

ПРОГРАММА-МИНИМУМ  
кандидатского экзамена по специальности  
**05.13.18 «Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ»**  
по химическим, геолого-минералогическим  
и биологическим наукам

### Введение

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: информатика; вычислительная математика; компьютеры; методы кибернетики в химии и химической технологии; анализ и синтез химико-технологических систем; теория искусственного интеллекта и гибридные экспертные системы в химической технологии; математическое моделирование химико-технологических процессов; надежность и эффективность технологических систем.

Программа разработана экспертным советом Высшей аттестационной комиссии Министерства образования Российской Федерации по химии (по неорганической химии) при участии Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева.

### 1. Методы вычислительной математики

*Общие сведения из теории разностных схем.* Основные понятия и определения. Аппроксимация. Счетная устойчивость. Теорема сходимости. Конечно-разностные аналоги некоторых задач математической физики.

*Методы построения разностных схем для решения дифференциальных уравнений.* Вариационные методы в математической физике. Построение базисных функций для решения одномерных задач. Построение базисных функций для решения многомерных задач. Вариационно-разностные и проекционно-сеточные схемы. Построение схем для нестационарных задач проекционно-сеточным методом.

*Интерполяция сеточных функций.* Нестационарные итерационные методы. Метод расщепления. Итерационные методы для систем с вырожденными матрицами.

*Методы решения нестационарных задач.* Разностные схемы второго порядка аппроксимации с операторами, зависящими от времени. Неоднородные уравнения эволюционного типа. Методы расщепления нестационарных задач. Многокомпонентное расщепление задач. Методы решения уравнений гиперболического типа.

*Сопряженные уравнения и методы возмущения.* Основные и сопряженные уравнения. Алгоритмы возмущений. Метод теории возмущений для задач на собственные значения. Сопряженные уравнения и теория возмущений для линейных функционалов.

*Постановка и численные методы решения некоторых обратных задач.* Основные определения и примеры. Решение обратных эволюционных задач с постоянным оператором. Обратная эволюционная задача с оператором, зависящим от времени. Постановка обратных задач на основе методов теории возмущений.

### 2. Численные методы математического анализа

*Методы интерполяции и численного дифференцирования.* Постановка задачи приближения функций. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Оценка остаточного члена интерполяционного многочлена Лагранжа. Разделенные разности и их свойства. Интерполяционная формула Ньютона с разделенными разностями. Разделенные разности и интерполирование с кратными узлами. Уравнения в конечных разностях. Многочлены Чебышева. Минимизация оценки остаточного члена интерполяционной формулы. Конечные разности. Интерполяционные формулы для таблиц с постоянным шагом. Составление таблиц. О погрешности округления при интерполяции. Применения аппарата интерполирования. Обратная интерполяция. Численное дифференцирование. О вычислительной погрешности формул численного дифференцирования. Рациональная интерполяция.

*Методы и алгоритмы численного интегрирования.* Простейшие квадратурные формулы. Метод неопределенных коэффициентов. Оценка погрешности квадратуры. Квадратурные формулы Ньютона — Котеса. Ортогональные многочлены. Квадратурные формулы Гаусса. Практическая оценка погрешности элементарных квадратурных формул. Интегрирование быстро осциллирующих функций. Повышение точности интегрирования за счет разбиения отрезка на равные части. О постановках задач оптимизации. Постановка задачи оптимизации квадратур. Оптимизация распределения узлов квадратурной формулы. Примеры оптимизации распределения узлов. Главный член погрешности. Правило Рунге практической оценки погрешности. Уточнение результата интерполяцией более высокого порядка. Вычисление интегралов в нерегулярном случае. Принципы построения стандартных программ с автоматическим выбором шага.

*Методы приближения функций.* Наилучшие приближения в линейном нормированном пространстве. Наилучшее приближение в гильбертовом пространстве и вопросы, возникающие при его практическом построении. Тригонометрическая интерполяция. Дискретное преобразование Фурье. Быстрое

преобразование Фурье. Наилучшее равномерное приближение. Примеры наилучшего равномерного приближения. Итерационный метод построения многочлена наилучшего равномерного приближения. Интерполяция и приближение сплайнами. Энтропия и  $\epsilon$ -энтропия.

*Многомерные задачи.* Метод неопределенных коэффициентов. Метод наименьших квадратов и регуляризация. Примеры регуляризации. Сведение многомерных задач к одномерным. Интерполяция функций в треугольнике. Оценка погрешности численного интегрирования на равномерной сетке. Оценка снизу погрешности численного интегрирования. Метод Монте-Карло. Обсуждение правомерности использования недетерминированных методов решения задач. Ускорение сходимости метода Монте-Карло.

*Численные методы алгебры.* Методы последовательного исключения неизвестных. Метод отражений. Метод простой итерации. Особенности реализации метода простой итерации на ЭВМ.  $b^2$ -процесс практической оценки погрешности и ускорения сходимости. Оптимизация скорости сходимости итерационных процессов. Метод Зейделя. Метод наискорейшего градиентного спуска. Метод сопряженных градиентов. Итерационные методы с использованием спектрально-эквивалентных операторов. Погрешность приближенного решения системы уравнений и обусловленность матриц. Регуляризация. Проблема собственных значений. Решение полной проблемы собственных значений при помощи QR-алгоритма.

*Решение систем нелинейных уравнений и задач оптимизации.* Метод простой итерации и смежные вопросы. Метод Ньютона решения нелинейных уравнений. Методы спуска. Другие методы сведения многомерных задач к задачам меньшей размерности. Решение стационарных задач путем установления.

*Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.* Решение задачи Коши с помощью формулы Тейлора. Методы Рунге — Кутты. Методы с контролем погрешности на шаге. Оценки погрешности одношаговых методов. Конечно-разностные методы. Метод неопределенных коэффициентов. Исследование свойств конечно-разностных методов на модельных задачах. Оценка погрешности конечно-разностных методов. Особенности интегрирования систем уравнений. Методы численного интегрирования уравнений второго порядка.

*Численные методы решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.* Простейшие методы решения краевой задачи для уравнения второго порядка. Функция Грина сеточной краевой задачи. Решение простейшей краевой сеточной задачи. Замыкания вычислительных алгоритмов. Обсуждение постановок краевых задач для линейных систем первого порядка. Алгоритмы решения краевых задач для систем уравнений первого порядка. Нелинейные краевые задачи. Аппроксимации специального типа. Конечно-разностные методы отыскания собственных значений. Оптимизация распределения узлов интегрирования. Построение численных методов с помощью вариационных принципов. Улучшение сходимости вариационных методов в нерегулярном случае. Влияние вычислительной погрешности в зависимости от формы записи конечно-разностного уравнения.

*Методы решения уравнения в частных производных.* Основные понятия теории метода сеток. Аппроксимация простейших гиперболических задач. Принцип замороженных коэффициентов. Численное решение нелинейных задач с разрывными решениями. Разностные схемы для одномерного параболического уравнения. Разностная аппроксимация эллиптических уравнений. Решение параболических уравнений с несколькими пространственными переменными. Методы решения сеточных эллиптических уравнений.

*Численные методы решения интегральных уравнений.* Решение интегральных уравнений методом замены интеграла квадратурной суммой. Решение интегральных уравнений с помощью замены ядра на вырожденное. Интегральное уравнение Фредгольма первого рода.

### **3. Методы линейного программирования**

*Основы теории линейных неравенств.*

*Математическая постановка задач линейного программирования.*

*Симплекс метод для решения задач линейного программирования.* Симплекс метод. Симплекс метод в табличной форме. Модифицированный симплекс метод. Двойственный симплекс метод.

*Длина записи и теоретическая сложность линейных неравенств и линейного программирования.*

*Двойственный метод, метод исключений и релаксационный метод.* Прямо двойственный метод. Метод исключений Фурье—Моцкина. Релаксационный метод.

*Дополнительные результаты о полиномиальной разрешимости в линейном программировании.* Полиномиальный алгоритм линейного программирования, разработанный Кармаркаром. Сильно полиномиальные алгоритмы. Линейный при фиксированной размерности алгоритм Мегиддо. Мелкие отсечения и округления политопов.

### **4. Методы и алгоритмы нелинейного программирования**

*Методы безусловной оптимизации.* Линейный поиск без использования производных. Линейный поиск с использованием производной. Замкнутость алгоритмических отображений линейного поиска. Многомерный поиск без использования производных. Многомерный поиск, использующий. Методы, использующие сопряженные направления.

*Методы штрафных и барьерных функций.* Понятие штрафной функции. Метод штрафных функций. Метод барьеров.

*Методы возможных направлений.* Метод Зойтендейка. Анализ сходимости метода Зойтендейка. Метод проекции градиента Розена. Метод приведенного градиента Вулфа. Выпуклый симплексный метод Зангвилла.

*Линейная дополнительность. Квадратичное, сепарабельное дробно-линейное программирование.* Линейная задача дополнительности. Квадратичное программирование. Сепарабельное программирование. Дробно-линейное программирование.

## **5. Элементы теории вероятностей и математической статистики**

*Основные понятия теории вероятностей.* Событие. Вероятность события. Непосредственный подсчет вероятностей. Частота или статистическая вероятность события. Случайная величина. Практически невозможные и практически достоверные события. Принцип практической уверенности.

*Основные теоремы теории вероятностей.* Назначение основных теорем. Сумма и произведение событий. Теорема сложения вероятностей. Теорема умножения вероятностей. Формула полной вероятности. Теорема гипотез (формула Байеса).

*Повторение опытов.* Частная теорема о повторении опытов. Общая теорема о повторении опытов.

*Случайные величины и их законы распределения.* Ряд распределения. Многоугольник распределения. Функция распределения. Вероятность попадания случайной величины на заданный участок. Плотность распределения. Числовые характеристики случайных величин. Их роль и назначение. Характеристики положения (математическое ожидание, мода, медиана). Моменты. Дисперсия. Среднее квадратическое отклонение. Закон равномерной плотности. Закон Пуассона.

*Нормальный закон распределения.* Нормальный закон и его параметры. Моменты нормального распределения. Вероятность попадания случайной величины, подчиненной нормальному закону, на заданный участок. Нормальная функция распределения. Вероятное (срединное) отклонение.

*Определение законов распределения случайных величин на основе опытных данных.* Основные задачи математической статистики. Простая статистическая совокупность. Статистическая функция распределения. Статистический ряд. Гистограмма. Числовые характеристики статистического распределения. Выравнивание статистических рядов. Критерии согласия.

*Предельные теоремы теории вероятностей.* Закон больших чисел и центральная предельная теорема. Неравенство Чебышева. Закон больших чисел (теорема Чебышева). Обобщенная теорема Чебышева. Теорема Маркова. Следствие закона больших чисел: теоремы Бернулли и Пуассона. Массовые случайные явления и центральная предельная теорема. Характеристические функции. Центральная предельная теорема для одинаково распределенных слагаемых. Формулы, выражающие центральную предельную теорему и встречающиеся при ее практическом применении.

*Обработка опытов.* Особенности обработки ограниченного числа опытов. Оценки для неизвестных параметров закона распределения. Оценки для математического ожидания и дисперсии. Доверительный интервал. Доверительная вероятность. Точные методы построения доверительных интервалов для параметров случайной величины, распределенной по нормальному закону. Оценка вероятности по частоте. Оценки для числовых характеристик системы случайных величин. Обработка стрельб. Сглаживание экспериментальных зависимостей по методу наименьших квадратов.

## **6. Общая характеристика применения информационных технологий и стандартных комплексов программ для решения задач математического моделирования**

*Назначение и характеристика информационных CASE-технологий.*

*Назначение и характеристика информационных CAPE-технологий.*

*Назначение и характеристика информационных CALS-технологий.*

*Состояние и перспективы применения INTERNET для решения задач математического моделирования.*

*Объектно-ориентированные языки программирования и средства визуального программирования как инструменты создания комплексов программ математического моделирования.*

## **7. Теоретические основы математического моделирования химико-технологических процессов**

*Математическое моделирование сложных химических реакций.* Проверка гипотез о механизме реакции и оценке кинетических констант. Уточнение кинетических параметров и дискриминация кинетических гипотез.

*Математические модели изотермических реакторов.* Модели трубчатых реакторов (реакторов идеального вытеснения) и реакторов периодического действия. Модели проточных реакторов с мешалкой (реактора

идеального смешения). Модели трубчатых проточных реакторов с учетом смешения (реактора диффузионного типа).

**Математические модели неизотермических реакторов.** Псевдогомогенные модели. Двухфазные модели. Анализ устойчивости типовых режимов реакторов. Определение оптимального температурного профиля политропического реактора. Модели автотермических реакторов.

**Математические модели гетерогенных каталитических реакторов.** Обоснование вида уравнений кинетики простых реакций. Методика экспериментальной проверки адекватности кинетических уравнений простых реакций.

**Экспериментально-статистические методы разработки математических моделей физико-химических процессов.** Методы регрессионного и корреляционного анализа. Методы планирования оптимальных экспериментов: полный факторный эксперимент; дробные реплики; ортогональные планы второго порядка; ротатабельные планы второго порядка; симплексный метод планирования экспериментов.

**Методы проверки адекватных математических моделей.** Построение и анализ таблиц, гистограмм и функций распределения. Метод моментов. Метод наименьших квадратов.

**Математические модели типовых химико-технологических процессов.** Математические модели типовых структур потоков: модели идеального вытеснения; модели идеального смешения; однопараметрические и двухпараметрические диффузионные модели; ячеечная модель; комбинированная модель. Математические модели типовых процессов теплопереноса: уравнения конвективного переноса Фурье—Кирхгофа; уравнение теплопроводности Фурье; уравнение Ньютона; модель идеального вытеснения; модель идеального смешения; ячеечная и диффузионная модели. Математические модели теплообменных аппаратов (труба в трубе). Математические модели типовых процессов массопереноса: уравнения Фика для молекулярного и конвективного переноса; уравнение Ньютона. Математические модели процессов разделения бинарных и многокомпонентных смесей в ректификационных колоннах. Методы анализа подобия молекул на основе теории графов.

## **8. Методы математического моделирования, алгоритмы анализа и синтеза химико-технологических систем**

**Принципы математического моделирования и анализа химико-технологических систем (ХТС).**

Операторно-символическая математическая модель ХТС. Прямые методы идентификации статических режимов ХТС. Математическое моделирование – основной метод решения задач проектирования и эксплуатации ХТС. Постановка и принципы решения задач анализа ХТС. Характеристика блочного принципа анализа ХТС. Общий вид системы уравнений материально-тепловых балансов ХТС. Подготовка исходных данных для составления систем уравнений материально-тепловых балансов. Признаки существования решения систем уравнений материально-тепловых балансов. Определение степени свободы ХТС. Рекомендации по выбору регламентированных и оптимизирующих информационных переменных ХТС.

**Принципы построения топологических моделей ХТС.** Классификация и назначение топологических моделей ХТС. Основы теории графов. Матричное представление графов. Поточковые графы ХТС. Параметрические поточковые графы. Материальные поточковые графы. Тепловые поточковые графы. Эксергетические поточковые графы. Циклические поточковые графы. Информационно-поточковые графы ХТС. Двудольные информационные графы. Информационные графы. Сигнальные графы ХТС. Структурные графы ХТС.

**Декомпозиционно-топологические методы анализа и оптимизации сложных ХТС.** Общая характеристика численных методов анализа ХТС. Численные методы и алгоритмы решения систем нелинейных уравнений: метод простой итерации и его модификации; метод Ньютона; квазиньютоновские методы; метод минимизации; метод дифференцирования по параметру. Методы решения систем линейных уравнений: общая характеристика численных методов решения систем линейных алгебраических уравнений; прямые итерационные методы. Эффективность различных численных методов решения систем алгебраических уравнений ХТС. Математическая постановка задачи и классификация методов оптимизации ХТС. Двухуровневые методы оптимизации сложных ХТС: общая стратегия двухуровневых методов; метод закрепления промежуточных переменных; метод цен; общая характеристика специальных программ цифрового моделирования ХТС.

## **9. Методы искусственного интеллекта и принципы создания экспертных систем**

**Искусственный интеллект – научная основа создания экспертных систем.** Современные направления научных исследований в области искусственного интеллекта. Неформализованные задачи научно-технической деятельности и классификация моделей представления знаний. Неформализованные задачи в химии. Неформализованные задачи при проектировании химико-технологических систем. Неформализованные задачи при эксплуатации химико-технологических систем. Эвристическое программирование и автоматизированное обучение.

**Общая характеристика моделей представления знаний и процедур поиска решений неформализованных задач.**

Логические и логико-лингвистические модели представления знаний. Сетевые структурно-лингвистические модели представления знаний. Общая характеристика фреймов и продукционных правил. Взаимосвязь между моделями представления знаний и моделями данных. Методика и процедуры поиска решений неформализованных задач. Общие сведения о моделях естественного языка. Понятие нейронных сетей и их применение в химической технологии.

**Модели представления нечетких знаний и недетерминированные процедуры вывода решений.** Понятие нечетких знаний в химии и химической технологии. Методы неточных рассуждений с ненадежными данными. Общие сведения о нечеткой и вероятностной логиках. Основные понятия теории нечетких множеств. Модели представления знаний на основе теории нечетких множеств.

**Структурно-лингвистические модели представления знаний и процедура вывода решений.** Классификация и принципы разработки фреймов. Основные особенности фреймов и процедуры вывода. Принципы построения различных классов семантических сетей. Процедуры вывода решений с применением семантических сетей.

**Логические модели представления знаний и процедуры логического вывода.** Модели представления знаний на основе исчисления предикатов. Процедуры формального вывода в дедуктивных системах. Процедуры логического вывода на основе принципа резолюции. Программная реализация исчисления предикатов.

**Продукционные системы и операции управления выводом решений.** Основные понятия продукционных систем как формальных систем представления знаний. Функциональная структура продукционных систем как систем программирования. Стратегии вывода решений в продукционных системах. Операции упорядоченного ограниченного поиска решений.

**Архитектура экспертных систем и языки интеллектуального программирования.** Основные свойства экспертных систем. Архитектура экспертных систем. Режимы функционирования и классификация экспертных систем. Основные этапы разработки экспертных систем.

**Языки программирования искусственного интеллекта – инструментальные средства разработки экспертных систем.** Основные понятия и классификация языково-программных инструментальных средств. Общая характеристика языков функционального программирования. Основные сведения о языках логического программирования. Понятие объектно-ориентированного программирования. Характеристика языков объектно-ориентированного программирования.

**Общая характеристика языков представления знаний.** Фреймовые языки представления знаний. Языки продукционно-ориентированного программирования. Понятие о языке грамматико-семантической обработки текстов.

**Характеристика основных типов экспертных систем в химической технологии.** Экспертные системы автоматизированного синтеза оптимальных химико-технологических систем. Консультирующие экспертные системы в химической технологии. Экспертные системы автоматического управления и диагностики химико-технологических процессов. Экспертные системы в химии. Интеллектуальные автоматизированные системы ситуационного управления магистральным транспортом газа. Семантико-математическая модель понимания смысла технологических текстов для экспертных систем.

**Принципы создания гибридной экспертной системы синтеза газодиффузионных систем.** Постановка неформализованной задачи синтеза газодиффузионных систем. Продукционно-фреймовые модели представления знаний для автоматизированного синтеза газодиффузионных систем. Декомпозиционная эвристическо-продукционная процедура синтеза газодиффузионных систем. Продукционно-вычислительный алгоритм генерации оптимальной последовательности выделения целевых продуктов.

**Разработка и применение инструментальной гибридной экспертной системы «Экран—ХТС».** Назначение, возможности и режимы функционирования. Архитектура и операции функционирования. Интеллектуальный диалог пользователя с экспертной системой.

## Основная литература

Марчук Г.И. Методы вычислительной математики: Учеб. пособие. М.: Наука, 1989.

Рябенский В.С. Введение в вычислительную математику. М.: Наука, 1994.

Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. Учеб. пособие. М.: Наука, 1987.

Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 1998.

Ашманов С.А., Тимохов А.В. Теория оптимизации в задачах и упражнениях. М.: Наука, 1991.

Схрейвер А. Теория линейного и целочисленного программирования. В 2-х тт. Пер. с англ. М.: Мир, 1991.

Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. Пер. с англ. М.: Мир, 1982.

Мешалкин В.П. Экспертные системы в химической технологии. Основы теории, опыт разработки и применения. М.: Химия, 1995.

Кафаров В.В., Мешалкин В.П. Анализ и синтез химико-технологических систем. М.: Химия, 1991.

Вентцель Е.С. Теория вероятностей. Учеб. для вузов. 6-е изд. стер. М.: Высшая школа, 1999.