

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 |
|---|
| <p>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.</p> <p>Dalyko teorijos temos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 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 schemas, dvisluoksnės ir daugiasluoksnės schemas, schemas su svoriais, ekonomiškos skirtuminės schemas. • Netiesinių erdvinių 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 atsiskaičiuoti (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).

Atsiskaičiuoti 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 |