, valamint a bírálókat a szakért felelős oktató hagyja jóvá, ill. jelöli ki. Amennyiben a bíráló megítélése szerint a szakdolgozat valóban igazolja azt, hogy elkészítője képes az elsajátított ismeretanyag önálló, gyakorlati alkalmazására, a dolgozatot elfogadhatónak minősíti, ellenkező esetben átdolgozásra javasolja. A hallgatók a záróvizsgán bizottság előtt védik meg szakdolgozatukat.

### **A záróvizsga:**

*A záróvizsgára bocsátás feltétele:*

60 kredit megszerzése a tantervben előírt módon a bíráló által elfogadott szakdolgozat.

*A záróvizsga részei:*

- A szakdolgozat tartalmának szóbeli bemutatása 10 perces előadás keretében a Záróvizsga Bizottság előtt
- A szakdolgozat szóbeli megvédése a Záróvizsga Bizottság előtt a bíráló által feltett - a dolgozat témájához kapcsolódó - kérdés megválaszolásával.

*A záróvizsga eredménye (oklevél minősítése):*

A Záróvizsga Bizottság által a szakdolgozatra - annak megvédése eredményeként - adott érdemjegy, valamint a megszerzett kollokviumi érdemjegyek számtani középértékének átlaga.

## **A KORÁBBAN SZERZETT ISMERETEK BESZÁMÍTÁSA**

A korábbi felsőoktatási képzés során legalább 80%-ban azonos tematikájú tantárgyból szerzett, közepesnél jobb – leckekönyvvel igazolt – érdemjegyet a továbbképzésben teljes értékkel elfogadjuk, mentesítve a hallgatót a vizsgakötelezettség alól.

## **TANTÁRGYI PROGRAMOK**

### **1.**

A tárgy neve: **A számítógépes szimuláció módszerei**

*Tantárgy felelős:* Dr. Kun Ferenc egyetemi docens

*Tantárgy oktatója:* Dr. Kun Ferenc egyetemi docens

*Típus:* Előadás+gyakorlat

*Óraszám/hét:* 2+4

*Periódus:* 1. szemeszter

*Kredit:* 3+6

*Számonkérési módja:* Kollokvium+Gyakorlati jegy

*A tárgy célja:*

Megismertetni a hallgatókat a számítógépes modellezés és szimuláció modern módszereivel, a legfontosabb modellek algoritmusaiival és hatékony numerikus eljárásaikkal. A hallgatók elsajátítják az optimalizált szimulációs programok tervezését és implementációját is.

*A tárgy tematikája:*

Kísérlet-elmélet-szimuláció viszonya, az egzakt numerikus megoldás fogalma, szimulációs módszerek osztályozása.

Monte Carlo szimuláció, véletlenszámok előállítása, véletlenszám generátorok. Tetszőleges eloszlású véletlenszámok előállítása. Bolyongás és növekedési folyamatok számítógépes szimulációja, diffúzió limitált aggregáció, Eden modell, járványterjedés. Szivárgási jelenségek, perkoláció. Integrálok kiszámítása Monte Carlo módszerrel.

Alkalmazás: kompozitok törésének vizsgálata Monte Carlo szimulációval.

A molekuláris dinamikai szimuláció alapjai. Közönséges differenciálegyenletek és egyenlet rendszerek numerikus megoldása. Mozgásegyenletek, kezdőfeltételek és határfeltételek. A szimulációs program optimalizálása, Verlet-táblázat, csatolt cellás algoritmusok.

Alkalmazások: beton öszenyomás és nyújtás alatti törésének szimulációja, a szálakkal történő megerősítés (vasbeton) szerepe.

Sejtautomata modellezés alapjai, diszkrét dinamikai rendszerek. Egydimenziós automaták osztályozása, a dinamika kódolása. Kétdimenziós automaták osztályozása. Életjáték. Rácsgáz modellek.

Alkalmazás: két komponens keveredése folyadékban, folyadékok áramlásának vizsgálata.

#### *Ajánlott irodalom*

- V. Gould and J. Tobochnik, *An introduction to Computer Simulation Methods* (Addison-Wesley, 1999).
- M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, 1996).
- D. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, (Cambridge University Press, 2001).
- K. Ohno, K. Esfarjani, and Z. Kawazoe, *Computational Materials Science*, (Springer, 1999).

## **2.**

A tárgy neve: **Komplex rendszerek**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Kun Ferenc egyetemi docens

*Tantárgy oktatója:* Dr. Kun Ferenc egyetemi docens

*Típus:* Előadás

*Óraszám/hét:* 2+0

*Periódus:* 1. szemeszter

*Kredit:* 3

*Számonkérési módja:* Kollokvium

*A tárgy célja:*

A hallgatók megismerik a komplexitás fogalmát, elsajátítják a térbeli és időbeli komplexitás vizsgálatának analitikus matematikai és numerikus eszközeit, majd a gyakorlatból vett példákön megismerkednek a legfontosabb komplexitást mutató rendszerekkel.

*A tárgy tematikája:*

Térbeli és időbeli struktúrák kialakulása nemegyensúlyi rendszerekben. Fraktálok: fraktáldimenzió, fraktáldimenzió meghatározásának kísérleti és numerikus módszerei. Determinisztikus és sztochasztikus fraktálok. Multiskálás- és multifraktálok, multifraktálok dimenzió spektruma.

Alkalmazások: fraktáldimenzió és multifraktál dimenzió spektrum meghatározása digitális képfeldolgozás segítségével.

Struktúrált határfelületek, önaffin és fraktál felületek. Felületi struktúrák kísérleti és elméleti vizsgálata. Időbeli struktúrák kialakulása, jellemzésük kísérleti és elméleti eszközökkel. Az átlagos fluktuációs függvény, zajcsomag analízis.

Alkalmazások: szilárdtestek törését kísérő mért repedési zaj számítógépes feldolgozása, emberi szív EKG spektrumának kiértékelése.

Dinamikai instabilitás hajtott rendszerekben. Önszervezés. Az önszervezett kritikus állapot kialakulásának szükséges feltételei. Hajtás-disszipáció-relaxáció, lavina effektus, időskálák szétválása.

Alkalmazások: Katasztrófa jelenségek, földrengések dinamikai jellemzése mért adatok feldolgozásával.

*Ajánlott irodalom:*

- D. L. Turcotte, *Fractals and Chaos in Geology and Geophysics* (Cambridge University Press, 1996).
- H. Jensen, *Self-Organized Criticality* (Oxford University Press, 1997).
- A.-L. Barabasi and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, 1998).
- K. Christensen and N. R. Moloney, *Complexity And Criticality* (Imperial College Press Advanced Physics Texts, 2005).
- H. Takayasu, *Fractals in the Physical Sciences* (Manchester University Press, 1990).

### 3.

A tárgy neve: **Számítógépes anyagtudomány**

*Tantárgyfelelős:* Dr Kun Ferenc egyetemi docens

*Tantárgy oktatója:* Dr. Kun Ferenc egyetemi docens

*Típus:* Előadás+gyakorlat

*Óraszám/hét:* 2+3

*Periódus:* 2. szemeszter

*Kredit:* 3+4

*Számonkérési módja:* Kollokvium+Gyakorlati jegy

*A tárgy célja:*

Az alkalmazott anyagtudomány számítógépes modelljeinek és hatékony numerikus implementációjuknak megismerése. Gyakorlati példákon keresztül a hallgatók elsajátítják a legfontosabb anyagtudományi modellek számítógépes programozását is.

*A tárgy tematikája:*

Szilárdtestek mechanikai válaszána fenomenológiai leírása, Hook törvény, keményedés, lágyulás, tökéletesen képlékeny anyag. A kontínuumok mechanikája. A kontínuumok mechanikájának diszkrét megfogalmazása, formális és fizikai diszkrétizáció, rács modellek két- és háromdimenzióban. A rácsmodellek numerikus megoldása számítógépen, mechanikai válasz számítógépes leírása diszkrét elem és a véges elem módszerekkel. Diszkrét elem modellek molekuláris dinamikai szimulációja.

Alkalmazások: Közel homogén szilárdtest viselkedésének számítógépes szimulációja nyomás és nyújtás alatt.

Szilárdtestek törésének legfontosabb jellemzői, rideg és szívós törés. Repedések keletkezésének és terjedésének dinamikája, a Griffith kritérium. Kvázisztatikus és szubkritikus törés. A rendezetlen mikroszkopikus struktúra hatása a repedések keletkezésére. Erősen heterogén anyagok törésének számítógépes modelljei, szálköteg és diszkrét elem modellek. Törés vizsgálatának hatékony numerikus módszerei.

Alkalmazások: szákkal megerősített kompozit anyagok, például kevlár, törésének számítógépes analízise.

Szemcsés szerkezetű anyagok ipari alkalmazásai. Nano- és mikro porok mechanikája. Szemcsék kölcsönhatásának legfontosabb jellemzői különböző méretskálákon. Szemcsés anyagok statikájának és dinamikájának számítógépes modelljei, reológiai egyenletek diszkretizációja és számítógépes megoldása. Porok szinterelése az iparban, a szinterelési folyamat számítógépes modellezése.

Alkalmazások: Gyógyszeripari gyártásfolyamatban porok csőrendszerben történő áramoltatásának számítógépes modellezése.

#### *Ajánlott irodalom*

- K. Ohno, K. Esfarjani, and Z. Kawazoe, *Computational Materials Science*, (Springer, 1999).
- T. Poschel and T. Schwager, *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms*, (Springer, 2004).
- J. Duran, Sands, *Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials* (Springer, 2001).
- B. K. Chakrabarti and L. G. Benguigui, *Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems*, (Oxford Science Publications, 1997).

#### **4.**

A tárgy neve: **Biológiai komplexitás számítógépes modellezése**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Varga Imre főiskolai adjunktus

*Tantárgy oktatója:* Dr. Varga Imre főiskolai adjunktus

*Típus:* Előadás

*Óraszám/hét:* 2+0

*Periódus:* 2. szemeszter

*Kredit:* 3

*Számonkérés módja:* Kollokvium

*A tárgy célja:*

A komplex biológiai rendszerek vizsgálatára használt legfontosabb számítógépes modellek és szimulációs technikák megismerése.

*A tárgy tematikája:*

Betegségek terjedése kiterjedt populációkban, a terjedés dinamikájának matematikai leírása. A betegségterjedés számítógépes vizsgálatának szimulációs módszerei, Monte Carlo és sejtautomata módszerek. Járvány létrejöttének kritériumai. Kapcsolat klaszternövekedési jelenségekkel, Eden modell és perkolációs modellek.

Alkalmazások: Betegségterjedésre vonatkozó mért adathalmaz számítógépes feldolgozása. Az Eden modell számítógépes szimulációja.

Az egyedek szociális hálózatának szerepe betegségek terjedésében. A szociális hálózat topológiájának matematikai jellemzése, a klaszterezettségi együttható, az átlagos átmérő és a fokszám eloszlás. Szociális hálózat előállítása számítógépen. Betegségterjedés számítógépes szimulációja szociális hálózaton.

Alkalmazások: Szociális hálózat előállítása és kimerítő elemzése számítógépen.

A biomechanika legfontosabb alapfogalmai. Szövetek mechanikai viselkedésének jellemzése. Óriásmolekulák mechanikája, legfontosabb mérési eredmények. Molekulák biomechanikájának legfontosabb modelljei és alkalmazásuk a DNS molekula terhelés alatti viselkedésének megértésére. Szövetek mechanikai viselkedésének legfontosabb modelljei.

Alkalmazások: DNS molekulára vonatkozó mérési eredmények feldolgozása és elméleti vizsgálata számítógépes szimulációval.

*Ajánlott irodalom*

- R. Cotterill, *Biophysics: An Introduction*, (Wiley & Vichy, 2003).
- P. Nelson, *Biological Physics* (Oxford University Press, 2003).
- S.Sitharama Iyengar, *Computer Modeling and Simulations of Complex Biological Systems* (Wiley & Vichy, 1998).
- R. A. L. Jones, *Soft condensed matter* (Oxford University Press, 2002).

## 5.

A tárgy neve: **Nemlineáris jelenségek, káosz**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Nagy Ágnes egyetemi tanár

*Tantárgy oktatója:* Dr. Nagy Ágnes egyetemi tanár

*Típus:* Előadás+gyakorlat

*Óraszám/hét:* 2+2

*Periódus:* 1. szemeszter

*Kredit:* 3+2

*Számonkérés módja:* Kollokvium+Gyakorlati jegy

*A tárgy célja:*

Új természetszemlélet kialakítása, annak megmutatása, hogy determinisztikus rendszerek véletlenszerű viselkedést mutatnak.

*A tárgy tematikája:*

Stabilitás-analízis. Poincaré-leképezés. Bifurkációk. Fraktálok. Káosz konzervatív és disszipatív rendszerekben. Kaotikus attraktor. Topológikus entrópia. Előrejelezhetetlenség, Ljapunov-exponens. Lorenz-modell.

*Ajánlott irodalom:*

- Tél Tamás – Gruiz Márton: Kaotikus dinamika (Nemzeti Tankönyvkiadó Bp. 2002)
- Thompson J.M.T – Stewart, H. B. Nonlinear Dynamics and Chaos (John Wiley, New York, 1986)

## 6.

A tárgy neve: **A nemegyensúlyi statisztikus fizika modelljei**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Nagy Ágnes egyetemi tanár

*Tantárgy oktatója:* Dr. Nagy Ágnes egyetemi tanár

*Típus:* Előadás

*Óraszám/hét:* 2+0

*Periódus:* 2. szemeszter

*Kredit:* 3

*Számonkérés módja:* Kollokvium

*A tárgy célja:*

A statisztikus fizikai szemlélet, valamint fontosabb modellek és alkalmazásaik megismerése.

*A tárgy tematikája:*

Fluktuációk, Brown-mozgás, Langevin-egyenlet, Fokker-Planck-egyenlet, master-egyenlet, Markov-operátorok. Fluktuáció-disszipáció tétel. Onsager-egyenletek, Boltzmann-egyenlet.

*Ajánlott irodalom:*

- P.K. Pathria, Statistical Mechanics (Pergamon Press, Oxford, 1972)
- R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics (Wiley, New York, 1975).
- Sailer K.: Statisztikus fizika II., elektronikus egyetemi jegyzet
- Sailer K.: Nemegyensúlyi statisztikus fizika, elektronikus egyetemi jegyzet

**7.**

A tárgy neve: **Modellek a fázisátalakulásban**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Gulácsi Zsolt egyetemi docens

*Tantárgy oktatója:* Dr. Gulácsi Zsolt egyetemi docens

*Típus:* Előadás + gyakorlat

*Óraszám/hét:* 2+3

*Periódus:* 1. szemeszter

*Kredit:* 3 + 3

*Számonkérés módja:* Kollokvium

*A tárgy célja:*

A fázisátalakulások jellegzetes tulajdonságainak, valamint legfontosabb modelljeinek és alkalmazásaiknak megismerése.

*A tárgy tematikája:*

Fázis fogalma, átalakulás rendje, folytonos fázisátalakulás fogalma, első és végtelen rendű fázisátalakulások, Gibbs-féle fázisszabály, dimenzió hatása, fluktuációk szerepe, korrelációk hatása, hosszútávú térbeli rendezettség, kritikus tartomány fogalma, rendparaméter, Ginzburg-Landau termodinamikai potenciál, Kadanoff-féle blokk konstrukció, kritikus exponensek, skálátörvények, Orstein-Zernike viselkedés, Landau elmélet, molekuláris-tér elmélet kritikus exponensei, univerzalitási osztály fogalma, renormálási csoport transzformáció, kritikus felület, fixpontelmélet alapfogalmai, fázisátalakulások kimutatása renormálási csoport módszerrel, Wilson-képlet, kritikus exponensek levezetése renormálási csoport módszerrel,  $\sigma^2$ ,  $\sigma^4$  modell.

*Ajánlott irodalom:*

Gulácsi Zs.: A fázisátalakulások elmélete I., Kossuth Egyetemi Kiadó Debrecen, 1998 (elektronikus jegyzetben is megtalálható).

**8.**

A tárgy neve: **Kvantuminformatika**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Gulácsi Zsolt egyetemi docens

*Tantárgy oktatója:* Dr. Gulácsi Zsolt egyetemi docens

*Típus:* Előadás + gyakorlat

*Óraszám/hét:* 2+1

*Periódus:* 1. szemeszter

*Kredit:* 3

*Számonkérés módja:* Kollokvium

*A tárgy célja:*

A kvantumszámítógépek működése elvi alapjainak megismerése.

*A tárgy tematikája:*

Kvantummechanikai alapok, mérés és dinamika, információelmélet és termodinamika, reverzibilis logika. A kvantum bit – kubit - fogalma és megvalósítási lehetőségei, kubit regiszterek, kvantum logikai körök. Kvantum algoritmusok, Schor, Grover. Kvantum kriptográfiai és hibajavító kódolás. Kvantuminformáció elmélet. Összefonódás és dekoherencia, a kvantum-hardware. Az előadásokhoz kapcsolódó gyakorlatokon a tárgy elsajátítását segítő feladatok megoldása szerepel.

*Ajánlott irodalom:*

- Ekert, et al. "Basic Concepts in quantum computation" (pdf)
- E. Knill, et al. "Introduction to Quantum Information Processing" (pdf)
- E. Knill, et al., "Introduction to Quantum Error Correction" (pdf)

**9.**

A tárgy neve: **Számítógépes műhely**

*Tantárgyfelelős:* Dr. Nagy Sándor egyetemi tanársegéd

*Tantárgy oktatója:* Dr. Nagy Sándor egyetemi tanársegéd

*Típus:* Gyakorlat

*Óraszám/hét:* 0+9

*Periódus:* 4. szemeszter

*Kredit:* 9

*Számonkérés módja:* Gyakorlati jegy

*A tárgy célja:*

Olyan készségek kialakítása, melyekkel a hallgató képes önálló modellalkotásra, számítógépes programok elkészítésére, az eredmények értelmezésére.

*A tárgy tematikája:*

A félév elején meghirdetett témák közül kell választania a hallgatónak. A feladatot önállóan kell megoldania. Ehhez a konzulens oktatótól kaphat rendszeresen segítséget. A félév végére a munka összefoglalásaként dolgozatot kell benyújtania, melyet rövid szóbeli előadásban kell ismertetnie az oktatók és a többi hallgató előtt. A hallgató a munkára gyakorlati jegyet kap.

**A képzési program végrehajtásához szükséges tárgyi és személyi feltételek, ezek biztosításának módja**

**A számítógépes modellező szakirányú továbbképzésben résztvevő oktatók:**

név	beosztás	tudományos fokozat
Dr. Nagy Ágnes	egyetemi tanár	MTA doktora
Dr. Kun Ferenc	egyetemi docens	PhD, kandidatus
Dr. Gulácsi Zsolt	egyetemi docens	PhD ,kandidatus
Dr. Nagy Sándor	egyetemi tanársegéd	PhD
Dr. Varga Imre	főiskolai adjunktus	PhD

**A szak indításának tervezett időpontja:** 2009. szeptember

**A képzés költsége (várható térítési díj):** 110.000.-Ft/félév