

Știința Computațională

Toma Mădălin-Constantin – Departamentul de Informatică, FMI, UVT

Știința computațională reprezintă o ramură a informaticii ce folosește calculatoarele și algoritmi pentru a rezolva probleme complexe din diverse domenii precum fizica, biologia, medicina, economia și ingineria, interpretate sub formă de ecuații matematice și simulări pe calculator.

Activități principale

- Teorie: Analiză și stocare de date, algoritmi, simulări virtuale, machine learning
- Experiment: Metodele experimentale implică rularea de simulări pentru a testa ipoteze sau a observa comportamentul unor sisteme complexe
- Design: Proiectarea de modele matematice și computaționale care descriu fenomene reale

Relații cu alte subdomenii

- Arhitectura Calculatoarelor: Nevoia de componente performante pentru calcule, analiza și stocarea de date masive și proiectarea de simulări 3D.
- Algoritmi și Structuri de Date: Eficiența algoritmilor folosiți în analiza datelor, proiectarea simulărilor etc.
- Inteligența Artificială și Machine Learning: utilizarea AI pentru dezvoltarea modelelor predictive, analiza de seturi mari de date și optimizarea algoritmilor.
- Baze de Date: Gestionarea și stocarea datelor generate de simulări
- Grafică pe Calculator: Simulări vizuale pentru experimente
- Bioinformatică: Analiza genomică, plierea proteinelor, descoperirea de medicamente

Probleme importante și probleme deschise

Probleme importante

- Scalabilitatea Algoritmilor pentru Calcul de Înaltă Performanță (HPC).
- Incertitudinea și Validarea Modelelor Computaționale

Probleme deschise

- Simularea cuantică a sistemelor moleculare
- Reprezentarea și simularea materialelor topologice exotice

Persoane importante

- John von Neumann: matematician și informatician, contribuții fundamentale la arhitectura calculatoarelor și la dezvoltarea primelor simulări numerice
- Alan Turing: matematician și logician, cunoscut pentru contribuțiile în informatica teoretică și inteligența artificială

Foruri importante

Reviste

- SIAM Journal on Scientific Computing (<https://epubs.siam.org/journal/sisc>)
- Journal of Computational Physics
(<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-computational-physics>)

Conferințe

- The International Conference for High Performance Computing (<https://sc25.supercomputing.org/>)
- SIAM Conference on Computational Science and Engineering
(<https://www.siam.org/conferences/cm/cse-2025>)

Dimensiunea locală și globală

Local (UVT)

- Cercetători activi:
 - Cosmin Bonchiș – Information theory, Membrane computing, Parallel and distributed computing
 - Daniela Zaharie – Evolutionary computing, Machine learning, Data mining
- Proiecte:
 - MOISE – modernizarea infrastructurii de calcul și stocare a Centrului de Cercetare în Informatică al UVT

Global

- Centre de excelență:
 - Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) – <https://www.cscs.ch/>
- Proiecte internaționale:
 - PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) – <https://prace-ri.eu/>