

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas		Mokslų kryptis (šaka) kodas	Fakultetas/ Institutas	Katedra/ Skyrius
<b>Specialieji matematiniai metodai ir skaitinis modeliavimas</b>		Fizika 02P	Fizinių ir technologinių mokslų centras, Fizikos institutas	Molekuliųjų darinių fizikos skyrius
Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	Studijų būdas	Kreditų skaičius (ECTS)	
Paskaitos		Konsultacijos	1,5	
Individualus	6	Seminarai	1,5	
Dalyko anotacija				
<p><b>Ižanga.</b> Teorijos ir eksperimento sąsaja. Fizikiniai modeliai ir skaitinis eksperimentas. Modeliavimo struktūra. Modelių įvairovė.</p> <p><b>Determinuotoji ir stochastinė dinamika.</b> Šuoliniai, difuziniai ir determinuotieji vyksmai. Molekulinė dinamika. Verlet algoritmas. Kanoninio ir mikrokanoninio ansambliai. Markovo vyksmai. Čepmeno-Kolmogorovo lygtis. Pagrindinė lygtis. Fokerio-Planko ir Lanževano lygtys. Brauno dinamika. Dinaminė tinkle. Metropolio algoritmas. Lastelių automatai</p> <p><b>Netvarkiųjų struktūrų modeliavimas.</b> Fraktalės samprata. Fraktalinė struktūra. Fraktalinė kinetika. Fraktalinis laikas. Perkoliacija ir Brauno dalelės judėjimas fraktalėje. Bangelių metodas</p> <p><b>Nekorektiniai uždaviniai.</b> Nekorektinių uždavinių sprendimas. Sprendinių reguliarizacijos principai. Tichonovo reguliarizacija.</p> <p><b>Euristiniai modelių optimizacijos metodai.</b> Modelinis atkaitinimas. Neuroniniai tinklai. Genetiniai algoritmai. Saviorganizuoto kritiškumo modelis. Ekstremaliosios optimizacijos algoritmas. Spiečiaus optimizacija.</p>				
Pagrindinė literatūra				
1. Xin-She Yang. Engineering optimization : an introduction with metaheuristic applications. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2010.				
2. N.G. van Kampen. Stochastic processes in physics and chemistry. North-Holland, Amsterdam, 2004.				
3. W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling & B.P.Flannery. Numerical recipes in Fortran. Art of scientific computing. Cambridge University Press. 2007.				
4. H.Gould, J.Tobochnik. An introduction to computer simulation methods. Application to physical systems. (3 <sup>rd</sup> edition). Addison-Wesley Publishing Company. N.Y. 2006.				

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslų laipsnis	pedag. Vardas	Svarbiausieji darbai mokslų kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus (5-ios ISI publikacijos)
Gediminas Trinkūnas	Dr., vyriaus. m.d.		<p>1. L. Valkunas, J. Chmeliov, <b>G. Trinkunas</b>, C. D. P. Duffy, R. van Grondelle, A. Ruban. Excitation Migration, Quenching, and Regulation of Photosynthetic Light Harvesting in Photosystem II. <i>J. Phys. Chem. B</i> <b>2011</b>, 115, 9252-9260.</p> <p>2. M. Pajusalu, M. Raetsep, <b>G. Trinkunas</b>, A. Freiberg. Davydov Splitting of Excitons in Cyclic</p>

		<p>Bacteriochlorophyll a Nanoaggregates of Bacterial Light-Harvesting Complexes between 4.5 and 263 K. <i>ChemPhysChem</i> <b>2011</b>, 12, 634-644.</p> <p>3. <b>G. Trinkunas</b>, O. Zerlauskiene, V. Urboniene, J. Chmeliov, A. Gall, B. Robert, L. Valkunas. Exciton Band Structure in Bacterial Peripheral Light-Harvesting Complexes. <i>J. Phys. Chem. B</i> <b>2012</b>, 116, 5192-5198.</p> <p>4. J. Chmeliov, <b>G. Trinkunas</b>, H. van Amerongen, L. Valkunas. Light Harvesting in a Fluctuating Antenna. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> <b>2014</b>, 136, 8963–8972.</p> <p>5. S. Farooq, J. Chmeliov, <b>G. Trinkunas</b>, L. Valkunas, H. van Amerongen. Is There Excitation Energy Transfer between Different Layers of Stacked Photosystem-II-Containing Thylakoid Membranes? <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> <b>2016</b>, 6, 1406-1410.</p>
--	--	--

Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2017 m. vasario mėn. 21 d.,  
protokolo Nr. 108

Komiteto pirmininkas S. Juršėnas