

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Institutas, katedra
Skaitinis modeliavimas	Informatika, 09P	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 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: An Introduction for Chemists and Mathematicians. Springer, 2010.
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.	<ol style="list-style-type: none"> 1. M. Sapagovas, T. Meškauskas, F. Ivanauskas, Influence of complex coefficients on the stability of difference scheme for parabolic equations with non-local conditions, <i>Applied Mathematics and Computation</i>, 332, pp. 228–240, 2018. http://doi.org/10.1016/j.amc.2018.03.072 2. T. Meškauskas, F. Ivanauskas, V. Laurinavicius, Degradation of substrate and/or product: mathematical modeling of biosensor action, <i>Journal of Mathematical Chemistry</i>, 51, pp. 2491–2502, 2013. http://doi.org/10.1007/s10910-013-0223-y 3. M. Sapagovas, R. Čiupaila, Ž. Jokšienė, T. Meškauskas, Computational experiment for stability analysis of difference schemes with nonlocal conditions, <i>INFORMATICA</i>, 24, pp. 275–290, 2013. ISSN: 0868-4952
Romas Baronas	dr.	<ol style="list-style-type: none"> 1. R. Baronas, Nonlinear effects of diffusion limitations on the response and sensitivity of amperometric biosensors, <i>Electrochimica Acta</i>, 2017, 240, pp. 399–407, ISSN 0013-4686. http://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.04.075 2. R. Baronas, A. Žilinskas, L. Litvinas, Optimal design of amperometric biosensors applying multi-objective optimization and decision visualization,

		<p><i>Electrochimica Acta</i>, 2016, 211, pp. 586–594, ISSN 0013-4686. http://doi.org/10.1016/j.electacta.2016.06.101</p>
		<p>3. V. Ašeris, R. Baronas, K. Petrauskas, Computational modelling of three-layered biosensor based on chemically modified electrode, <i>Computational and Applied Mathematics</i>, 2016, 35(2), pp. 405-421, ISSN 0101-8205. http://doi.org/10.1007/s40314-014-0197-9</p>
<p>Linus Bukauskas</p>	<p>dr.</p>	<p>1. M. E. Hodeish, L. Bukauskas, V. T. Humbe, An Optimal (k,n) visual secret sharing scheme for information security, <i>Procedia Computer Science</i>, 93, pp. 760–767, 2016, Amsterdam : Elsevier B.V. ISSN 1877-0509. http://doi.org/10.1016/j.procs.2016.07.288</p> <p>2. A. Brilingaitė, L. Bukauskas, V. Krinickij, E. Kutka, Environment for cybersecurity tabletop exercises, <i>ECGBL 2017 : Proceedings of the 11th European conference on game-based learning</i>, FH JOANNEUM University of Applied Science, Graz, Austria, 5–6 October 2017 / edited by M.Pivec, J.Gründler, pp. 47–55, 2018. Graz : Academic Conferences and Publishing International Limited, 2017, ISBN 9781911218562, eISBN 9781911218579, ISSN 2049-0992, eISSN 2049-100X.</p> <p>3. A. Brilingaitė, L. Bukauskas, A. Juškevičienė, Competency assessment in problem-based learning projects of information technologies students, <i>Informatics in Education</i>, 17, pp. 21–44, 2018. ISSN: 1648-5831, eISSN: 2335-8971. http://doi.org/10.15388/infedu.2018.02</p>