

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФГАОУ ВПО "Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики

**Программа дисциплины**

Современные методы математической обработки эксперимента

Направление подготовки

Физика

Профиль подготовки

Физика атомов и молекул

Квалификация выпускника

магистр

Казань

2013

## **1. Цели освоения дисциплины**

Целями освоения дисциплины (модуля) "Современные методы математической обработки эксперимента" являются

- дать основы математической обработки экспериментальных данных;
- сообщить сведения о современных методах математической обработки экспериментальных данных;
- обучить навыкам самостоятельной работы с учебной и научной литературой;
- привить способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности Интернет;
- обучить навыкам практического применения методов математической обработки экспериментальных данных.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры**

Дисциплина "Современные методы математической обработки эксперимента" неразрывно связана с многими разделами математики, физики и с компьютерными науками. Для освоения курса необходимо знание материала следующих дисциплин: "Математический анализ", "Физика", "Дискретная математика", "Алгоритмические языки программирования", "Теория вероятностей и математическая статистика".

Знания, полученные в результате освоения дисциплины, могут быть использованы при выполнении научно-исследовательской практики, написании магистерской диссертации, проведении научных исследований, связанных с экспериментальной физикой.

## **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)**

Знать:

- современные методы спектроскопии;
- методы решения обратных некорректных задач;
- некоторые современные методы обработки эксперимента.

Уметь:

- моделировать сигналы на компьютере;
- проводить расчет прямого и обратного дискретного преобразования Фурье;
- проводить анализ модельных сигналов с применением непрерывного вейвлет-преобразования;
- выполнять процедуру удаления шума с использованием дискретного вейвлет-анализа;
- разделять сложные экспериментальные спектральные контуры на составляющие.

Владеть:

- терминологией, используемой в изучаемой дисциплине;
- способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований.

В результате освоения дисциплины формируются компетенции:

ОК-1 - способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук;

ОК-3 - способность приобретать новые знания, используя современные

образовательные и информационные технологии;

ОК-6 - способность добиваться намеченной цели;

ОК-16 - способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности навыки работы с информацией из различных источников;

ПК-1 - способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач;

ПК-2 - способность применять на практике базовые профессиональные навыки;

ПК-6 - способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки).

#### 4. Структура и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных единиц 72 часа.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением следующих разделов:

N	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
1	Представление экспериментальных спектров. Понятие о математической обработке экспериментальных спектров	9	1, 2	лекции (4) самостоятельная работа (6)	экзамен
2	Обратные некорректные задачи в прикладной спектроскопии	9	3, 4	лекции(2) самостоятельная работа (6)	экзамен
3	Классические методы обработки экспериментальных данных	9	5, 6	лекции (2) самостоятельная работа (4) практические занятия (4)	экзамен
4	Удаление экспериментального шума из спектроскопических данных	9	7, 8	лекции(2) самостоятельная работа (4) практические занятия (4)	экзамен
5	Применение непрерывного и дискретного вейвлет-преобразования в прикладной спектроскопии. Вейвлет-производная спектрометрия для разложения сложных контуров полос поглощения	9	9, 10, 11	лекции (2) самостоятельная работа (6) практические занятия (4)	экзамен
6	Нейросетевая производная спектрометрия в разделении	9	12, 13, 14	лекции (2) самостоятельная	экзамен

	сложных сигналов на элементарные составляющие			работа (4) практические занятия (4)	
7	Эволюционные алгоритмы в прикладной ИК-спектроскопии	9	15, 16	лекции (2) самостоятельная работа (6)	экзамен
9	Факторный анализ ИК-спектров в изучении межмолекулярных взаимодействий	9	17, 18	самостоятельная работа (4)	экзамен

### 5. Образовательные технологии

При обучении используются следующие формы учебной работы: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента.

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Средствами контроля успеваемости являются контрольные вопросы, рефераты, доклады по различным разделам дисциплины.

Вопросы:

- Преобразование Фурье, дискретное преобразование Фурье, быстрое преобразование Фурье.
- Методы решения обратных некорректных задач. Основное интегральное уравнение. Восстановление сигнала как обратная задача.
- Некоторые подходы для повышения устойчивости обратных задач (минимаксные и байесовские стратегии).
- Понятие регуляризации.
- Сглаживание экспериментальных данных.
- Дифференцирование экспериментальных данных.
- Основные концепции искусственных нейронных сетей.
- Виды искусственных нейронных сетей.
- Способы обучения искусственных нейронных сетей
- Непрерывный вейвлет-анализ.
- Дискретный вейвлет-анализ.
- Базисные функции в вейвлет-анализе.
- Кратно-масштабный анализ.
- Вейвлет-производная спектрометрия.

Практика

- Задание моделей сигналов. Периодические и непериодические сигналы.
- Моделирование фрактального шума.
- Моделирование цветного шума.
- Моделирование сигнала и наложение на сигнал шума.
- Вычисление дискретного преобразования Фурье, фильтрация шума.
- Фильтр Кайзера.

- Анализ модельных сигналов с использованием непрерывного вейвлет-анализа.
- Вейвлет-денойзинг.
- Разделение близкорасположенных ИК-полос поглощения (метод указывается преподавателем)

Рефераты:

- Оптимальная линейная фильтрация.
- Метод квазиобращения.
- Метод Филлипса-Туоми.
- Нелинейные методы, метод максимума энтропии, включение нелинейных ограничений.
- Итерационные алгоритмы.
- Схема Ван-Циттерта.
- Проекционный алгоритм Танабы-Хуанга.
- Решение задачи Абеля для осесимметричной плазмы.
- Методы решения многомерных задач обработки измерительной информации. Статистические регуляризованные оценки для многомерных задач
- Сглаживание и интерполяция многомерных экспериментальных данных. Дифференцирование многомерных экспериментальных данных
- Двухмерное дискретное вейвлет-преобразование
- Нейронная сеть Элмана.

#### **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)**

- Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1974. – 286 с.
- Преображенский Н.Г. Неустойчивые задачи диагностики плазмы / Н.Г. Преображенский, В.В. Пикалов. –Новосибирск: Наука, 1982. – 236 с.
- Турчак Л.И. Основы численных методов / Л.И. Турчак. – М.: Наука, 1987. – 381 с.
- Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов / Г.И. Василенко. – М.: Советское радио, 1979. –272 с.
- Дубровкин И.М. Производная спектрометрия. Теория, техника, применение / И.М. Дубровкин, В.Г. Беликов. – Ростов: Изд-во Ростов. ун-та, 1989. – 144 с.
- Салахов М.Х. Математическая обработка и интерперетация спектроскопического эксперимента / М.Х.Салахов, С.С.Харинцев. – Казань, 2001. – 238 с.
- Камалова Д.И. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии / Д.И., Камалова, М.Х. Салахов. – Казань: Казан. гос. ун-т, 2009. – 168 с.
- Федер Е. Фракталы / Е.Федер. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
- Астафьева Н.М. Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения / Н.М. Астафьева // Успехи физических наук. –1998. – Т.166, №.11. – С.1145–1170.
- Воробьев В.И. Теория и практика вейвлет-преобразования / В.И. Воробьев, В.Г. Грибунин. –СПб.: Изд-во ВУС, 1999. – 203 с.
- Дремин И.М. Вейвлеты и их использование / И.М. Дремин, О.В. Иванов, В.А. Нечитайло / Успехи физических наук. –2001. – Т.171, N.5. –С.465–561.
- Дьяконов В.П. Вейвлеты. От теории к практике / В.П. Дьяконов. – М.:

- Солон, 2002. – 448 с.
- Петухов А.П. Введение в теорию базисов всплесков / А.П. Петухов. –СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. – 132 с.
  - Новиков И.Я. Основы теории всплесков / И.Я. Новиков, С.Б. Стечкин // Успехи математических наук. –1998. –Т.53, №6. –С.53–128.
  - И. Добеши Десять лекций по вейвлетам / перевод с английского Е.В. Мищенко – Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2001. – 464 с.
  - Новиков Л.В. Основы вейвлет-анализа сигналов. Учебное пособие. / Л.В. Новиков. –СПб.: Изд-во ООО "МОДУС+", 1999. – 152 с.
  - Новиков Л.В. Адаптивный вейвлет-анализ сигналов / Л.В. Новиков // Научное приборостроение. –1999. –Т.9, N.2. – С.8–21.
  - Витязев В.В. Вейвлет-анализ временных рядов: Учеб. пособие / В.В. Витязев. – Изд-во С.-Петербургского университета, 2001. – 57с.
  - Круглов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В.В. Круглов, В.В. Борисов. –М: Горячая линия-Телеком, 2002. – 382 с.
  - Заенцев В.В. Нейронные сети: основные модели / В.В. Заенцев. –Воронеж, 1999. –76 с.
  - Горбань А.Н. Нейронные сети на персональном компьютере / А.Н. Горбань, А.Д. Россиев. –Новосибирск: Наука, Сибирская издательская фирма РАН, 1996. – 276 с.

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Ноутбук

Мультимедийный проектор

Персональный компьютер

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с учетом рекомендаций ПрООП ВПО по направлению и профилю подготовки Физика атомов и молекул

Авторы курса:

Профессор Салахов М.Х.

Профессор Камалова Д.И.

Ассистент Сибгатуллин М.Э.

Программа одобрена на заседании Учебно-методического совета Института физики КФУ от \_\_\_\_ \_\_\_\_\_ 2013 года, протокол № \_\_\_\_.