

Вопросы к государственному экзамену
Магистерская программа
«Многомасштабное моделирование и методы анализа данных в естественнонаучных исследованиях»

1. Обобщенное решение задачи Дирихле для уравнения второго порядка эллиптического типа.
2. Вариационная постановка задачи на собственные значения симметричного положительного операторного уравнения.
3. Метод конечных элементов для обыкновенного дифференциального уравнения.
4. Метод конечных элементов для задачи об изгибе упругого бруса.
5. Матрица жесткости и матрица массы линейного конечного элемента.
6. Теорема о сходимости метода конечных элементов на линейных треугольниках в случае уравнения Пуассона.
7. Групповой анализ обыкновенных дифференциальных уравнений первого и второго порядка.
8. Групповой анализ для уравнения теплопроводности.
9. Уравнение Бюргерса и его линеаризация.
10. Методы организации параллельных вычислений при суперкомпьютерном решении сеточных задач.
11. Использование суперкомпьютеров для решения задач молекулярного моделирования.
12. Методы эффективной организации параллельных вычислений на графических процессорах
13. Многомасштабные процессы и явления. Области применения многомасштабного моделирования.
14. Теоретико-множественные основы построения многомасштабных моделей. Общая схема. Основные понятия и определения.
15. Основные положения компьютерной реализации технологии многомасштабного моделирования. Декомпозиция изучаемого объекта (явления). Построение многомасштабной композиции.
16. Постановка прямых и обратных задач математического моделирования. Методы решения.
17. Иерархия масштабов твердотельных расчетов. Масштабные уровни: микроскопический (атомно-кристаллический, наноразмерный), мезоуровень, макроскопический.
18. Модель ионно-атомных радиусов. Квантово-механическая модель твердого тела.
19. Классическое молекулярно-динамическое моделирование. Численные алгоритмы решения задачи МД-моделирования.
20. Классификация потенциалов межатомного взаимодействия по типу химической связи моделируемого материала или процесса. Примеры потенциалов. Конструирование «гибких потенциалов».
21. Постановка задачи и методы параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия
22. Примеры описания термодинамического состояния системы. Ансамбли. Эргодическая гипотеза. Методы Монте-Карло
23. Дискретно-элементное моделирование.
24. Пакеты прикладных программ для многомасштабного моделирования
25. Сглаживающая полиномиальная аппроксимация.
26. Проблема обусловленности аппроксимационных моделей.
27. Методы регуляризации. L_1 и L_2 регуляризация.
28. Сингулярное разложение матриц. Применение для сжатия данных.
29. Регуляризация с использованием сингулярного разложения.
30. Сглаживающие сплайны.
31. Робастная аппроксимация. Робастные сглаживающие сплайны.
32. Спектральный анализ данных. Спектральные диаграммы и спектрограммы.
33. Вейвлеты и кратномасштабный анализ данных.
34. Нелинейные аппроксимационные модели. Применение методов оптимизации для параметрической идентификации моделей.
35. Вероятностные методы представления и анализа данных. Метод максимального правдоподобия. Точечное и интервальное оценивание параметров распределения.

Список рекомендованной литературы

1. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. М.Наука, 1970.
2. Андреев В.Б. Лекции по методу конечных элементов. М.МАКС Пресс, 2015.
3. Ибрагимов Н.Х. Практический курс дифференциальных уравнений и математического моделирования. М. Физматлит, 2012.
4. Сетуха А.В. Численные методы в интегральных уравнениях и их приложения. М.АРГАМАК-МЕДИА, 2014.
5. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления - СПб. БХВ-Петербург, 2002.
6. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Издательство Московского университета, 2013.
7. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.
8. Lesard R. Introduction to Computational Materials Science. FundamentalstoApplications//CambridgeUniversityPress. 2013. С.414.
9. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц//М: Мир.1987.
10. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц. – Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2006. – 156 с.
11. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - Наука, 1988.
12. В.Н. Вапник. Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. - Наука, 1979.
13. Джеймс Г., Уиттон Д., Хастис Т., Тибширани Р. Введение в статистическое обучение с примерами на языке R. - ДМК Пресс, 2018.
14. Я. Гудфеллоу, И. Бенджио, А. Курвилль. Глубокое обучение. - ДМК Пресс, 2018.
15. К Блаттер. Вейвлет-анализ. Основы теории. - М. Техносфера, 2006.
16. Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.

Специальная часть

1. Модель распределенной обработки данных Map-Reduce: численная агрегация данных. Пример на HadoopMapReduce или Apache Spark.
2. Модель распределенной обработки данных Map-Reduce: соединение наборов данных. Пример на HadoopMapReduce или Apache Spark.
3. Фильтр Блума для распределенной обработки данных. Принцип работы, основные параметры, сценарии использования.
4. Сравнение реляционного и нереляционного подходов к работе с данными. CAP-теорема. Примеры применения CAP-теоремы.
5. Типы NoSQL баз данных. Сценарии использования и области применения.
6. Репликация и шардинг в NoSQL базах данных. Принципы работы, сценарии использования, пример.
7. Графовые базы данных. Основные понятия, свойства и области применения.
8. Основные свойства и области применения баз данных для полнотекстового поиска.
9. Интервальные числа. Гистограммная арифметика.
10. Интервальные расширения. Интервальные расширения полиномов многих переменных.
11. Интервальные интерполяционные полиномы. Интервальные сплайны.

Список рекомендованной литературы:

1. Donald Miner, Adam Shook. «Map Reduce Design Patterns», O'Reilly, 2012. Примеры из книги: <https://github.com/adamjshook/mapreducepatterns>
2. Jacek Laskowski «Mastering Apache Spark 2». <https://jaceklaskowski.gitbooks.io/mastering-apache-spark/content/>
3. Мартин Фаулер, Прамодкумар Дж. Садаладж "NoSQL. Новая методология разработки нереляционных баз данных", Вильямс, М., 2013.
4. Eben Hewitt "Cassandra: The Definitive Guide", O'Reilly, 2011
5. Kyle Banker и др. "MongoDB in Action", второе издание, Manning Publications, NY, 2016
6. Rik Van Bruggen "Learning Neo4j", Packt Publishing, 2014
7. Radu Gheorghe и др. "ElasticSearch in Action", Manning Publications, NY, 2016
8. Добронев Б. С. Интервальная математика: Учеб. пособие /«СФУ», — Красноярск, 2007. —287 с.
9. Шарый С.П. Конечномерный интервальный анализ. – Новосибирск: Ин-т выч. Тех. СО РАН, Издательство «XYZ», 2019. – 640 с.
10. Алефельд Г., Херцбергер Ю. Введение в интервальные вычисления. – Москва: Мир, 1987.