

**МАЛОРАНГОВЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ  
МАССИВОВ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЕ В РАСЧЕТЕ  
КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛ**

*Рахуба Максим Владимирович*

*Аспирант*

*Московский физико-технический институт, Москва, Россия*

*E-mail: rakhuba.m@gmail.com*

В настоящей работе рассматривается задача на поиск собственных значений и собственных векторов линейных операторов и методы ее численного решения. Особенностью задачи является то, что собственные векторы представляют многомерные массивы (тензоры), память для хранения которых растет экспоненциально с размерностью задачи. Для избежания этой проблемы предлагается использовать малоранговые тензорные разложения, в частности разложение тензорного произведения [1].

Для ряда задач было показано, что собственные векторы могут быть эффективно представлены в формате тензорного произведения, то есть они принадлежат некоторому нелинейному многообразию малой размерности. Вопрос заключается в том, как использовать это априорное знание при вычислениях. В настоящей работе предлагается применять известные итерационные методы, использующие обращение матриц (методы с предобуславливанием, обратная итерация) и решать соответствующие линейные системы вдоль многообразия для ускорения сходимости.

Предложенный метод применяется для расчета колебательного спектра молекул [2]. Использование предложенного подхода приводит к более точным результатам при меньших затратах памяти по сравнению с другими методами (например, квадратурами Смоляка и недавно предложенным H-RRBPM методом [3]).

**Литература**

1. Oseledets I. V. Tensor-train decomposition // SIAM J. Sci. Comput. 2011. – Т. 33, № 5. С. 2295-2317.
2. Rakhuba M. V., Oseledets I. V. Calculating vibrational spectra of molecules using tensor train decomposition // J. Chem. Phys. 2016. Т. 145, С. 124101.
3. Thomas P. S., Carrington Jr T. Using Nested Contractions and a Hierarchical Tensor Format To Compute Vibrational Spectra of Molecules with Seven Atoms // J. Phys. Chem. A. 2015. Т. 119, № 52. С. 13074-13091.