

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Centras	Skyrius
<b>Specialieji matematiniai metodai ir skaitinis modeliavimas</b> (8 ECTS kreditai)	Fizika N 002	Fizinių ir technologinių mokslų centras	Molekulinių darinių fizikos skyrius
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	30
Individualus	170	Seminarai	

Dalyko anotacija			
<p><i>Ižanga.</i> Teorijos ir eksperimento sąsaja. Fizikiniai modeliai ir skaitinis eksperimentas. Modeliavimo struktūra. Modelių įvairovė.</p> <p><i>Determinuotoji ir stochastinė dinamika.</i> Šuoliniai, difuziniai ir determinuoti vyksmai. Molekulinė dinamika. Verlet algoritmas. Kanoninio ir mikrokanoninio ansambliai. Markovo vyksmai. Čepmeno-Kolmogorovo lygtis. Pagrindinė lygtis. Fokerio-Planko ir Lanževano lygtys. Brauno dinamika. Dinaminė netvarka. Metropolisio algoritmas. Lastelių automatai</p> <p><i>Netvarkių struktūrų modeliavimas.</i> Fraktalės samprata. Fraktalinė struktūra. Fraktalinė kinetika. Fraktalinis laikas. Perkoliacija ir Brauno dalelės judėjimas fraktalėse. Bangelių metodas</p> <p><i>Nekorektiniai uždaviniai.</i> Nekorektinių uždavinių sprendimas. Sprendinių regularizacijos principai. Tichonovo regularizacija.</p> <p><i>Euristiniai modelių optimizacijos metodai.</i> Modelinis atkaitinimas. Neuroniniai tinklai. Genetiniai algoritmai. Saviorganizuoto kritiškumo modelis. Ekstremaliosios optimizacijos algoritmas. Dalelių spiečiaus optimizacijos metodas.</p>			
Pagrindinė literatūra			
<ol style="list-style-type: none"> <li>Xin-She Yang. Engineering optimization : an introduction with metaheuristic applications. John Wiley &amp; Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2010.</li> <li>N.G. van Kampen. Stochastic processes in physics and chemistry. North-Holland, Amsterdam, 2004.</li> <li>W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling &amp; B.P.Flannery. Numerical recipes in Fortran. Art of scientific computing. Cambridge University Press. 2007.</li> <li>H.Gould, J.Tobochnik. An introduction to computer simulation methods. Application to physical systems. (3rd edition). Addison-Wesley Publishing Company. N.Y. 2006.</li> </ol>			
Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Jevgenij Chmeliov  Gediminas Trinkūnas	dr.	doc.	<ol style="list-style-type: none"> <li>S. Farooq, J. Chmeliov, G. Trinkunas, L. Valkunas, H. van Amerongen. Is There Excitation Energy Transfer between Different Layers of Stacked Photosystem-II-Containing Thylakoid Membranes? J. Phys. Chem. Lett. 2016, 6, 1406-1410.</li> <li>J. Chmeliov, G. Trinkunas, H. van Amerongen, L. Valkunas Excitation migration in fluctuating light-harvesting antenna systems. Photosynth Res. 2016, 127, 49–60.</li> <li>S. Farooq, J. Chmeliov, E. Wientjes, R. Koehorst, A. Bader, L. Valkunas, G. Trinkunas, H. van Amerongen.</li> </ol>

			<p>Dynamic feedback of the photosystem II reaction centre on photoprotection. in plants. Nature plants 2018, 4, 225-231.</p> <p>4. M. Tutkus, P. Akhtar, J. Chmeliov, F. Gorfol, G. Trinkunas, P.H. Lambrev, L. Valkunas. Fluorescence Microscopy of Single Liposomes with Incorporated Pigment-Proteins. Langmuir, 2018, 34, 14410-14418.</p> <p>5. H. van Amerongen, J. Chmeliov, "Instantaneous Switching between Different Modes of Non-Photochemical Quenching in Plants. Consequences for Increasing Biomass Production", Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics, 2020, 1861, 148119.</p>
<p>Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2022 m. vasario 02 d., protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-32</p>			
<p>Komiteto pirmininkas S. A. Juršėnas</p>			