

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslų kryptis (kodas)	Fakultetas	Centras/Institutas/Skyrius
<b>Analizinių skaičiavimų pagrindai naudojant kompiuterinės algebros sistemas</b> (8 ECTS kreditai)	Fizika N 002	Fizikos	Teorinės fizikos ir astronomijos institutas
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	20
Individualus	160	Seminarai	20

### 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 algebros sistemomis (CAS): *Mathematica*, *Maple* ir kitos. CAS leidžia sutelkti dėmesį į sprendžiamos problemos esmę ir išlaisvina vartotoją nuo neesminių skaičiavimo (tiek 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 dažniausia naudojamų komandų (diferencijavimo, integravimo, diferencialinių ir algebrinių lygčių sprendimo, piešimo ir pan.) aptarimui. Šią dalį baigia trumpa pagrindinių programavimo stilių (procedūros, objektinio ir funkcinio) apžvalga.

Antroji kurso dalis betarpiškai skirta konkrečių fizikinių problemų sprendimui [4], pradedant nuo uždavinio formulavimo, piešinio paruošimo, analizinių formulų išvedimo ir baigiant skaitinių rezultatų apskaičiavimu, rezultatų pavaizdavimu bei tinkamu darbo apipavidalinimu. Aptariamų fizikinių problemų sąrašą galima keisti bei plėsti pagal studentų poreikius. 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 [5]: 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. Studentas

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) .
5. Roman Schmied, "Using Mathematica for quantum mechanics (the student's manual)", 2019 (202psl).

Konsultuojantys dėstytojai	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. G. Gaigalas, C. Froese Fischer, P. Rynkun, P. Jönsson, JJ2LSJ Transformation and unique labeling for energy levels // Atoms. ISSN 2218-2004. 2017, Vol. 5, p. 1-11. <a href="https://doi.org/10.3390/atoms5010006">https://doi.org/10.3390/atoms5010006</a></li> <li>2. J. Ekman, P. Jönsson, M. Godefroid, C. Nazé, G. Gaigalas, J. Bieroń, RIS4: A program for relativistic isotope shift calculations theory // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2019, Vol. 235, p. 433-446. <a href="https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.08.017">https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.08.017</a></li> <li>3. C. Froese Fischer, G. Gaigalas, P. Jönsson, J. Bieroń, GRASP2018 – A Fortran 95 version of the general relativistic atomic structure package theory // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2019, Vol. 237, p. 184-187. <a href="https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.10.032">https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.10.032</a></li> <li>4. G. Gaigalas, Coupling: The program for searching optimal coupling scheme in atomic theory // Computer physics communications. ISSN 0010-4655. 2020, Vol. 247, 106960, p. 1-9. <a href="https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.106960">https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.106960</a></li> </ol>
Artūras Acus	dr.	doc.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 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.</li> <li>2. 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.</li> <li>3. A. Dargys, A. Acus, "Cliffordo geometrinė algebra ir jos taikymai", monografija, ISBN: 9786094204371, Vilnius, Petro ofsetas, 2015, 386psl.</li> </ol>

			<ol style="list-style-type: none"> <li>4. A. Dargys, A. Acus, Calculation of Quantum Eigens with Geometrical Algebra Rotors, Adv. Appl. Clifford Algebras (2017) 27: 241. <a href="https://doi.org/10.1007/s00006-015-0549-6">https://doi.org/10.1007/s00006-015-0549-6</a></li> <li>5. A. Acus, A., Dargys, „The Inverse of a Multivector: Beyond the Threshold <math>p+q=5</math>”, Adv. Appl. Clifford Algebras (2018) 28: 65. <a href="https://doi.org/10.1007/s00006-018-0885-4">https://doi.org/10.1007/s00006-018-0885-4</a></li> <li>6. A. Matulis, A. Acus „CLASSICAL ANALOG TO THE AIRY WAVE PACKET“, Lithuanian Journal of Physics, Vol. 59, No 3, pp. 121-129 (2019)</li> </ol>
<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>