

ПЕРСПЕКТИВЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕНЗОРНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ  
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНОЙ ЭЛЕКТРОСТАТИКИ  
В МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ<sup>1)</sup>© 2021 г. В. Х. Хоромская<sup>1,\*</sup>, Б. Н. Хоромский<sup>1,2,\*\*</sup><sup>1</sup> D-04103 Leipzig, Inselstr. 22–26, Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, Germany<sup>2</sup> Magdeburg, Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems, Germany

\*e-mail: vekh@mis.mpg.de

\*\*e-mail: bokh@mis.mpg.de

Поступила в редакцию 24.12.2020 г.  
Переработанный вариант 24.12.2020 г.  
Принята к публикации 14.01.2021 г.

В настоящее время использование структурированных малоранговых тензорных методов привело к прогрессу в задачах численного исследования электростатических задач многочастичных систем с дальнедействующими взаимодействиями и соответствующими энергиями и силами. В данной статье предлагается обзор перспектив численного моделирования коллективного электростатического потенциала на решетках и в многочастичных системах общего типа с использованием тензорных разложений. Данный подход, исходно предложенный для структурированных по рангу сеточных вычислений потенциалов взаимодействия на трехмерных решетках, обобщается в этой работе для случая многочастичных систем с различными зарядами, расположенными на решетках в многомерных областях вида  $L^{\otimes d}$ , дискретизированных на мелких декартовых сетках вида  $n^{\otimes d}$  для произвольных значений размерности  $d$ . В результате потенциал взаимодействия представляется в параметрическом малоранговом каноническом формате со сложностью  $O(dLn)$ . Полная энергия взаимодействия далее может быть вычислена за  $O(dL)$  операций. Электростатика для больших биомолекулярных систем дискретизируется на мелкой сетке  $n^{\otimes 3}$  с использованием нового тензорного формата с разделением по диапазонам (RS) [3], который поддерживает дальнедействующую часть трехмерного коллективного потенциала многочастичной системы в параметрической малоранговой форме сложности порядка  $O(n)$ . Демонстрируется, что поле сил можно легко восстановить с использованием предварительно вычисленного электрического поля в малоранговом RS-формате. RS-представление дискретизированной дельты Дирака [4] позволяет построить эффективную консервативную по энергии схему регуляризации для решения трехмерных эллиптических уравнений в частных производных с сильно сингулярными правыми частями, возникающими при научных вычислениях. Основной вывод состоит в том, что методы аппроксимации на основе тензоров с ранговой структурой предоставляют многообещающие численные инструменты для приложений к динамике многих тел в бионауках, докингу белков и задачам классификации, для малопараметрической интерполяции разрозненных данных в науках о данных, а также в машинном обучении во многих измерениях. Библ. 76. Фиг. 9. Табл. 3.

**Ключевые слова:** потенциал Кулона, потенциал Слейтера, дальние многочастичные взаимодействия, малоранговые тензорные разложения, тензорные форматы с разделением по диапазонам, суммирование электростатических потенциалов, вычисление энергии и сил.

DOI: 10.31857/S0044466921050112

<sup>1)</sup> Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.