



Tantárgy kód

BMETE15MF36

Tantárgy azonosító adatok

1.	A tárgy címe	Számítógépes szimulációk laboratórium									
2.	A tárgy angol címe	Computer Simulations Laboratory									
3.	A tárgy rövid címe		Követelmény	0	+	0	+	2	f	Kredit	2
4.	Ajánlott/kötelező el tanulmányi rend										
	vagy	Tantárgy kód 1	Rövid cím 1	Tantárgy kód 2	Rövid cím 2	Tantárgy kód 3	Rövid cím 3				
4.1											
4.2											
4.3											
5.	Kizáró tantárgyak										
6.	A tantárgy felelős tanszéke	Elméleti Fizika Tanszék									
7.	A tantárgy felelős oktatója	Dr. Udvardi László			beosztása	tudományos f munkatárs					

Akkreditációs adatok

8.	Akkreditációra benyújtás időpontja	2012.06.11.	Akkreditációs bizottsági döntés időpontja	2012.09.19.
----	------------------------------------	--------------------	---	--------------------

Megjegyzések

Csak az űrlap fehéren hagyott mezőbe írjunk és a mezők között a **tabulátor** billentyűvel haladjunk! Ha egy kitöltött mezőből tabulátor billentyűvel lépünk ki, több más mező értéke automatikusan megváltozhat. Egy adott mezőre lépve, az állapotsorban megjelenő rövid, ill. az F1 gomb megnyomásakor kapható hosszabb leírás ad segítséget a kitöltéshez. A *tantárgy kódot* és a *tárgy rövid címét* a dékáni hivatal adja.

1-2. sorok: A *tárgy címének* (max. 85 karakter) célszerű legalább egy karakterben különböznie minden más, Neptunban regisztrált tárgy címétől.

3. sor: A *követelmény* eladás+gyakorlat+labor formátumú, az *utolsó mező* a félév végi számonkérés típusa (v,f,a vagy s, részletes információ F1). A *kredit* megadásánál ügyelni kell arra, hogy az alább részletezett, a *tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka* mennyiségével összhangban legyen (összes óraszám = kredit*30 óra).

4. sor: Legfeljebb 3, már korábban hallgatott tárgy adható meg a 4.1 sorban. A 4.2 és 4.3 sorok *vagylagos* lehetőségek megadására szolgálnak, például abban az esetben, ha az egyik tárgynak korábban oktatott változatai is megfelelnek. **5. sor:** A *kizáró tantárgyaknál* azokat a tárgyakat kell felsorolni, amelyek tematikái a most akkreditálandó tárggyal 75% vagy annál nagyobb átfedést mutatnak.

6-7. sorok: A felelős tanszék és oktató hatáskörét, ill. kijelölésének feltételeit a *Képzési Kódex 2010* c. dokumentum 4.§-a tartalmazza.

Tematika			
9.	A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít		
	C-programozás, elméleti fizikai alapok		
10.	A tantárgy szerepe a képzés céljának megvalósításában (szak, kötelező, kötelezően választható, szabadon választható)		
	TTK Fizikus MSc szak szakirányainak kötelezően választható tárgya		
11.	A tantárgy részletes tematikája		
	<p>1. Bevezetés: Ismerkedés a fordítóval és a fejlesztői környezettel: Eclipse. Fordítás, error, warning, futásidej hibák. C-ismétlés: függvények, dinamikus memóriakezelés, hibakezelés.</p> <p>2. C-ismétlés: Makrók, paraméteres makrók. Több forrásfájlból álló program. Parancssori paraméterek.</p> <p>3. Véletlen számok: GSL véletlenszám-generátora, inicializálás. Adott eloszlás szerinti véletlen számok generálása. Empirikus eloszlásfüggvény.</p> <p>4-5. Ising-modell I.: 2D Ising-modell Metropolis algoritmussal: mágnesezettség és szuszceptibilitás a hőmérséklet függvényében. Glauber dinamika. II.: Kawasaki dinamika, rendezett és rendezetlen fázisok rögzített összmágnesezettség esetén. Fajh a hőmérséklet függvényében.</p> <p>6-7. Rugós kristálymodell I.: 2D rugós kristálymodell molekuladinamikai szimulációja leap frog algoritmussal. Egy kiszemelt rácspont pályája a fázistérben. II.: Verlet algoritmus. Fonondiszperzió meghatározása FFT segítségével. Kétatomos elemi cella. Véletlen ötvözet. A rács vizualizációja Paraview szoftverrel.</p> <p>8. Hasznos adatfájl-formátumok: VTK, XML, XDMF. 9. Szoros kötés közelítés: Példa: grafén és szén nanocs .</p> <p>10. Bevezetés a felületi Green-függvények módszerébe: A szórásprobléma Green-függvénye. Felületi Green-függvények. Példák: potenciállépcs , Breit-Wigner-rezonancia.</p> <p>11-12. Hálózatok I: Hálózat reprezentációi. Barabási-Albert hálózat. Fokszámeloszlás. II: Módosított Barabási-Albert hálózat. Bevezetés az STL tárolók használatába. (C++)</p> <p>13. Eredmények grafikus megjelenítése, Gnuplot lehetőségei. Példa: Mollweide-vetítés. Hálózat elemzése és vizualizációja Cytoscape szoftverrel.</p> <p>14. Ünnepnapi miatt elmarad / Hallgatókkal egyeztetett téma</p>		
12.	Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja		
	szorgalmi idő szakban	Házi feladatok kidolgozása	vizsgaidő szakban
13.	Pótlási lehetőségek		
	TVSZ szerint		
14.	Konzultációs lehetőségek		
	Az oktatókkal egyeztetett időpontban.		
15.	Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom		
	M.E.J. Newman, G.T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Oxford Univ. Press, New York, 1999)		
	A tárgy weblapjára feltöltött példaprogramok		
	Az tárgyhoz kapcsolódó előadás jegyzet (http://www.phy.bme.hu/~kerteszt/teach2.html)		

16.	A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva)		
	16.1	Kontakt óra	28
	16.2	Félévközi felkészülés órákra	0
	16.3	Felkészülés zárthelyire	0
	16.4	Zárthelyik megírása	0
	16.5	Házi feladat elkészítése	32
	16.6	Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló)	0
	16.7	Egyéb elfoglaltság	0
	16.8	Vizsgafelkészülés	0
	16.9	Összesen	60
17.	Ellenrz adat	Kredit * 30	60

A tantárgy tematikáját kidolgozta			
18.	Név	beosztás	Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.)
	Dr. Udvardi László	tudományos f munkatárs	Elméleti Fizika Tanszék
	Balogh László	tudományos segédmunkatárs	Elméleti Fizika Tanszék

A tanszékvezet		
19.	Neve	aláírása
	Dr. Szunyogh László	

Megjegyzések

16.1 sor: Értéke automatikusan kitölt dik az rlap elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az (el adás+gyakorlat+labor) * (14 oktatási hét) formula szerint. **16.4 sor:** Értéke 0, ha a zárthelyik íratása kontakt órákon történik, egyébként pedig a minimálisan szükséges számú zárthelyi megírásához felhasználandó id (a pót zárthelyik nélkül). **16.7 sor:** Az „Egyéb elfoglaltság” szöveg helyére a tevékenység konkrét megnevezését kell írni.

17. sor: Az itt szerepl értéknek és a **16.9 sorban** automatikusan megjelen tanulmányi óraszám összegnek hozzávet legesen meg kell egyeznie! Tájékoztatásul azt vegyük figyelembe, hogy a hallgatók által egy szemeszterben átlagosan 30 kreditnyi munkamennyiséget kell teljesíteni, azaz a szorgalmi és vizsgaid szak során elvárt terhelés összesen kb. 900 munkaóra.