

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Вычислительные методы
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

1 (осенний) - Зачет
2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 120 всего, в том числе:

лекции: 60 час.
семинары: 0 час.
лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 225, всего зач. ед.: 5

Программу составил: А.В. Рогачев, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании Физтех-кластера академической и научной карьеры 30.04.2021

Аннотация

Курс представляет собой введение в основные вычислительные методы, используемые в современном физико-математическом моделировании. Первая часть курса посвящена введению в основные понятия и методы численной линейной алгебры. Вторая часть курса связана с методами решения интегральных и дифференциальных уравнений. В третьей части курса обсуждаются методы Монте-Карло в связи с задачами вероятностного моделирования.

В рамках курса прилагаются как теоретические, так и практические задачи, связанные как с использованием готовых программных пакетов на языке Python, так и с самостоятельной реализацией простейших версий необходимых для решения практических задач алгоритмов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Обучить основным методам численно-математического моделирования на практических примерах.

Задачи дисциплины

Изучение основ численной линейной алгебры и её приложений. Изучение методов оптимизации и решения интегральных и дифференциальных уравнений. Введение в метод Монте-Карло и его приложения. Знакомство со стандартными библиотеками языка Python.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.3 Способен предвидеть результаты (последствия) как личных, так и коллективных действий
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками,	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов
--	---

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

Основы численной линейной алгебры, методов решения дифференциальных и интегральных уравнений, а также методов Монте-Карло.

уметь:

Реализовывать простейшие версии основных алгоритмов для решения задач численного моделирования и использовать стандартные специализированные библиотеки.

владеть:

Вычислительными методами.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Векторные и матричные нормы. Унитарные матрицы. SVD разложение. Проекторы. Задача о наименьших квадратах. QR факторизация.	5		5	5
2	Вычисления с плавающей точкой. Вычислительная устойчивость.	4		4	4
3	Матричный ранг. Приближение низкого ранга и приложения SVD.	4		4	4
4	Системы линейных уравнений. Число обусловленности.	4		4	4
5	Собственные векторы и собственные значения. Методы решения симметричной задачи на собственные значения.	4		4	4
6	Разреженные матрицы. Библиотеки numru и scipy. Итеративные методы линейной алгебры.	4		4	4
7	Решение систем нелинейных уравнений. Введение в методы оптимизации.	5		5	5
8	Численное интегрирование и дифференцирование. Методы интерполяции. Решение интегральных уравнений.	6		6	9
9	Основные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.	6		6	9
10	Введение в методы Монте-Карло. Методы сэмплирования.	6		6	9

11	Марковские цепи Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса - Гастингса. Сэмплирование по Гиббсу. Гамильтонов Монте-Карло.	6		6	9
12	Модели пространства состояний. Линейные динамические системы. Фильтр Калмана.	6		6	9
Итого часов		60		60	75
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		225 час., 5 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Векторные и матричные нормы. Унитарные матрицы. SVD разложение. Проекторы. Задача о наименьших квадратах. QR факторизация.

Рассматриваются векторные и матричные нормы. Кратко упоминается об унитарных матрицах и проекторах. Приводится задача о SVD разложении и алгоритмах его реализующих. Задача о наименьших квадратах и QR факторизация

2. Вычисления с плавающей точкой. Вычислительная устойчивость.

Представление числа в экспоненциальной форме. Особенности вычисления с плавающей точкой. Понятие об устойчивости вычислительной схемы. Вычислительная устойчивость.

3. Матричный ранг. Приближение низкого ранга и приложения SVD.

Матричный ранг. Приближение низкого ранга. Применение SVD разложения в понижении размерности задачи и другие приложения SVD.

4. Системы линейных уравнений. Число обусловленности.

Методы решения систем линейных уравнений (СЛАУ). Основные алгоритмы решения СЛАУ и библиотеки их реализующие. Понятие числа обусловленности для алгоритма решения СЛАУ.

5. Собственные векторы и собственные значения. Методы решения симметричной задачи на собственные значения.

Численная задача поиска собственных векторов и собственных значений. Методы и алгоритмы решения симметричной задачи на собственные значения.

6. Разреженные матрицы. Библиотеки numpy и scipy. Итеративные методы линейной алгебры.

Понятие разреженной матрицы и алгоритмы работы с ними. Библиотеки numpy и scipy и их реализация итеративных методов линейной алгебры.

7. Решение систем нелинейных уравнений. Введение в методы оптимизации.

Основные методы решения систем нелинейных уравнений. Особенности реализации методов решения систем нелинейных уравнений. Введение в методы оптимизации. Основные алгоритмы численной оптимизации.

8. Численное интегрирование и дифференцирование. Методы интерполяции. Решение интегральных уравнений.

Численное интегрирование и дифференцирование. Точность метода численного дифференцирования и интегрирования. Основные реализации методов численного интегрирования и дифференцирования. Методы интерполяции. Решение линейных интегральных уравнений. Реализация методов решения интегральных уравнений.

9. Основные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.

Основные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Точность основных методов обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Библиотеки, реализующие основные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.

10. Введение в методы Монте-Карло. Методы сэмплирования.

Введение в методы Монте-Карло. Понятие псевдослучайности и генерация псевдослучайных чисел. Основные методы сэмплирования. Скорость работы и применимость основных методов сэмплирования.

11. Марковские цепи Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса - Гастингса. Сэмплирование по Гиббсу. Гамильтонов Монте-Карло.

Марковские цепи Монте-Карло. (МЦМК). Методы сэмплирования на основе МЦМК. Алгоритм Метрополиса — Гастингса. Сэмплирование по Гиббсу как частный случай алгоритма Метрополиса-Гастингса. Понятие гамильтонова Монте-Карло и его реализация.

12. Модели пространства состояний. Линейные динамические системы. Фильтр Калмана.

Модели пространства состояний. Основы анализа временных рядов. Линейные динамические системы как представление временного ряда. Баесовская сеть как линейная динамическая система. Фильтр Калмана. Дискретный фильтр Калмана и задача прогнозирования.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Аудитория с проектором.

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Вычислительные основы линейной алгебры [Текст] / В. В. Воеводин - М.Наука,1977

Дополнительная литература

1. Численные методы и программное обеспечение [Текст] = Numerical Methods and Software : / Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш ; пер. с англ. под ред. Х. Д. Икрамова .— [Научное изд.] .— М. : Мир, 1998 .— 575 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Система дистанционной связи "GoofleMeets"

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

Литература для самостоятельного изучения:

1. Numerical Linear Algebra, Lloyd N. Trefethen (Author), David Bau III (Author)
2. Eugene. E. Tyrtysnikov, "Brief introduction to numerical analysis"
3. А. А. Амосов, Ю. А. Дубинский, Н. В. Копченова, Вычислительные методы для инженеров
4. Monte Carlo Statistical Methods. Authors: C. Robert, G. Casella
5. Machine Learning: A Probabilistic Perspective, K. P. Murphy
6. Convex Optimization, Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe
7. E. Hairer, S.P. Norsett, and G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations, Springer, 1993.
8. Approximation Theory and Approximation Practice, Lloyd N. Trefethen
9. Gaussian Processes for Machine Learning, Carl Edward Rasmussen and Christopher K.I. Williams
10. Non-Uniform Random Variate Generation, Luc Devroye

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры (Разработка и применение программного обеспечения в физических исследованиях)
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестры, формы промежуточной аттестации:	
1 (осенний) - Зачет	
2 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	А.В. Рогачев, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.3 Способен предвидеть результаты (последствия) как личных, так и коллективных действий
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Вычислительные методы» обучающийся должен:

знать:

Основы численной линейной алгебры, методов решения дифференциальных и интегральных уравнений, а также методов Монте-Карло.

уметь:

Реализовывать простейшие версии основных алгоритмов для решения задач численного моделирования и использовать стандартные специализированные библиотеки.

владеть:

Вычислительными методами.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

1. Рассмотрим матрицу $H(v) = 1 - 2vv^*$

, где v - единичный вектор-столбец.

Каков ранг матрицы $H(v)$? Докажите, что это унитарная матрица.

2. Докажите следующие неравенства и приведите примеры x и A , когда

они превращаются в равенства:

- $\|x\|_2 \leq \sqrt{m} \|x\|_\infty$
- $\|Ax\|_\infty \leq \sqrt{n} \|A\|_2$

где x - вектор из m компонентов, а A - матрица размера $m \times n$.

3. В предположении u, v и m -векторов рассмотрим матрицу $A = I + uv^*$

что является возмущением тождества первого ранга. Может это быть единичным? Предполагая это не так, вычислите обратное. Вы можете искать его в виде $A^{-1} = I + \alpha uv^*$

для некоторого скаляра α и вычислить α .

4. Докажите, что для любой унитарной матрицы U $\|UA\|_F = \|A\|_F = \|AU\|_F$.

.

5. Рассмотрим двумерное векторное пространство $r = (x, y)$ и построим единичный круг $\|x\|_p \leq 1$ для $p = 1, 2, 3$ (используйте библиотеку `matplotlib`).

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Основные принципы Гамильтонового Монте-Карло.
2. Описать основные принципы SVD-разложения.
3. Рассмотрим матрицу, где e_i - единичный вектор-столбец. Каков ранг матрицы? Докажите, что это унитарная матрица
4. Докажите следующие неравенства и приведите примеры, когда они превращаются в равенства.
Докажите, что для любой унитарной матрицы выполняется.
5. Рассмотрим двумерное векторное пространство и построим единичный круг.

Билет 1.

1. В этом упражнении предполагается, что вы будете использовать векторизованные операции NumPy.

насколько это возможно.

- Сгенерируйте случайную матрицу:

$n = 100$

$A = \text{np.random.randn}(n, n)$

- Постройте функцию распределения углов $\angle(a_i, a_j)$, где a_i -

столбцы матрицы A и $i \neq j$. Как рассчитывается стандартное отклонение этого распределения затухает с n (проверьте это эмпирически)?

- Построить матрицу A

с векторами-столбцами, полученными путем нормализации столбцов A .

2. Реализуйте функцию `sum_array(A)`, которая принимает двумерный массив `numpy`.

A в качестве входных данных и возвращает сумму элементов массива. Подумайте о том, чтобы сделать

это тремя способами: (i) явный цикл по массиву, (ii) выполнение `jit`

версия (i) и (iii) с использованием встроенных функций NumPy. Время эти

три подхода для достаточно больших массивов.

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен и зачет проводятся в письменной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении зачёта и экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.