

Kompiuterinis fizikinių, cheminių, biologinių ir socialinių sistemų modeliavimas

Computational modelling of physical, chemical, biological and social systems

Vykdomi tarpdisciplininiai tyrimai, kurių objektas – informatikos metodikų, skirtų taikomiesiems uždaviniams (bendradarbiaujant su mokslininkais, dirbančiais medicinos, biochemijos, astrofizikos, socialinių mokslų ir kt. kryptyse) kūrimas ir analizė. Be kitų taikymų, sukurti modeliai ir įrankiai leidžia analizuoti procesus, kai fiziniai eksperimentai ir matavimai yra sudėtingi ir/arba brangūs. Priklausomai nuo konkretaus tiriamo proceso, sudaromi ir analizuojami dvimačiai arba trimačiai (neretai turintys dar ir priklausomybę nuo laiko ir/arba dažnio kintamųjų bei kitų parametrų) matematiniai ir kompiuteriniai modeliai. Jiems spręsti kuriami kompiuterinio modeliavimo algoritmai, veikiantys, pavyzdžiui, baigtinių elementų, baigtinių skirtumų, vaizdų ir signalų apdorojimo metodų, grafų teorijos algoritmų, bei kitų tipų metodų pagrindu. Dažnai duomenų ir/arba tarpinių rezultatų apdorojimui taikomi dar ir dirbtinio intelekto tipo metodai. Svarbi kuriamų metodikų dalis – kompiuterinio modeliavimo rezultatų verifikacija: skaičiavimo paklaidų analizė, rezultatų palyginimas su realiuose eksperimentuose registruojamomis priklausomybėmis, kiti pritaikomumo praktinių uždavinių sprendimui patikrinimo būdai. Kompiuterinis modeliavimas pasižymi didele skaičiavimų apimtimi, todėl naudojama Vilniaus universitete turima aukšto našumo lygiagrečiųjų ir paskirstytųjų skaičiavimų infrastruktūra.

Interdisciplinary research (in collaboration with scientists from medicine, biochemistry, astrophysics, social sciences, and other fields) is conducted on the development and analysis of computer science methods for applied tasks. Among other applications, the models and tools that are developed allow the analysis of processes for which physical experiments and measurements are complicated and/or costly. Depending on the specific process to be studied, mathematical and computational models are built and analyzed in two or three dimensions (often also depending on time and/or frequency variables and other parameters). Computer modeling algorithms are developed to solve them. These algorithms may be based on finite elements, finite differences, image and signal processing methods, graph theory algorithms, and other types of methods. Often, artificial intelligence-type methods are also used for data and/or intermediate results processing. An important part of the developed methodologies is the verification of the results of computer modeling: analysis of computation error, comparison of the results with the dependencies recorded in real experiments, and other ways of verifying their applicability to the solution of practical problems. Computer modeling is characterized by a large volume of computations. Therefore, the high-performance parallel and distributed computing infrastructure available at Vilnius University is used.