Суррогатное моделирование и оптимизация в прикладных задачах

Программа курса, осенний семестр

1. Введение. Постановка задачи

Содержание курса, взаимосвязь с другими курсами. Постановка задачи аэродинамического проектирования. Примеры из практики.

2. Матрицы и действия над ними

Умножение матриц, умножение блочных матриц. Ранг, ранговая факторизация матриц. Ортогональные, симметричные и положительно определённые матрицы.

3. Теория систем линейных уравнений

Алгоритм Гаусса. LU-разложение матриц, разложение Холецкого. Псевдорешения и псевдообратные матрицы. Собственные подпространства, ядро и образ отображения, теорема Фредгольма.

4. Ортогональность

Скалярное произведение. Ортогональные векторы и ортогональные матрицы. Ортогональное проектирование, проекционные матрицы. Алгоритм ортогонализации Грама — Шмидта, QR-разложение матриц.

5. Линейная регрессия

Формулировка задачи. Метод наименьших квадратов. Алгоритмы решения задачи наименьших квадратов: разложение Холецкого, QR-разложение.

6. Спектральное разложение матриц

Собственные значения и собственные векторы. Диагонализируемые и недиагонализируемые матрицы. Спектральное разложение матриц, полярное разложение матриц. Методы поиска собственных чисел: прямые, итерационные. QR-алгоритм.

7. Сингулярное разложение матриц (SVD)

Сингулярные базисы, сингулярные числа. Сингулярное разложение, его свойства, формула для псевдообратной матрицы. Геометрический смысл SVD, полярное разложение.

8. Главные компоненты

Нормы векторов и матриц. Малоранговые аппроксимации матриц, теорема Эккарта — Янга. Метод главных компонент. Эффективная размерность. Аппроксимация изображений.

9. Проблема мультиколлинеарности

Число обусловленности матрицы, его геометрическая интерпретация. Проблема мультиколлинеарности, её интерпретация с помощью SVD. Методы решения: метод главных компонент, гребневая регрессия, лассо Тибширани.

10. Методы оптимизации

Решение задач условной и безусловной оптимизации. Градиентные методы (алгоритм Бройдена — Флетчера — Гольдфарба — Шанно, алгоритм SLSQP), безградиентные методы (симплекс-метод Нелдера — Мида, алгоритм COBYLA). Метод штрафных функций.

11. Примеры применения SVD

Алгоритм Eigenfaces. Расстояние Махаланобиса.