

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis, kodas	Fakultetas	Institutas, katedra
Skaitinis modeliavimas	Informatika (N 009)	MIF	Informatikos institutas, Kompiuterinio ir duomenų modeliavimo katedra

Studijų būdas	Kreditų skaičius ECTS	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos		konsultacijos	2
individualus	3	seminarai	2 (pavasario semestras)

Dalyko anotacija
Dalyko tikslas – suprasti skaitiniam (kompiuteriniam) modeliavimui būdingas sąvokas ir reiškinius, susipažinti su taikymo sritimis. Išmokyti taikyti ir programuoti įvairius skaitinio modeliavimo algoritmus, kurti ir vystyti taikomuosius modeliavimo uždavinius, atlikti modeliuojamų uždavinių ekspertinius tyrimus. Praktinė dalyko dalis – projekto, susijusio su kompiuteriniu biojutiklio modeliavimu (detalesnė informacija pateikta toliau) programinis įgyvendinimas ir atsiskaitymas. Atliekant projektą reikės įsigilinti į daugelį dalyko teorijos temų, suprasti jų tarpusavio ryšius. Dalyko teorijos temos: • Skaitinio modeliavimo principai, paprasčiausių šiuos principus iliustruojančių skaitinių algoritmų pavyzdžiai. • Paklaidos, jų įvertinimas ir analizė. • Monte Karlo tipo metodai, pseudoatsitiktinių skaičių generavimas bei jų kokybės įvertinimas. • Interpoliavimas ir aproksimacija polinomais bei splineais. • Skaitinis diferencijavimas ir integravimas. • Spektriniai metodai, greitoji Furje transformacija. • Netiesinių skaliarinių lygčių sprendimo algoritmai. • Tiesinės ir netiesinės dinaminės sistemos ir erdviniai evoliuciniai diferencialiniai modeliai: tiesiniai diferencialiniai modeliai ir jų taikymo sritys; netiesinių diferencialinių modelių pavyzdžiai. Kraštinės ir pradinės sąlygos diferencialiniuose modeliuose. • Algoritmų diferencialiniams modeliams konstravimo principai, pagrindinių tipų lygčių skirtuminės schemos, dviluoksnės ir daugiasluoksnės schemos, schemos su svoriais, ekonominės skirtuminės schemos. • Netiesinių erdvių evoliucinių diferencialinių modelių skaitinis modeliavimas, skirtuminės lygtys, bazinė algoritmo schema. • Tiesinės algebros algoritmų svarba netiesinių diferencialinių uždavinių modeliavime, tiesioginiai ir iteraciniai skirtuminių lygčių sprendimo metodai. • Algoritmo ir jo kompiuterinės realizacijos testavimas, testinio uždavinio sukūrimas, algoritmo patikimumo kontrolės strategijos. • Algoritmo aproksimacijos eilė, konvergavimas, stabilumas, konservatyvumas. Išreikštiniai ir neišreikštiniai algoritmai, jų privalumai bei trūkumai.

- Skaitinio modeliavimo taikymo pavyzdys – kompiuterinis biojutiklio modeliavimas: elektrocheminio biojutiklio sandara ir biocheminės reakcijos schema; matematiniai modeliai ir skaitiniai algoritmai jam spręsti; skaitiniai eksperimentai ir jų rezultatai.

Prieš laikant dalyko egzaminą (kurio metu reikės atsakyti į teorinius klausimus iš pateikto temų sąrašo), privaloma atsiskaityti (programiškai realizuoti ir seminario metu apginti) vieną projektą, pasirinkus vieną (iš dviejų) temų:

1. Biojutiklio kompiuterinis modeliavimas, įskaitantis S (substrato), P (produkto), E (fermento) ir EP (fermento-produkto komplekso) kinetiką (metodinė medžiaga projekto įgyvendinimui pateikta pagrindinės literatūros šaltinyje [4], skyriuose 1–3).
2. Biojutiklio kompiuterinis modeliavimas, įskaitantis S (substrato) ir P (produkto) kinetiką (metodinė medžiaga projekto įgyvendinimui pateikta pagrindinės literatūros šaltinyje [4], skyriuose 4–6).

Atsiskaityti už dalyką bus įmanoma tik atsiskaičius už projektą (50% galutinio vertinimo balo) ir pademonstravus teorijos žinias egzamino metu (50% galutinio vertinimo balo).

Pagrindinė literatūra

1. G.Dahlquist and Å.Björck. Numerical Methods in Scientific Computing: Volume 1. SIAM, 2008.
2. R.Čiegis. Diferencialinių lygčių skaitiniai sprendimo metodai. VGTU leidykla "Technika", 2003.
3. R.Baronas, F.Ivanauskas and J.Kulys. Mathematical Modeling of Biosensors. Second edition. Springer, 2021.
4. T.Meškauskas. Kompiuterinis biojutiklio modeliavimas: metodinė medžiaga projektams. 2018.
http://mif.vu.lt/~meska/projektai/Kompiuterinis_Biojutiklio_Modeliavimas.pdf

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Tadas Meškauskas	dr.	http://elaba.mb.vu.lt/mif/?aut=Tadas+Meškauskas
Romas Baronas	dr.	http://elaba.mb.vu.lt/mif/?aut=Romas+Baronas
Linas Bukauskas	dr.	http://elaba.mb.vu.lt/mif/?aut=Linas+Bukauskas