

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ УФИМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

РЕКОМЕНДОВАНО

И.о. директора института ИНК УФИЦ РАН

« »



УТВЕРЖДАЮ

И.о. руководителя УФИЦ РАН

В.Б. Мартыненко

« 18 » *март* 2022 г.

ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по научной специальности

**1.2.2-Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

Программа составлена в соответствии с научной специальностью и отраслью науки, предусмотренными номенклатурой научных специальностей, по которым присуждаются учёные степени (утверждена Приказом Минобрнауки России от 24.02.2021 г. № 118).

Разработчики _____

д-р физ-мат. наук, проф. И.М. Губайдуллин

д-р физ.-мат. наук, доц. К.Ф. Коледина

Согласовано:

Заведующий отделом аспирантуры УФИЦ РАН

М.Ю. Тимофеева

Ученый секретарь ИНК УФИЦ РАН

/З.С. Кинзябаева

ПРОГРАММА-МИНИМУМ
КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ
1.2.2-Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Введение

В основе настоящей программы лежит материал курсов: функциональный анализ, математическая физика, теория вероятностей, математическая статистика, численные методы, методы оптимизации.

1. Математические основы

Элементы теории функций и функционального анализа. Понятие меры и интеграла Лебега. Метрические и нормированные пространства. Пространства интегрируемых функций. Пространства Соболева. Линейные непрерывные функционалы. Теорема Хана—Банаха. Линейные операторы. Элементы спектральной теории. Дифференциальные и интегральные операторы.

Экстремальные задачи. Выпуклый анализ. Экстремальные задачи в евклидовых пространствах. Выпуклые задачи на минимум. Математическое программирование, линейное программирование, выпуклое программирование. Задачи на минимум. Основы вариационного исчисления. Задачи оптимального управления. Принцип максимума. Принцип динамического программирования.

Теория вероятностей. Математическая статистика. Аксиоматика теории вероятностей. Вероятность, условная вероятность. Независимость. Случайные величины и векторы. Элементы корреляционной теории случайных векторов. Элементы теории случайных процессов. Точечное и интервальное оценивание параметров распределения. Элементы теории проверки статистических гипотез. Элементы многомерного статистического анализа. Основные понятия теории статистических решений. Основы теории информации.

2. Информационные технологии

Принятие решений. Общая проблема решения. Функция потерь. Байесовский и минимаксный подходы. Метод последовательного принятия решения.

Исследование операций и задачи искусственного интеллекта. Экспертизы и неформальные процедуры. Автоматизация проектирования. Искусственный интеллект. Распознавание образов.

3. Компьютерные технологии

Численные методы. Интерполяция и аппроксимация функциональных зависимостей. Численное дифференцирование и интегрирование. Численные методы поиска экстремума. Вычислительные методы линейной алгебры. Численные методы решения систем дифференциальных уравнений. Сплайн-аппроксимация, интерполяция, метод конечных элементов. Преобразования Фурье, Лапласа, Хаара и др. Численные методы вейвлет-анализа.

Вычислительный эксперимент. Принципы проведения вычислительного эксперимента. Модель, алгоритм, программа.

Алгоритмические языки. Представление о языках программирования высокого уровня. Пакеты прикладных программ.

Базы данных. Основные понятия баз данных.

Параллельные вычисления. Параллельное программирование с использованием технологии MPI. Параллельное программирование с использованием технологии OPENMP.

4. Методы математического моделирования

Основные принципы математического моделирования. Элементарные математические модели в механике, гидродинамике, электродинамике. Универсальность математических моделей. Методы построения математических моделей на основе фундаментальных законов природы. Вариационные принципы построения математических моделей.

Методы исследования математических моделей. Устойчивость. Проверка адекватности математических моделей.

Математические модели в научных исследованиях. Математические модели в статистической механике, экономике, биологии. Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем.

Задачи редукции к идеальному прибору. Синтез выходного сигнала идеального прибора. Проверка адекватности модели измерения и адекватности результатов редукции.

Модели динамических систем. Особые точки. Бифуркации. Динамический хаос. Эргодичность и перемешивание. Понятие о самоорганизации. Диссипативные структуры. Режимы с обострением.

5. Численные методы

Задача интерполяции. Интерполирование многочленам Интерполяционная формула Лагранжа. Остаточный член интерполяционной формулы Лагранжа. Интерполирование с кратными узлами. Интерполяционная формула Ньютона. Остаточный член интерполяционной формулы Ньютона.

Дискретные аналоги дифференциальных уравнений. Уравнения в конечных разностях, методы решения.

Многочлены Чебышева и их применение в задачах численного анализа. Минимизация оценки остаточного члена интерполяционной формулы.

Задачи численного дифференцирования.

Вычислительная погрешность формул численного дифференцирования. Формулы численного интегрирования. Метод неопределенных коэффициентов. Оценка погрешности.

Квадратурные формулы Ньютона-Котеса. Оценка погрешности квадратуры. Квадратурные формулы Гаусса. Оценка погрешности квадратуры. Методы повышения точности формул численного интегрирования Постановка задачи оптимизации квадратур.

Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Численное решение задачи Коши с помощью формулы Тейлора. Численное решение задачи Коши квадратурами. Формула Эйлера. Формула Адамса. Семейство методов Рунге-Кутты. Погрешность метода.

Численные методы решения задачи Коши с контролем погрешности на шаге. Многошаговые методы решения задачи Коши. Конечно-разностные методы решения задачи Коши. Метод неопределенных коэффициентов.

Методы численного интегрирования уравнений второго порядка.

6. Системный анализ

Системы массового обслуживания. Классификация СМО и их основные характеристики. Системы с отказами. Системы с ожиданием. Одноканальная СМО с отказами. Многоканальная СМО с отказами. Пример многоканальной СМО с отказами.

Одноканальная СМО с ожиданием. Пример одноканальной СМО с ожиданием. Многоканальная СМО с ожиданием. Пример многоканальной СМО с ожиданием. СМО с ограниченным временем ожидания. Закрытые СМО и ее особенности.

Пример замкнутой СМО. СМО со “взаимопомощью” между каналами. СМО с отказами. СМО со “взаимопомощью” между каналами. СМО с очередью.

7. Математическая теория измерений

Основные понятия теории надежности. Надежность систем без резервирования. Надежность систем с резервированием. Надежность систем с холодным резервом и простейшими потоками событий. Надежность систем с облегченным резервом и простейшими потоками событий. Статистические задачи принятия решения. Основные понятия и терминология. Субъективная вероятность.

Относительное правдоподобие. Предположения субъективной вероятности. Построение вероятностного распределения. Полезность. Предпочтения во множестве вероятностных распределений

Определение функции полезности. Аксиоматический подход к полезности. Построение функции полезности. Байесовский риск и байесовские решения. Вогнутость байесовского риска. Рандомизация и смешанные решения.

8. Методы оптимизации

Математическая формулировка задачи непрерывной оптимизации в конечномерном пространстве. Условия существования минимума в детерминированных задачах оптимизации. Классификация поисковых методов оптимизации и методология их сравнения. Методы поиска глобального минимума одномерных многоэкстремальных функций. Многомерная локальная безусловная оптимизация. Детерминированные прямые методы: Метод Гаусса-Зейделя, Метод Хука-Дживса, Симплекс-метод. Задачи многокритериальной оптимизации и методы их решения. Задачи оптимального управления и методы их приближенного решения

Основная литература

1. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Функциональный анализ. М.: Наука, 1984.
2. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1981.
3. Боровков А.А. Теория вероятностей. М.: Наука, 1984.
4. Боровков А.А. Математическая статистика. М.: Наука, 1984.
5. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
6. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. М.: Физматлит, 1997.
7. Математическое моделирование / Под ред. А.Н. Тихонова, В.А. Садовниченко и др. М.: Изд-во МГУ, 1993.
8. Лебедев В.В. Математическое моделирование социально-экономических процессов. М.: ИЗОГРАФ, 1997.
9. Петров А.А., Поспелов И.Г., Шананин А.А. Опыт математического моделирования экономики. М.: Энергоатомиздат, 1996.

10. Пытьев Ю.П. Методы математического моделирования измерительновычислительных систем. М.: Физматлит, 2002.
11. Вентцель Е.С. Теория вероятностей. М., Высшая школа, 2001.
12. Вентцель Е.С., Овчаров Л.Л. Задачи и упражнения по теории вероятностей. М., Высшая школа, 2002.
13. Соколов Г.А., Чистякова Н.А. Теория вероятностей. Управляемые цепи Маркова в экономике. М., Физматлит, 2005.
14. Петросян А.А., Занкевич Н.А., Семина Е.А. Теория игр. М., Высшая школа, 1998.
15. Вентцель Е.С. Исследование операций: Задачи, принципы, методология. М., Высшая школа, 2001.
16. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.
17. Gear C.V. Numerical initial value problems in ordinary differential equations. Englewood Cliffs: Pentice-Hall, 1971.
18. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
19. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие. Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.

Дополнительная литература

1. Абдюшева С.Р., Лебедева С.Л., Спивак С.И., Шагапов И.А. Теория игр и исследование операций. Нефтекамск: РИЦ БашГУ, 2007, 88 с.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы, М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2003.
3. Бахвалов Н.С., Лапин Н.В., Чижонков Е.В. Численные методы в задачах и упражнениях, М.: Высшая школа, 2000.
4. Вержбицкий В.М. Численные методы. Математический анализ и ОДУ, М.: Высшая школа, 2001.
5. Рябенский В.С. Введение в вычислительную математику, М: Физматлит, 2000.
6. Лабораторный практикум Основы вычислительной математики, М: МЗ Пресс, 2003.
7. Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика, М.: Физматлит, 2000.
8. Демидович Б.П., Марон И.А. «Основы вычислительной математики», М.: Наука, Физматлит, 1966.
9. Беллман Р. Динамическое программирование. М.: Иностранная литература, 1960.
10. Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями: учеб.пособие для вузов. М.:Дрофа, 2006.
11. Жалнин Р.В., Панюшкина Е.Н., Пескова Е. Е., Шаманаев П.А. Основы параллельного программирования с использованием технологий MPI и OpenMP: учебное пособие. Саранск: Изд-во СВМО, 2013.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА

по специальности 1.2.2-Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

1. Математическое моделирование кинетики и термодинамики

Разработка кинетических моделей химических реакций. Гомогенные и гетерогенные реакции. Замкнутые и открытые системы. Кинетическое уравнение химического процесса. Константа скорости и энергия активации стадии. Прямая и обратная задачи.

Дифференциальные уравнения в задачах химической кинетики. Кинетика простых реакций. Кинетика обратимых реакций. Численные методы решения дифференциальных уравнений.

Термодинамический процесс. Математические методы в термодинамике. Начала термодинамики.

Рекомендованная литература

Основная

1. Царева З.М., Орлова Е.А. Теоретические основы химической технологии. Киев: Высшая школа, 1986, 271 с.
2. Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск: Наука, 1983, 255 с.
3. Розовский А.Я. Гетерогенные химические реакции (кинетика и макрокинетика). М.: Наука, 1980, 324 с.
4. Слинько М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. Новосибирск, Ин-т катализа им. Борескова СО РАН, 2004, 488 с.
5. Яблонский Г.С., Спивак С.И. Математические модели химической кинетики. М.: Знание, 1977, 64 с.
6. Джонсон К. Численные методы в химии. М.: Мир, 1983, 504 с.
8. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики: Учебник для хим. фак. ун-тов, 4-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. школа, 1984, 463 с.
9. Бланшет Ж., Саммерфилд М. Qt 4: Программирование GUI на C++. - М.: Кудиц-Пресс., 2008, 736 с.
10. Огурцов А.П., Недопекин Ф.В., Толстых В.К., Володин Н.А. Прямая оптимизация теплофизических процессов. Донецк: Изд. "Юго-Восток", 1997.
11. Крылов О.В. Гетерогенный катализ. Москва: ИКЦ «Академкнига». 2004.
12. Димитров В.И. Простая кинетика. Новосибирск: Наука и жизнь, 1982.
13. Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика: Научное издание. Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2010.

Дополнительная

1. Губайдуллин И.М., Сайфуллина Л.В., Еникеев М.Р. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики. Уфа: РИО БашГУ, 2011, 110 с.
2. Брановицкая С.В., Медведев Р.Б., Фиалков Ю.Я. Вычислительная математика в химии и химической технологии. К.: Вища шк. Головное изд-во, 1986, 216 с.

3. Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф., Зайнуллин Р.З., Дубинец О.В. Физико-химические основы моделирования химических реакторов: термодинамика и кинетика: учебное пособие. Уфа: Изд-во УГНТУ, 2020.
4. Еникеева Л.В., Губайдуллин И.М., Еникеев М.Р. Кинетика низкотемпературной паровой конверсии углеводородов и реакции гибели нитрозооксидов: учебное пособие. Уфа: Изд-во УГНТУ, 2020.
5. Коледин С.Н., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Кинетическая модель каталитической реакции диметилкарбоната со спиртами и ее многоцелевая оптимизация: учебное пособие. Уфа: Изд-во УГНТУ, 2021.

2. Методы искусственного интеллекта и принципы создания экспертных систем

Экспертные системы и представление знаний. Подходы к построению систем искусственного интеллекта. Определение экспертной системы. Классификация экспертных систем. Структура экспертной системы. Технология разработки экспертной системы. Экспертные системы на основе нечетких знаний.

Основные концепции нейронных сетей. Биологический нейрон и его свойства. Модель искусственного нейрона. Параметры нейрона. Характеристика функций активации. Архитектуры искусственных нейронных сетей (ИНС). Сбор данных для нейронной сети.

Генетические алгоритмы, назначение и особенности. Генетические алгоритмы, назначение и особенности. Обучение нечетких нейронных сетей на основе генетических алгоритмов. Применение генетических алгоритмов в системах искусственного интеллекта, оптимизации решения обратных задач химической кинетики.

Методы решения задач многоцелевой оптимизации. Априорные алгоритмы. Алгоритмы зондирования. Генетический алгоритм с векторной оценкой. Генетический алгоритм многокритериальной оптимизации. Генетический алгоритм недоминируемой сортировки.

Рекомендованная литература

Основная

1. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. Горячая Линия, Телеком, 2007.
2. Саймон Хайкин. Нейронные сети. Полный курс, Издательство: Вильямс, 2006.
3. Гладков Л.А. Генетические алгоритмы. Гриф УМО ВУЗов России, Физматлит, 2006.
4. Барский А.Б. Логические нейронные сети. М.: Интернет-ун-т инф. технол-й, Бином. Лаборатория знаний, 2007, 352 с.
5. Дьяконов В.П. MATLAB 6.5 SP1/7/7SP1/7SP2 + Simulink 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики. М.: СОЛОН-Пресс, 2006, 456 с.
6. Гархов Д.А. Нейронные сети как средство математического моделирования. М.: Радиотехника, 2006, 48 с.
7. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс: пер. с англ., 2-е изд., испр. М.: Вильямс, 2006, 1104 с.
8. Яхъяева Г.А. Нечеткие множества и нейронные сети, 2-е изд., испр. М.: Интернет-ун-т инф. технол-й, Бином. Лаборатория знаний, 2010, 320 с.
9. Гаврилова Т.А. Базы знаний интеллектуальных систем. Учебник. СПб.: ПИТЕР, 2000.

10. Кофман А. Введение в теорию нечетких множеств: Пер. с франц. М.: Радио и связь, 1982, 432 с.

Дополнительная

1. Стюарт Рассел, Питер Норвиг, Искусственный интеллект. Современный подход, Вильямс, 2007.
2. Усков А.А., Кузьмин А.В. Интеллектуальные технологии управления. Искусственные нейронные сети и нечеткая логика, Горячая линия-Телеком, 2004.
3. Головкин В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. ИПРЖР, 2002.
4. Питер Джексон. Введение в экспертные системы. Издательство: Вильямс, 2001, 624 с.
5. Джордж Ф. Люгер. Искусственный интеллект: стратегии и методы решения сложных проблем. Издательство: Вильямс, 2005, 864 с.
6. Электронный учебник <http://www.neuroproject.ru/tutorial.php> (компания НейроПроект).
7. Электронный учебник <http://www.statsoft.ru/home/textbook/default.htm> (компания StatSoft Russia).
8. Шварева Е.Н., Еникеева Л.В., Губайдуллин И.М. Оптимизация роом частиц: учебное пособие. Уфа: Изд-во УГНТУ, 2021.