

Международная молодёжная конференция «Современные проблемы
прикладной математики и информатики»
International
Conference for Young Scientists «Modern Problems of Applied Mathematics
& Computer Science»



Contribution ID: 37

Type: oral presentations

Метод глобальной оптимизации на основе разложения тензорный поезд

Friday, August 29, 2014 12:20 PM (15 minutes)

Задача глобальной оптимизации возникает во многих научных сферах: вычислительная химия, разработка лекарств, определение параметров различных моделей для наибольшего соответствия экспериментальным данным и др.

Данный доклад посвящён методу оптимизации, разработанному на основе тензорного поезда (Tensor Train, TT) - малопараметрического представления многомерных массивов.

В отличие от многих методов глобальной оптимизации, например, генетических алгоритмов, рассматриваемый метод намного активнее использует структуру минимизируемого функционала и требует значительно меньшего числа вычислений его значений в точках.

Также оптимизация на основе TT обладает высокой степенью параллельности.

В качестве примеров применения использованы задача докинга (определение полной энергии связывания системы белок-лиганд) и задача определения параметров модели распространения ВИЧ-инфекции на уровне клеточных популяций.

Primary authors: Mr ZHELTKOV, Dmitry (Lomonosov Moscow State University); Prof. TYRTYSHNIKOV, Eugene (INM RAS)

Co-author: Ms AZIATTSEVA, Valerya (Lomonosov Moscow State University)

Presenter: Mr ZHELTKOV, Dmitry (Lomonosov Moscow State University)

Session Classification: Доклады молодых ученых