

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO PROGRAMA

Dalyko pavadinimas	Mokslų kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Katedra
Analizinių skaičiavimų pagrindai naudojant kompiuterinės algebras sistemas	Fiziniai mokslai, Fizika, 02P	VU TFAI	

Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)
Paskaitos	1,5	Konsultacijos	1,5
Individualus	4,5	Seminarai	1,5

### Dalyko anotacija

Mokslininkas, inžinierius ar studentas, tiriantis sudėtingas sistemas turi mokėti ne tik išvesti formules, įvertinti jas skaičiais, bet ir pateikti rezultatus grafiškai, gražiai apipavidalinti bei pristatyti. Visa tai suteikia aplinkos, kurios vadinamos bendrosios paskirties kompiuterinės algebras sistemomis (CAS): *Maple*, *Mathematica* ir kitos. CAS leidžia sutelkti dėmesį į sprendžiamos problemos esmę ir išlaisvina vartotoją nuo neesminių skaičiavimo (tik analizinio, tiek skaitinio), apipavidalinimo ar pristatymo kūrimo detalių. Dėl šių labai patrauklių bruožų CAS plačiai naudoja ne tik mokslininkai, bet jos plačiai taikomos ir švietimo sistemoje. Akivaizdu, kad šiuolaikinis mokslinis teorinis darbas yra sunkiai įsivaizduojamas be CAS naudojimo įgūdžių. Pastariesiems savarankiškai įgyti reikia daug laiko ir pastangų.

Siūlomas interaktyvus 3 dalių kursas supažindina doktorantus su teorinėje fizikoje plačiai naudojamos CAS *Mathematica* – taikymu sprendžiant šiuolaikinės teorinės fizikos uždavinius. Pirmoji kurso dalis skirta konkrečios CAS svarbiausiųjų bruožų, organizavimo principų ir dažniausiai naudojamų komandų (diferencijavimo, integravimo, diferencialinių ir algebrinių lygčių sprendimo, piešimo ir pan.) aptarimui. Šią dalį baigia trumpa pagrindinių programavimo stilių (procedūros, objekcinio ir funkcinio) apžvalga.

Antroji kurso dalis betarpiškai skirta konkrečių fizikinių problemų sprendimui, pradedant nuo uždavinio formulavimo, piešinio paruošimo, analizinių formulių išvedimo ir baigiant skaitinių rezultatų apskaičiavimu, rezultatų pavaizdavimu bei tinkamu darbo apipavidalinimu. Aptariamų fizikinių problemų sąrašą galima keisti bei plėsti pagal studentų poreikius. Šiuo metu (kartu su prof. A. Dargiu) yra paruoštas 21 skirtingo sudėtingumo uždavinys, pradedant gana paprastais grandinių teorijos, dalelių judėjimo įvairių konfigūracijų elektromagnetiniuose laukuose ir baigiant sudėtingais kvantinės mechanikos uždaviniais: netiesiniu kvantiniu osciliatoriumi, kvantiniu šuliniu ar dalelės sklaida kertant dviejų barjerų sistemą. Daug platesnis ir įvairesnis (apie 1000 uždavinių) problemų ratas ir jų

sprendimo būdai (kartais net keli) sistemingai gvildenamas knygoje [1,2,3], su kuriuo turėtų susipažinti kiekvienas būsimas fizikas teoretikas, nes jį peržvelgęs, tikėtina, ras bent dalies rūpimų problemų sprendimo būdą. Toks pilnai paruoštų sudėtingų uždavinių sprendimo mokymas leidžia suprasti kaip įvairios komandos tarpusavyje “sąveikauja”, lavina problemos formulavimo, tipinių sunkumų įveikimo įgūdžių, todėl yra daug vertingesnis už padrikus vienos ar kitos komandos vartojimo pavyzdžius pateikiamus dokumentacijoje.

Trečioji kurso dalis (kurią individualiai pritaikome kiekvienam studentui) yra skirta doktoranto tiriamojo darbo problemos formulavimui ir sprendimui taikant *Mathematica* sistemą. Būtent doktoranto atliktas darbas sprendžianti jo tiriamą problemą su CAS yra svarbiausias šio kurso sėkmingo vertinimo kriterijus.

### Pagrindinė literatūra

1. Michael Trott, “The Mathematica guidebook for symbolic”, 2006 (1453psl)
2. Michael Trott, “The Mathematica guidebook for numeric”, 2006 (1208psl)
3. Michael Trott, “The Mathematica guidebook for graphics”, 2004 (1340psl)
4. Andrey Grozin, “Introduction for Mathematica for physicists”, 2014 (219psl)

### Papildoma literatūra

1. A. Dargys, A. Acus, „Fizika su Kompiuteriu“, Ciklonas, 2003.
2. A. Dargys, A. Acus, „Dviejų ir trijų lygmenų atomai ir sistemos kvantinėje mechanikoje“, Vilniaus universitetas, 2011.
3. A. Dargys, A. Acus, „Cliffordo geometrinė algebra is jos taikymai“, Vilniaus universitetas, 2015.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Gediminas Gaigalas	hab. dr	prof.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Borgoo A., O. Scharf, Gaigalas G., Godefroid M., Multiconfiguration electron density function for the ATSP2K-package // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2010, Vol. 181, iss. 2, p. 426-439.</li> <li>2. P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieron, New version GRASP2K Relativistic atomic structure package // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2013, Vol. 184, iss. 9, p. 2197-2203.</li> </ol>

			<p>3. C. Naze, E. Gaidamauskas, G. Gaigalas, M. Godefroid, P. Jönsson, RIS3: A program for relativistic isotope shift calculations // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2013, Vol. 184, iss. 9, p. 2187-2196.</p>
Artūras Acus	dr.	doc.	<p>1. A. Acus, A. Dargys. Closed form solution for a double quantum well using Gröbner basis. Physica Scripta 84 1, 2011, psl. 015703.</p> <p>2. A. Halavanau E. Norvaišas Ya. Shnir A. Acus. Hopfion canonical quantization . Physics Letters B 711 2, 2012, psl. 212 – 216</p> <p>3. E. Norvaišas Ya. Shnir, A. Acus. Hopfions interaction from the viewpoint of the product ansatz. Physics Letters B 733, 06 2014, psl. 15-20.</p> <p>4. A. Acus, E. Norvaišas, Ya. Shnir. Interaction of hopfions of charge 1 and 2 from product ansatz. EPL (Europhysics Letters) 110 1, 2015, psl. 10007.</p> <p>5. S-W Su, S-C Gou, I-K Liu, I B Spielman, L Santos, A Acus, A Mekys, J Ruseckas, G Juzeliūnas. Position-dependent spin–orbit coupling for ultracold atoms. New Journal of Physics 17 3, 2015, psl. 033045.</p>
<p>Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2017 m. vasario mėn. 21 d., protokolo Nr. 108</p>			
<p>Komiteto pirmininkas S. Juršėnas</p>			