Автономная некоммерческая образовательная организация
высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»

На правах рукописи

Чертков Андрей Владимирович

# ТЕНЗОРНЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ МНОГОМЕРНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

РЕЗЮМЕ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата компьютерных наук

Москва — 2023

Диссертационная работа выполнена в Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», центр технологий искусственного интеллекта.

Научный руководитель: Оселедец Иван Валерьевич,
доктор физико-математических наук, профессор, директор центра. Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», центр технологий искусственного интеллекта

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Разложение тензорного поезда (tensor train; далее TT) – это распространенный на сегодняшний день способ компактного представления многомерных массивов (тензоров) с возможностью решения проблемы проклятия размерности в контексте потребления памяти и вычислительной сложности. TT-разложение позволяет в рамках вычислительно эффективных процедур получить малопараметрическое представление тензора в виде упорядоченного набора малых трехмерных тензоров, называемых TT-ядрами или вагонами тензорного поезда. Исходный тензор, имеющий $N^d$ элементов ($d$ – число измерений, $N$ – число элементов по каждому измерению), преобразуется при использовании TT-разложения в факторизованное представление, имеющее только $d{\cdot}N{\cdot}R^2$ параметров, где $R$ – это характерный ранг TT-разложения. Многие алгебраические операции (суммирование, умножение, свертка, интегрирование, решение систем линейных уравнений и т. д.) над тензорами, представленными в TT-формате, также могут выполняться с линейной сложностью по $d$ и $N$, если TT-ранг $R$ ограничен. Для векторов и матриц можно также получить похожее компактное представление, если предварительно преобразовать соответствующий одно- или двумерный тензор в существенно многомерный тензор с помощью процедуры квантизации (quantized tensor train; далее QTT). Например, вектор длины $N = 2^d$ можно преобразовать в $d$-мерный тензор с 2 элементами по каждому измерениию, и тогда TT-разложение для этого тензора имеет всего $2 \cdot log_2 N \cdot R^2$ параметров.

Благодаря отмеченным выше уникальным свойствам, численные методы на основе TT-разложения стали чрезвычайно популярными в широком спектре приложений, включая вычислительную линейную алгебру, анализ данных, моделирование физических процессов и машинное обучение. Однако для успешного практического применения этих методов необходимо усовершенствование соответствующих общих алгоритмов и их адаптация для конкретных предметных задач, в том числе по следующим важным направлениям, которые рассматриваются в данной работе: разработка новых вычислительно эффективных реализаций базовых алгоритмов в TT-формате; развитие новых подходов и эвристик для оптимального выбора начального приближения в методах аппроксимации на основе TT-формата; создание новых методов оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных в TT-формате.

В то же время важной конкретной областью применения TT-разложения является решение дифференциальных уравнений. Как показано в работе, возможна разработка эффективных как по потребляемой памяти, так и по скорости работы алгоритмов решения дифференциальных уравнений в частных производных с использованием TT-формата. В этом случае дифференциальный оператор, коэффициенты и правая часть уравнения задаются в сжатом виде в TT-формате, и решение, соответственно, также получается в сжатой форме. Если по своей природе решение имеет малоранговую структуру, то с использованием TT-формата становится возможным решать существенно многомерные задачи или использовать мелкую сетку при дискретизации дифференциального оператора для одномерных и двумерных задач в рамках QTT-подхода.

Одномерные и двумерные дифференциальные уравнения в частных производных, рассматриваемые в данной работе, применяются во многих задачах физического и химического моделирования, например, они описывают течение жидкости в пористых средах. Соответствующие коэффициенты в таких уравнениях часто оказываются многомасштабными или осциллирующими, и возникает необходимость в использовании очень мелких сеток для разрешения всех масштабов. Поэтому применение подхода на основе QTT/TT-разложения для этого класса задач представляется полезным, однако классические схемы дискретизации, такие как конечные разности и конечные элементы, могут быть неустойчивыми на мелких расчетных сетках в TT-формате, и требуется разработка альтернативных специализированных схем дискретизации, наиболее подходящих для реализации в рамках TT-формата.

В качестве конкретного примера многомерного дифференциального уравнения мы рассматриваем в работе уравнение Фоккера-Планка, которое играет важную роль в изучении свойств динамических систем. Отметим, что в последние годы данное уравнение получило особенно широкое распространение в рамках машинного обучения в контексте задач оценки плотности распределения данных, обучения генеративных диффузионных моделей и т.д. Одной из основных сложностей решения уравнения Фоккера-Планка является высокая размерность практически значимых вычислительных задач. Сложность использования сеточных представлений решения возрастает экспоненциально с размерностью $d$, поэтому требуются малопараметрические представления, и использование TT-формата для данной задачи представляется перспективным.

**Целью** данной диссертационной работы является создание новых эффективных методов на основе TT-разложения для работы с большими массивами данных и их применение к решению дифференциальных уравнений. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать новый эффективный метод аппроксимации многомерных массивов данных и функций многих переменных на основе TT-разложения;
2. Разработать новый эффективный метод оптимизации многомерных массивов данных и функций многих переменных на основе TT-разложения;
3. Разработать новый эффективный метод решения дифференциальных уравнений в частных производных на мелких расчетных сетках на основе QTT/TT-разложения;
4. Разработать новый эффективный метод решения многомерного уравнения Фоккера-Планка на основе TT-разложения.

**Научная новизна:**

1. Предложен новый метод TT-ANOVA-ALS на основе ТТ-разложения для аппроксимации многомерных массивов и функций многих переменных;
2. Предложен новый метод Optima-TT на основе ТТ-разложения для оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных, представленных в ТТ-формате;
3. Предложен новый метод TTOpt на основе ТТ-разложения для оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных;
4. Предложен новый метод FS-QTT на основе ТТ-разложения для решения одномерных и двумерных дифференциальных уравнений в частных производных на мелких расчетных сетках;
5. Предложен новый метод FPCross на основе ТТ-разложения для решения многомерного уравнения Фоккера-Планка.

**Практическая значимость** работы состоит в создании следующих программных продуктов с открытым исходным кодом:

1. **teneva**[1] – фреймворк, реализующий обширный набор методов в ТТ-формате для аппроксимации (включая метод TT-ANOVA-ALS), оптимизации (включая метод Optima-TT), анализа и использования многомерных массивов и функций многих переменных;
2. **ttopt**[2] – библиотека, реализующая новый метод TTOpt для оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных;
3. **qttpdesolver**[3] – библиотека, реализующая новый метод FS-QTT для решения дифференциальных уравнений в частных производных;
4. **fpcross**[4] – библиотека, реализующая новый метод FPCross для решения многомерного уравнения Фоккера-Планка.

Отметим, что часть результатов по теме диссертации была использована при участии автора в коммерческих проектах:

1. Мозг и информация: от естественного интеллекта к искусственному (2020 – н.в., Институт перспективных исследований мозга);
2. Ускорение расчетов с использованием тензорных вычислений (2019 – 2022, ООО «Газмпромнефть НТЦ»).

Также часть результатов была использована в рамках работ автора по грантам Министерства науки и высшего образования РФ:

1. Многомасштабные интеллектуальные нейродинамические системы для многомерной оптимизации в области машинного обучения и обработки данных (2021 – н.в., «мегагрант»);
2. Тензорные сети и глубинное обучение для интеллектуального анализа данных (2016 – 2021, «мегагрант»);

[1]См. репозиторий https://github.com/AndreiChertkov/teneva.
[2]См. репозиторий https://github.com/AndreiChertkov/ttopt.
[3]См. репозиторий https://github.com/AndreiChertkov/qttpdesolver.
[4]См. репозиторий https://github.com/AndreiChertkov/fpcross.

3. QTT-технология решения многомасштабных задач (2015 – 2016, совместная работа с группой проф. К. Шваба, ETH Zurich).

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Метод TT-ANOVA-ALS. Построено ANOVA-представление первого порядка в TT-формате (TT-ANOVA) и предложено его использование в качестве начального приближения для метода TT-ALS при аппроксимации многомерных массивов и функций многих переменных в TT-формате. Проведенные численные расчеты для ряда модельных задач, в том числе для задачи аппроксимации параметрического уравнения в частных производных, демонстрируют существенное преимущество предложенного метода по сравнению со стандартным подходом на основе метода TT-ALS со случайным начальным приближением;
2. Метод Optima-TT. Разработан новый метод, позволяющий находить минимальные и максимальные элементы тензора, заданного в TT-формате, в рамках последовательного тензорного перемножения TT-ядер со специальным отбором потенциальных кандидатов на оптимум. Построена вероятностная интерпретация метода, сформулированы теоретические оценки на его сложность и сходимость, а также проведены обширные численные эксперименты со случайными тензорами и различными модельными функциями с размерностью входа до 100;
3. Метод TTOpt. Разработан новый метод безградиентной оптимизации, основанный на сочетании малорангового тензорного представления и принципа максимального объема для матриц. Продемонстрирована применимость метода для широкого круга модельных задач и показано его преимущество в сравнении с альтернативными подходами к оптимизации, включая генетические алгоритмы и эволюционные стратегии;
4. Метод FS-QTT. Разработан эффективный решатель для одномерных и двумерных стационарных уравнений диффузии, основанный на TT-разложении и предложенной новой устойчивой схеме дискретизации, которая позволяет использовать мелкие сетки с чрезвычайно высоким пространственным разрешением. Численные эксперименты показывают, что данная схема дает результаты высокой точности и может использоваться для сеток, содержащих до $2^{60}$ узлов в двумерном случае;
5. Метод FPCross. Предложена новая численная схема решения многомерного уравнения Фоккера-Планка, основанная на многомерной Чебышевской интерполяции, спектральном дифференцировании, методе расщепления и TT-разложении. Продемонстрирована эффективность предложенного подхода на ряде прикладных задач, включая многомерный процесс Орнштейна-Уленбека, моделирование молекулярной структуры жидких полимеров и анализ оптимальности транспорта в диффузионных моделях машинного обучения.

**Личный вклад.** Все основные результаты диссертации были получены автором лично, в то же время важно отметить ценный вклад, внесенный следующими коллегами автора: к.ф.-м.н. Глеб Рыжаков (обсуждение идей, лежащих в основе методов TT-ANOVA-ALS и Optima-TT), к.ф.-м.н. Максим Рахуба (обсуждение связи метода FS-QTT с конечно-разностной схемой), к.ф.-м.н. Валентин Хрульков (теоретическое обоснование гипотезы об оптимальном транспорте в диффузионных моделях машинного обучения), к.ф.-м.н. Роман Щуцкий (обсуждение способов дальнейшего развития метода TTOpt), аспирант Константин Созыкин (практическое применение метода TTOpt для задач обучения с подкреплением) и аспирант Георгий Новиков (обсуждение свойств метода Optima-TT).

**Публикации.** Результаты исследований изложены в следующих работах.

**Публикации повышенного уровня.**

1. **A. Chertkov**, G. Ryzhakov, I. Oseledets. Black box approximation in the tensor train format initialized by ANOVA decomposition. Работа принята к публикации в SIAM Journal on Scientific Computing, 2023 (квартиль издания Q1 Scopus; [A1]);
2. V. Khrulkov, G. Ryzhakov, **A. Chertkov**, I. Oseledets. Understanding DDPM latent codes through optimal transport. In Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2023 (рейтинг конференции CORE A*; [A2]);
3. K. Sozykin*, **A. Chertkov***, R. Schutski, A. Phan, A. Cichocki, I. Oseledets. TTOpt: a maximum volume quantized tensor train-based optimization and its application to reinforcement learning. In Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems, 2022 (рейтинг конференции CORE A*; у первых двух авторов равный вклад в работу; [A3]);
4. **A. Chertkov**, I. Oseledets. Solution of the Fokker–Planck equation by cross approximation method in the tensor train format. Frontiers in Artificial Intelligence, 2021 (квартиль издания Q2 Scopus; [A4]).

**Прочие публикации.**

1. I. Oseledets, M. Rakhuba, **A. Chertkov**. Black-box solver for multiscale modelling using the QTT format. In Proceedings of ECCOMAS, 2016 [A5];
2. **A. Chertkov**, G. Ryzhakov, G. Novikov, I. Oseledets. Optimization of functions given in the tensor train format. arXiv препринт, 2022 [A6];
3. A. Nikitin, **A. Chertkov**, R. Ballester-Ripoll, I. Oseledets, E. Frolov. Are quantum computers practical yet? A case for feature selection in recommender systems using tensor networks. arXiv препринт, 2022 [A7];
4. **A. Chertkov**, I. Oseledets, M. Rakhuba. Robust discretization in quantized tensor train format for elliptic problems in two dimensions. arXiv препринт, 2016 [A8].

**Апробация работы.** Результаты докладывались на конференциях:

1. Визуализация функционирования и анализ устойчивости искусственных нейронных сетей. Ломоносовские чтения, Московский государственный университет. Москва, 2023;

2. TTOpt: A maximum volume quantized tensor train-based optimization. Fall into ML Conference, Высшая школа экономики. Москва, 2022;
3. TTOpt: A maximum volume quantized tensor train-based optimization and its application to reinforcement learning. NeurIPS. Онлайн, 2022;
4. Quantized tensor train decomposition for solution of multiscale partial differential equations. Конференция Ломоносов, Московский государственный университет. Москва, 2017;
5. Tensor methods for multiscale modeling. Gen-Y Conference. Сочи, 2017;
6. Quantized Tensor Train Decomposition for Multiscale Modeling. 1st Annual Workshop of Skoltech/MIT Next Generation Program. Москва, 2016;
7. Black-box solver for multiscale modelling using the QTT format. ECCOMAS Congress. Крит, 2016;
8. A tensor train approximation in active subspace variables with application to parametric partial differential equations. International Conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications. Москва, 2015.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 161 страницу, включая 27 рисунков и 13 таблиц. Список литературы содержит 162 наименования.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается ее научная новизна и практическая значимость.

**Первая глава** является вводной и посвящена исследованию TT-разложения и основных методов работы с многомерными массивами в TT-формате, которые реализованы в составе фреймворка teneva. В вводном **разделе 1.1** мы показываем, что предложенное в 2011 г. в работе [9] TT-разложение нашло в дальнейшем применения для аппроксимации многомерных интегралов и интегралов, зависящих от параметров, для вычисления многомерных сверток, для приближения функции Грина многомерных дифференциальных уравнений, для решения вычислительных задач в области финансовой математики, для обработки аудио и видео, для ускорения и сжатия искусственных нейронных сетей и даже для построения новых алгоритмов машинного обучения непосредственно на основе TT-разложения. TT-разложение применялось технологическими компаниями для ускорения искусственных нейронных сетей, оптимизации расположения вышек сотовой связи, ускорения алгоритмов планирования разработки месторождений и оптимального выбора портфеля. Отметим, что в отличие от многих методов машинного обучения, при использовании TT-разложения мы имеем математически обоснованные алгоритмы, базирующиеся на доказанных теоремах о сходимости, а также TT-разложение имеет простую интуитивную форму – упорядоченный набор трехмерных массивов, каждый из которых представляет факторизацию соответствующей размерности, что повышает уровень интерпретируемости модели.

В **разделе 1.2** вводится используемая в работе система обозначений, рассматривается парадигма малоранговых тензорных аппроксимаций, приводится краткий обзор соответствующих методов и обозначаются основные преимущества ТТ-разложения: количество параметров в ТТ-разложении и сложность большинства математических операций в рамках ТТ-формата линейно зависят от размерности тензора и среднего размера его мод; существуют стабильные численные методы построения ТТ-разложения для явно заданного тензора в полном формате и для приближенного восстановления тензора в ТТ-формате по заданному или динамически генерируемому обучающему набору данных; доступен обширный набор эффективных алгоритмов для работы с ТТ-тензорами.

В **разделе 1.3** обсуждаются основные свойства ТТ-разложения и QTT-разложения [10], а также численные методы на их основе, в том числе такие операции как get, full, add, sub, mul, const, kron, orthogonalize, truncate, mul_scalar, mul_matvec, mul_matmat, lss, maxvol и maxvol_rect, которые будут применяться в последующих главах работы при описании новых разработанных подходов для аппроксимации, оптимизации и решения дифференциальных уравнений. Для каждой операции формулируется оценка на вычислительную сложность и рассматриваются особенности реализации.

Особо отметим операцию get, возвращающую значение ТТ-тензора для запрошенного мульти-индекса тензора и представляющую фактически определение ТТ-разложения: тензор $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times \ldots \times N_d}$ представлен в ТТ-формате, если все его элементы ($n_k = 1, 2, \ldots, N_k$; $k = 1, 2, \ldots, d$) выражаются посредством следующей формулы (операция get):

$$\mathcal{Y}[n_1, n_2, \ldots, n_d] = \sum_{r_1=1}^{R_1} \sum_{r_2=1}^{R_2} \ldots \sum_{r_{d-1}=1}^{R_{d-1}} \mathcal{G}_1[1, n_1, r_1] \mathcal{G}_2[r_1, n_2, r_2] \ldots \\ \mathcal{G}_{d-1}[r_{d-2}, n_{d-1}, r_{d-1}] \mathcal{G}_d[r_{d-1}, n_d, 1], \quad (1)$$

где трехмерные тензоры $\mathcal{G}_k \in \mathbb{R}^{R_{k-1} \times N_k \times R_k}$ называются ТТ-ядрами, а натуральные числа $R_0, R_1, \ldots, R_d$ (с соглашением $R_0 = R_d = 1$) называются ТТ-рангами. На рисунке 1 в верхней части мы приводим графическую иллюстрацию формулы (1), а в нижней части изображаем соответствующую тензорную диаграмму. Как следует из приведенной формулы (1), хранение ТТ-ядер $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \ldots, \mathcal{G}_d$ требует не более чем $d \times \max_{1 \leq k \leq d} \left( N_k R_k^2 \right) \sim d \cdot \overline{N} \cdot \overline{R}^2$ ячеек памяти, где $\overline{N}$ и $\overline{R}$ – это эффективный («средний») размер моды и эффективный ТТ-ранг соответственно, в то время как хранение полного тензора потребовало бы $\overline{N}^d$ ячеек, в итоге, как уже отмечалось выше, ТТ-разложение оказывается свободным от проклятия размерности, если ТТ-ранги ограничены.

В **разделе 1.4** приводится обзор методов для построения приближенного ТТ-разложения некоторым образом заданного целевого тензора, в том числе,

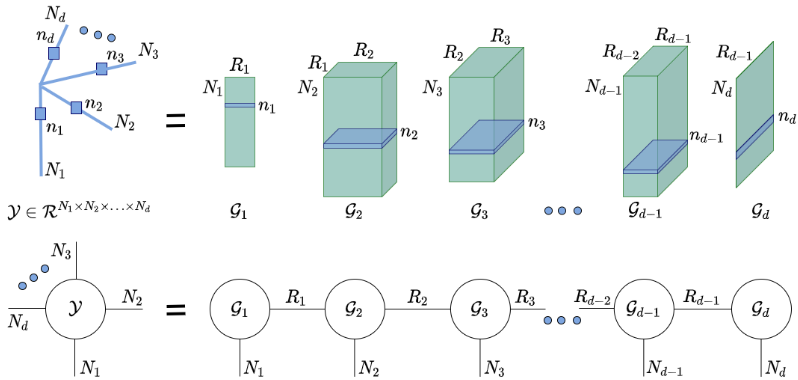


Рис. 1 — Схематическая иллюстрация малорангового ТТ-разложения.

подробно обсуждается метод наименьших квадратов по переменным направлениям в ТТ-формате (tensor train alternating least squares; далее TT-ALS) [11] и метод многомерной крестовой аппроксимации в ТТ-формате (tensor train cross approximation; далее TT-cross) [12], а также соответствующие практические реализации в виде функций: als, cross, cross_func и cross_act, которые будут активно использоваться далее в работе.

В **разделе 1.5** формулируются основные выводы по первой главе работы, в том числе приводится полный список рассмотренных методов и операций для построения ТТ-тензоров и работы с тензорами в QTT/TT-формате.

**Вторая глава** посвящена обсуждению разработанных новых методов аппроксимации и оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных в ТТ-формате. В вводном **разделе 2.1** мы показываем, что многие физические и инженерные модели могут быть представлены в форме скалярной функции, которая зависит от многомерного аргумента:

$$y = \mathsf{f}(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_d]^T \in \Omega \subset \mathbb{R}^d. \tag{2}$$

Подобные функции часто имеют форму черного ящика (black box; далее BB), то есть их внутренняя структура, свойства гладкости и т.п. оказываются неизвестными. Время или количество ресурсов, требуемых для вычисления запрашиваемых значений BB (функции f), может быть существенным, и поэтому приобретает актуальность аппроксимация подобных BB, то есть создание упрощенных (суррогатных; малопараметрических) моделей, которые могут быть вычислены быстро, но при этом остаются достаточно близкими к рассматриваемому BB (2). Как обосновывается в данной главе, ТТ-разложение является эффективным способом построения суррогатных моделей в форме малоранговых (малопараметрических) тензорных аппроксимаций для широкого класса многомерных задач, а также для решения задач оптимизации дискретных и

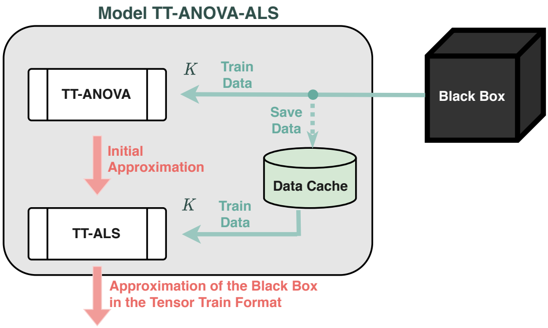


Рис. 2 — Метод TT-ANOVA-ALS для аппроксимации дискретного ВВ.

непрерывных моделей вида (2). В главе рассматривается предложенный метод аппроксимации (TT-ANOVA-ALS) и два метода оптимизации (Optima-TT и TTOpt) многомерных массивов данных и функций многих переменных, заданных в форме ВВ. В основе разработанных подходов лежит идея применения современных алгоритмов малоранговых тензорных аппроксимаций и QTT/TT-разложения к дискретизированному ВВ на многомерной сетке. Проведенные численные эксперименты демонстрируют существенные преимущества этих методов в сравнении с альтернативными распространенными подходами как по точности результата, так и по вычислительной сложности (времени работы). Отметим, что в численных экспериментах для всех разработанных методов (TT-ANOVA-ALS, Optima-TT и TTOpt) мы используем единый набор модельных многомерных функций, часто применяемых для тестирования алгоритмов аппроксимации и оптимизации, и в разделе приводится их подробное описание.

В **разделе 2.2** рассматривается предложенный подход TT-ANOVA-ALS для эффективной аппроксимации многомерных массивов и функций многих переменных в условиях наличия обучающего набора данных существенно ограниченного размера. В дискретной постановке суррогатное моделирование эквивалентно восстановлению многомерного массива (тензора) по малой части его элементов. Метод TT-ALS является на сегодняшний день широко используемым подходом для эффективного решения этой задачи в случае обучения на заданном наборе данных. TT-ALS позволяет получить малопараметрическое представление тензора в TT-формате, свободное от проклятия размерности, которое может быть затем использовано для быстрого вычисления значений в произвольных индексах тензора, его оптимизации, построения статистических характеристик, или для эффективной реализации различных алгебраических операций с ВВ (интегрирование, решение систем уравнений, свертки и т.п.). Однако для получения высокой точности необходим хороший выбор начального приближения.

Нами было построено ANOVA-представление [13] в TT-формате и было предложено его использование в качестве начального приближения для метода

TT-ALS. Иллюстрация предложенного подхода приводится на рисунке 2. Проведенные численные расчеты для ряда многомерных модельных задач, в том числе для параметрического уравнения в частных производных (partial differential equation; далее PDE), демонстрируют существенное преимущество TT-ANOVA-ALS в сравнении с обычно используемым случайным начальным приближением в базовом методе TT-ALS. Для всех рассмотренных модельных задач получено повышение точности не менее чем на порядок относительно базового метода при одинаковом количестве запросов к ВВ. Отметим, что предложенный подход TT-ANOVA-ALS является очень общим и может применяться в широком классе реальных задач суррогатного моделирования и машинного обучения. Основные результаты представлены в нашей работе [A1], а соответствующий программный код доступен во фреймворке teneva.

В **разделе 2.3** обсуждается вторая очень распространенная задача, возникающая при рассмотрении ВВ вида (2) – это безградиентная оптимизация функций многих переменных (дискретных и непрерывных). При этом предполагается, что значения функции (ВВ) могут быть вычислены в любой запрошенной точке, либо задан уже готовый обучающий набор данных и требуется приближенно найти минимальное или максимальное значение функции, затратив как можно меньше ресурсов, то есть сделав как можно меньше запросов к ВВ. Информация о внутренней структуре функции в рамках такой постановки отсутствует, и, например, явное использование классических градиентных методов оказывается затруднительным. Заметим, что возможно, как минимум, два подхода к решению данной задачи: предварительная аппроксимация ВВ с последующей оптимизацией полученной суррогатной модели, либо прямая оптимизация ВВ с использованием некоторой интеллектуальной эвристики. Второй подход обсуждается в следующем разделе, а в данном разделе рассматривается первый подход, в рамках которого предполагается наличие аппроксимации ВВ в TT-формате, то есть ставится задача оптимизации непосредственно TT-тензора.

На сегодняшний день практически отсутствуют методы для нахождения минимального и максимального элемента для заданного TT-тензора. Нами был предложен новый алгоритм Optima-TT (см. иллюстрацию на рисунке 3), позволяющий получить очень точное приближение для оптимума в рамках последовательного тензорного перемножения TT-ядер с интеллектуальным отбором потенциальных кандидатов на оптимум. Была также построена вероятностная интерпретация метода, сделаны теоретические оценки на его сложность и сходимость, и проведены обширные численные эксперименты со случайными тензорами и различными модельными функциями с размерностью входа до 100. Как следует из результатов экспериментов, наш подход приводит к решению, близкому к точному оптимуму для всех модельных задач, при этом время работы алгоритма составляет не более 50 секунд на обычном ноутбуке. Основные результаты представлены в нашей работе [A6], а соответствующий программный код доступен во фреймворке teneva.

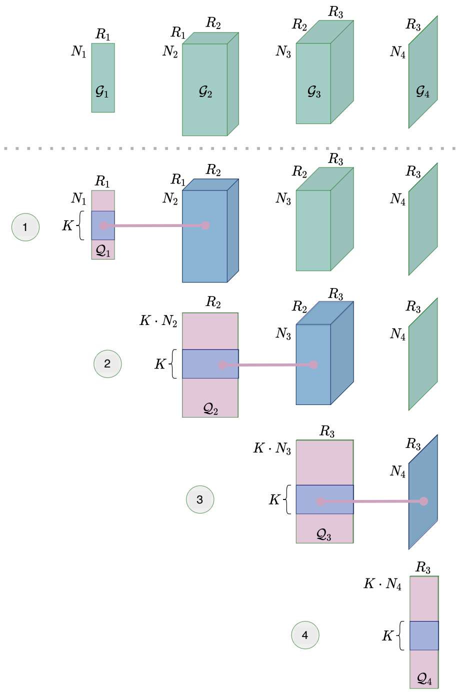


Рис. 3 — Схематическая иллюстрация предложенного метода Optima-TT для случая 4-мерного ТТ-тензора. Выбираемые на итерациях строки изображены идущими подряд (в действительности это не так).

В **разделе 2.4** исследуется более общая задача прямого применения методов малоранговых тензорных аппроксимаций к оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных без предварительного построения ТТ-аппроксимации, которое осуществлялось в случае метода Optima-TT. Соответствующий метод TTOpt, разработанный нами на основе QTT-разложения и обобщенного принципа максимального объема для матриц, подробно обсуждается в данном разделе (см. также иллюстрацию на рисунке 4). Мы демонстрируем эффективность нового метода для ряда многомерных задач минимизации функций и приводим результаты его сравнения с различными популярными безградиентными и градиентными методами. В сравнении с другими подходами, TTOpt оказывается одним из наиболее быстрых (даже с учетом использования неоптимизированного python кода в нашей программной реализации) и стабильных (сходится для всех рассмотренных примеров). Основные результаты представлены в нашей работе [A3], а соответствующий программный код доступен в программном продукте ttopt. Также в работе [A7] мы рассматриваем еще одно конкретное практическое приложение предложенного метода оптимизации в задаче обучения рекомендательных систем искусственного интеллекта.

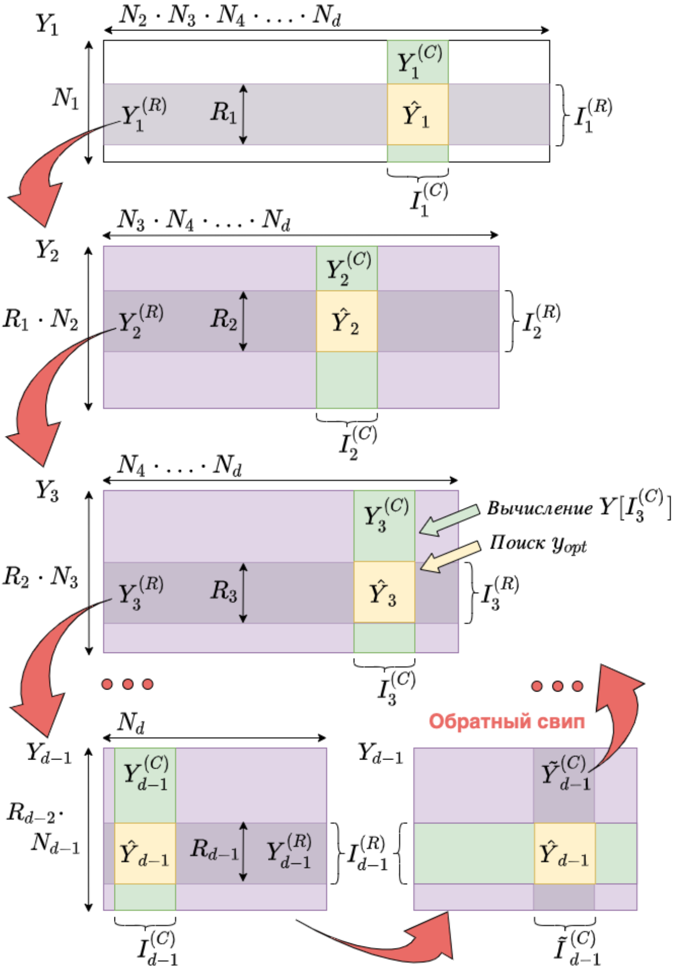


Рис. 4 — Концептуальная схема алгоритма TTOpt для оптимизации многомерных массивов и функций многих переменных, основанного на методе переменных направлений и принципе максимального объема. Алгоритм требует вычисления только малой части элементов тензора (см. столбцы и строки зеленого цвета). Для компактности иллюстрации, столбцы и строки, отбираемые на итерациях алгоритма, изображены следующими непосредственно друг за другом.

В **разделе 2.5** формулируются основные выводы по второй главе работы, а также обозначаются возможные направления дальнейших исследований, включая развитие метода TT-ANOVA-ALS (построение TT-ANOVA-приближения более высокого порядка, а также использование TT-ANOVA-приближения в других методах аппроксимации, например, в алгоритме TT-cross), метода Optima-TT (усложнение процедуры обхода TT-ядер, в частности, организация итеративного обхода ядер «слева направо», «справа налево» и «из центра» с соответствующим объединением кандидатов и уточнением получаемого оптимума) и метода TTOpt (объединение результатов множественных запусков с различными начальными приближениями и дополнительные итерации после объединения), а также возможное совместное применение этих методов для сложных задач многомерной аппроксимации и оптимизации.

**Третья глава** посвящена описанию предложенного нового метода FS-QTT на основе QTT/TT-разложения для решения $D$-мерных ($D = 1, 2$) PDE с однородными граничными условиями Дирихле в ограниченном объеме $\Omega = [0, 1]^D$:

$$-\nabla\left(\mathcal{K}(\boldsymbol{x})\nabla\mathsf{u}(\boldsymbol{x})\right) = \mathsf{f}(\boldsymbol{x}), \quad \mathsf{u}(\boldsymbol{x})|_{\partial\Omega} = 0, \tag{3}$$

где $\mathsf{f}$ – это заданная функция в $\Omega$, $\mathcal{K}$ – это диагональный тензор диффузии, а $\mathsf{u}$ – это искомое решение. В вводном **разделе 3.1** мы приводим общее описание предложенного подхода. В рамках FS-QTT-схемы строится неявная дискретизация рассматриваемого PDE (3) с плотной матрицей, которая однако может быть компактно представлена в QTT-формате, что позволяет осуществлять все операции с логарифмической сложностью и потреблением памяти, включая решение соответствующих систем линейных алгебраических уравнений в QTT/TT-формате. В итоге, мы можем использовать очень мелкие сетки и получать очень точные решения с чрезвычайно высоким пространственным разрешением, что оказывается особенно актуальным для многомасштабных задач.

Действительно, если, например, компоненты тензора диффузии $\mathcal{K}$ являются быстро осциллирующими и/или многомасштабными, то необходима густая сетка для возможности разрешения наименьшего масштаба изменений коэффициента. Это является существенной проблемой при явном решении подобного уравнения, в частности, с использованием сеточных методов конечных элементов или конечных разностей. На сегодняшний день распространены подходы с применением методов, основанных на аналитических разложениях, многомасштабных конечных элементах и т.п., однако они обычно требуют знания аналитических свойств решения, не обладают достаточной степенью общности и имеют высокую вычислительную сложность.

Для решения обозначенных проблем могут применяться малоранговые тензорные аппроксимации, при этом, поскольку обычно мы имеем небольшое значение размерности задачи ($D = 1, 2, 3$), то необходима также квантизация возникающих векторов и матриц, то есть должно использоваться QTT-разложение. Отметим, что более расспространенным является применение малоранговых тензорных аппроксимаций для решения многомерных

PDE в рамках стандартных схем дискретизации. Однако задача решения PDE с использованием тензорных методов для случая малой размерности также была рассмотрена в литературе. В работах [14—17] было показано, что решение уравнения (3) теоретически допускает эффективное представление в QTT-формате. В частности, в работе [16] было доказано, что для класса PDE с кусочно-аналитическими коэффициентами точное решение $\mathsf{u}$ может быть аппроксимировано с точностью $\epsilon$ по энергетической норме с $\mathcal{O}\left(\log^{\alpha}\epsilon^{-1}\right)$ степеней свободы для $\alpha \leq 5$ в рамках метода конечных элементов в QTT-формате. В данном подходе вводится очень мелкая пространственная сетка с числом элементов $N = 2^d$ $(d \gg 1)$ по каждой размерности, способная описать самый мелкий масштаб задачи. Затем соответствующие векторы и матрицы, возникающие при дискретизации правой части $\mathsf{f}$, элементов тензора диффузии $\mathcal{K}$ и дифференциального оператора PDE, преобразуются в QTT-формат посредством введения виртуальных размерностей. Например, в одномерном случае вектор дискретных значений для правой части $\mathsf{f}$ может рассматриваться как $d$-мерный тензор, у которого каждая мода имеет размер 2. Формализм, описанный в работе [16], был успешно применен в [15] для теоретического анализа двух классов одномерных многомасштабных задач: двухмасштабная диффузия и уравнение Гельмгольца с большими волновыми числами. Было доказано, что решения данных задач допускают представление в QTT-формате с полилогарифмической зависимостью числа параметров от точности. Также в работе [18] для данных задач был предложен предобуславливатель в QTT-формате.

Однако, несмотря на то что решение уравнения (3) можно теоретически построить в QTT-формате с малым TT-рангом, реальные практические реализации на основе стандартных методов конечных элементов или конечных разностей [14—16] оказываются численно неустойчивыми на мелких сетках из-за повышения числа обусловленности и роста ошибок округления. Предложенная нами схема дискретизации FS-QTT для одномерных и двумерных PDE вида (3) свободна от данной проблемы и сохраняет второй порядок сходимости для очень мелких сеток, при этом TT-ранги возникающих векторов и матриц остаются ограниченными. Основные результаты для одномерной и двумерной задачи представлены в наших работах [A5] и [A8] соответственно, а программный код доступен в библиотеке qttpdesolver.

В **разделе 3.2** приводятся детали реализации метода FS-QTT для PDE вида (3) в одномерном случае. Используя вариационную формулировку, мы получаем явную формулу для искомого решения PDE, которая включает только поэлементные операции и матричные умножения, при этом все операции могут быть эффективно реализованы в QTT-формате. Затем мы показываем, что в точной арифметике решение, вычисляемое по предложенной формуле, эквивалентно решению PDE, получаемому в рамках стандартной конечно-разностной схемы второго порядка на равномерной сетке. Далее мы описываем практические аспекты реализации метода в рамках QTT/TT-формата и показываем, что

TT-ранги решения ограничены произведением TT-рангов правой части PDE $\mathsf{f}$ и величины, обратной к коэффициенту PDE $\mathcal{K}$.

В **разделе 3.3** описывается предложенная FS-QTT схема решения PDE в двумерном случае. Как и в предыдущем разделе, мы используем вариационную формулировку уравнения (3) для построения системы линейных уравнений на искомое решение PDE, а затем показываем, что в точной арифметике приведенная система соответствует конечно-разностной схеме второго порядка. Далее мы формулируем алгоритмы для практической реализации схемы в QTT/TT-формате и формулируем оценки на TT-ранги.

В **разделе 3.4** обсуждаются результататы проведенных численных экспериментов для одномерных и двумерных задач, демонстрирующие работоспособность, стабильность и быстродействие новой предложенной схемы FS-QTT. Сначала рассматриваются две одномерных задачи, первая из которых соответствует искусственно сгенерированному PDE с известным аналитическим решением, а вторая – многомасштабному PDE. Затем FS-QTT схема применяется к решению двух примеров двумерных PDE. Мы сравниваем результаты всех численных расчетов, проведенных с использованием предложенного метода FS-QTT, с результатами двух решателей, основанных на стандартной конечно-разностной схеме дискретизации. При этом первый решатель реализован в рамках классического разреженного формата и может работать только на умеренно мелких сетках, а второй решатель разработан нами с использованием QTT-разложения, примененного непосредственно к конечно-разностной схеме. Проведенные эксперименты показывают, что предложенный метод решения дает точные результаты для различных PDE и может эффективно применяться при наличии до $2^{60}$ узлов сетки в двумерном случае, при этом общее время вычислений составляет всего лишь несколько секунд. В то же время, решатели на основе конечно-разностной схемы для достаточно крупных сеток дают близкий по точности результат, однако они становятся нестабильными на мелких сетках.

В заключительном **разделе 3.5** приводятся общие выводы по третьей главе работы и, в частности, отмечается, что схема дискретизации, используемая в FS-QTT-решателе, естественным образом может быть обобщена на трехмерный случай и на некоторые другие формы уравнений, например, на PDE с периодическими граничными условиями. Дальнейшее развитие предложенного подхода предполагает детальный анализ форм коэффициентов уравнения и правых частей, допускающих эффективное малоранговое представление. Многомасштабные задачи являются перспективными областями применения FS-QTT-решателя, поскольку в них требуется очень мелкая сетка для разрешения всех масштабов.

**Четвертая глава** посвящена описанию разработанного метода FPCross для решения многомерного уравнения Фоккера-Планка (Fokker-Planck equation; далее FPE). В вводном **разделе 4.1** мы приводим общую постановку задачи, связанную с рассмотрением стохастической динамической системы, описываемой стохастическим дифференциальным уравнением (stochastic differential equation;

далее SDE) вида:

$$d\boldsymbol{x} = \mathbf{f}(\boldsymbol{x}, t)\, dt + S(\boldsymbol{x}, t)\, d\boldsymbol{\beta}, \quad d\boldsymbol{\beta}\, d\boldsymbol{\beta}^\top = Q(t)\, dt, \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(t) \in \mathbb{R}^d, \tag{4}$$

где $d\boldsymbol{\beta}$ – это $q$-мерный пространственно-временной белый шум, $\mathbf{f}$ – это известная $d$-мерная вектор-функция, а $S \in \mathbb{R}^{d\times q}$ и $Q \in \mathbb{R}^{q\times q}$ – известные матрицы. Эволюция функции плотности вероятности (probability density function; далее PDF) $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ для пространственной переменной $\boldsymbol{x}$ описывается соответствующим FPE:

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_j} \left[ D_{ij}(\boldsymbol{x}, t) \rho(\boldsymbol{x}, t) \right] - \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} \left[ \mathbf{f}_i(\boldsymbol{x}, t) \rho(\boldsymbol{x}, t) \right], \tag{5}$$

где тензор диффузии $D$ имеет вид:

$$D(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{2} S(\boldsymbol{x}, t) Q(t) S^\top(\boldsymbol{x}, t).$$

FPE применяется для изучения свойств различных динамических систем, и в последние годы это уравнение приобрело особую популярность в машинном обучении для восстановления плотностей распределений в контексте нейронных обыкновенных дифференциальных уравнений (ordinary differential equations; далее ODE), генеративных моделей, диффузионных моделей и т.д. Задача анализа распространения неопределенности в нелинейных динамических системах, подверженных стохастическому возбуждению, активно изучалась в литературе в последние годы. Для решения FPE был разработан ряд численных методов, таких как метод интегралов по направлениям, методы конечных разностей и конечных элементов. Однако все эти методы требуют использования пространственных сеток, и для получения достаточно точного решения необходимы густые сетки, что приводит к экспоненциальному росту вычислительной сложности при росте размерности задачи. В то же время альтернативные подходы на основе метода Монте-Карло имеют низкую скорость сходимости, что также ограничивает возможность их использования в многомерном случае.

Таким образом, для решения FPE в многомерном случае необходимы специализированные методы, свободные от проклятия размерности (экспоненциального роста вычислительной сложности с ростом размерности задачи $d$), и перспективным представляется использование методов малоранговой тензорной аппроксимации. Однако для FPE этот подход еще не получил широкого распространения. Отметим работы [19—23], в которых для решения многомерного FPE предложено использовать TT-разложение. В этих работах дифференциальный оператор из уравнения (5) и правая часть $\mathbf{f}$ из (4) представляются в виде TT-тензора, а в работе [19] также рассматривается совместная пространственно-временная дискретизация решения в TT-формате. Соответственно, уравнение дискретизируется на тензорной сетке, и решение $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ принимает форму $d$-мерного тензора, который аппроксимируется малоранговым TT-тензором. Даже при таком подходе вычисления часто занимают слишком много времени, при этом также вводится ограничение на правую часть $\mathbf{f}$ – она должна допускать малоранговую аппроксимацию, что не всегда выполняется в реальных практических приложениях, например, роль правой части в диффузионных вероятностных моделях обычно играет некоторая искусственная нейронная сеть.

Мы предлагаем новый способ применения TT-формата для решения многомерного FPE, основанный на тесной связи данного уравнения с динамическими системами. Отличием нашего подхода от упомянутых выше работ является его более явная итерационная форма для интегрирования по времени, а также отсутствие необходимости представлять правую часть системы в малоранговом формате, что позволяет использовать этот подход, в том числе в приложениях машинного обучения. Проиллюстрируем ключевую идею, лежащую в основе нового метода, для частного случая без стохастической составляющей ($S \equiv 0$). Можно показать, что эволюция PDF вдоль траектории определяется уравнением:

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = -\operatorname{Tr}\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial \boldsymbol{x}}\right) \rho(\boldsymbol{x}, t), \tag{6}$$

где $\operatorname{Tr}(\,\cdot\,)$ обозначает операцию взятия следа матрицы. Для вычисления значения $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ в конкретной точке $\boldsymbol{x} = \widehat{\boldsymbol{x}}$ достаточно найти такой прообраз $\widehat{\boldsymbol{x}}_0$ этой точки, что при использовании его в качестве начального условия для (4), решение в момент $t$ окажется равным $\widehat{\boldsymbol{x}}$. Чтобы найти прообраз, нам нужно проинтегрировать уравнение (4) (без стохастической части) назад во времени, а чтобы найти значение PDF, мы затем совместно интегрируем уравнения (4) и (6). Так как мы можем вычислить значение $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ при любом $\widehat{\boldsymbol{x}}$, то возможно использование метода TT-cross для восстановления малорангового приближения по небольшой адаптивно отбираемой выборке. Таким образом, мы только численно решаем соответствующее ODE, при этом не требуется какое-либо компактное представление для функции $\mathbf{f}$. Для случая $S \neq 0$ ситуация оказывается сложнее, но разработанный нами подход FPCross на основе схемы расщепления, техник спектрального дифференцирования, многомерной Чебышевской интерполяции в TT-формате и метода TT-cross позволяет эффективно пересчитывать значения плотности с некоторого момента времени $t$ на следующий шаг $t + h$. Совместное применение обозначенных методов позволило создать высокоэффективный решатель, который может применяться для широкого класса многомерных приложений, включая восстановление плотностей распределений и вероятностные задачи в машинном обучении. Основные результаты представлены в наших работах [A4] и [A2], а соответствующий программный код доступен в библиотеке fpcross.

В **разделе 4.2** мы приводим подробное описание предложенного метода решения многомерного FPE. Мы применяем стандартный метод расщепления операторов второго порядка, что позволяет осуществлять независимое решение диффузионной и конвекционной частей исходного уравнения (5). Затем мы обсуждаем метод интерполяции решения на каждом шаге по времени с использованием Чебышевских узлов пространственной сетки, полиномов Чебышева и быстрого преобразования Фурье. Далее приводятся используемые нами схемы решения уравнения диффузии и уравнения конвекции. Для решения уравнений диффузии на каждом шаге по времени на Чебышевской сетке, мы дискретизируем оператор Лапласа, используя дифференциальные матрицы Чебышева и вычисляем соответствующую матричную экспоненту. Для решения уравнений конвекции мы используем интерполянт решения уравнения диффузии и специальную схему интегрирования вдоль траектории соответствующего ODE.

В **разделе 4.3** мы описываем реализацию предложенного подхода для решения FPE с использованием TT-разложения и метода TT-cross. Как оказывается, решение уравнения диффузии (которое сводится к вычислению матричной экспоненты) и конвекции (которое сводится к итеративному решению соответствующего уравнения для каждого узла сетки), а также интерполяция решения (которая сводится к вычислению быстрого преобразования Фурье для каждой размерности) могут быть эффективно выполнены в рамках TT-формата с линейной сложностью по размерности задачи.

В **разделе 4.4** приводятся постановки конкретных модельных задач и результаты численных экспериментов, проведенных с использованием предложенного нового решателя FPCross в TT-формате для многомерного FPE. Сначала мы рассматриваем решение уравнения с линейной конвекционной частью, соответствующего процессу Орнштейна-Уленбека (Ornstein-Uhlenbeck process; далее OUP), в одномерном, трехмерном и пятимерном случаях. Отметим, что одномерная задача решается без использования TT-формата, поэтому соответствующие результаты актуальны только для проверки общей корректности и свойств сходимости предложенного алгоритма, но не его эффективности. В случае многомерных задач мы используем предложенный тензорный решатель, который работает в соответствии с описанным выше алгоритмом. Для проверки корректности результатов расчетов мы используем известное аналитическое стационарное решение для OUP, а для одномерного случая также проводим сравнение с построенным аналитическим решением в произвольный момент времени. Далее мы рассматриваем более сложную задачу о «моделировании гантели» [24], которая возникает, в частности, при рассмотрении молекулярной структуры жидких полимеров и может быть представлена в виде трехмерного FPE с нелинейной конвекционной частью. Для этого случая мы вычисляем выражение Крамера и сравниваем результат нашего расчета с результатами из работ [24] и [19]. Затем мы рассматриваем конкретное применение разработанного решателя FPE для исследования свойств диффузионных моделей машинного обучения и их связи с оптимальной транспортной картой Монжа [A2], используя синтетические наборы данных размерности 2, 3 и 7. Для всех рассмотренных задач метод FPCross дал достаточно точный результат (относительная ошибка итогового решения составляла около $10^{-3}$ для большинства задач).

В заключительном **разделе 4.5** приводятся общие выводы по четвертой главе работы, в том числе отмечается что предложенный подход может быть использован для численного анализа неопределенностей в нелинейных динамических системах, подверженных стохастическим возмущениям, а также в широком спектре современных задач машинного обучения, связанных с восстановлением вероятностных распределений динамически зашумляемых величин, включая нейронные обыкновенные дифференциальные уравнения, генеративные и диффузионные модели. В качестве возможных путей дальнейшего развития тензорных методов решения многомерного FPE отмечаются следующие: метод может быть обобщен на случай FPE с произвольным коэффициентом диффузии (в данной главе рассматривались только FPE, имеющие скалярный коэффициент диффузии); метод может быть обобщен на дробные FPE, то есть на FPE, имеющие форму аналогичную (5), но с дробной степенью Лапласиана; возможно дополнительное ускорение и / или повышение точности предложенного метода при рассмотрении альтернативных схем расщепления и методов решения ODE, а также при более аккуратном подборе эвристик для выбора гиперпараметров метода TT-cross и связанных функций в TT-формате.

В **заключении** к диссертационной работе кратко формулируются основные полученные результаты:

1. Предложен новый метод TT-ANOVA-ALS на основе TT-разложения для аппроксимации многомерных массивов данных и функций многих переменных;
2. Предложен новый метод Optima-TT на основе TT-разложения для оптимизации многомерных массивов данных и функций многих переменных, представленных в TT-формате;
3. Предложен новый метод TTOpt на основе TT-разложения для оптимизации многомерных массивов данных и функций многих переменных;
4. Предложен новый метод FS-QTT на основе TT-разложения для решения одномерных и двумерных PDE на мелких расчетных сетках;
5. Предложен новый метод FPCross на основе TT-разложения для решения многомерного FPE;
6. Разработаны программные продукты teneva, ttopt, qttpdesolver и fpcross, реализующие предложенные методы на языке python;
7. Проведены обширные численные эксперименты для каждого из предложенных новых методов, демонстрирующие их корректность, эффективность и преимущества перед альтернативными подходами.

## Публикации автора по теме диссертации

A1. *Chertkov*, *A.* Black box approximation in the tensor train format initialized by ANOVA decomposition [Текст] / A. Chertkov, G. Ryzhakov, I. Oseledets // arXiv preprint arXiv:2208.03380 (accepted to SIAM Journal on Scientific Computing). — 2023.

A2. Understanding DDPM latent codes through optimal transport [Текст] / V. Khrulkov [и др.] // 11th International Conference on Learning Representations, ICLR. — 2023.

A3. TTOpt: a maximum volume quantized tensor train-based optimization and its application to reinforcement learning [Текст] / K. Sozykin [и др.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2022.

A4. *Chertkov*, *A.* Solution of the Fokker–Planck equation by cross approximation method in the tensor train format [Текст] / A. Chertkov, I. Oseledets // Frontiers in Artificial Intelligence. — 2021. — Т. 4.

A5. *Oseledets*, *I.* Black-box solver for multiscale modelling using the QTT format [Текст] / I. Oseledets, M. Rakhuba, A. Chertkov // Proc. ECCOMAS 2016. Crete Island, Greece. — 2016.

A6. Optimization of functions given in the tensor train format [Текст] / A. Chertkov [и др.] // arXiv preprint arXiv:2209.14808. — 2022.

A7. Are quantum computers practical yet? A case for feature selection in recommender systems using tensor networks [Текст] / A. Nikitin [и др.] // arXiv preprint arXiv:2205.04490. — 2022.

A8. *Chertkov*, *A.* Robust discretization in quantized tensor train format for elliptic problems in two dimensions [Текст] / A. Chertkov, I. Oseledets, M. Rakhuba // arXiv preprint arXiv:1612.01166. — 2016.

## Список литературы

9. *Oseledets*, *I.* Tensor-train decomposition [Текст] / I. Oseledets // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2011. — Т. 33, № 5. — С. 2295—2317.

10. *Oseledets*, *I.* Approximation of $2^d \times 2^d$ matrices using tensor decomposition [Текст] / I. Oseledets // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. — 2010. — Т. 31, № 4. — С. 2130—2145.

11. *Holtz*, *S.* The alternating linear scheme for tensor optimization in the tensor train format [Текст] / S. Holtz, T. Rohwedder, R. Schneider // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2012. — Т. 34, № 2. — A683—A713.

12. *Oseledets*, *I.* TT-cross approximation for multidimensional arrays [Текст] / I. Oseledets, E. Tyrtyshnikov // Linear Algebra and its Applications. — 2010. — Т. 432, № 1. — С. 70—88.

13. *Sobol*, *I.* Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates [Текст] / I. Sobol // Mathematics and computers in simulation. — 2001. — Т. 55, № 1—3. — С. 271—280.

14. QTT-FE approximation for multiscale problems [Текст] / V. Kazeev [и др.] // Research Report, Seminar for Applied Mathematics. — 2015.

15. QTT-finite-element approximation for multiscale problems I: model problems in one dimension [Текст] / V. Kazeev [и др.] // Advances in Computational Mathematics. — 2017. — Т. 43, № 2. — С. 411—442.

16. *Kazeev*, *V.* Quantized tensor-structured finite elements for second-order elliptic PDEs in two dimensions [Текст] / V. Kazeev, C. Schwab // Numerische Mathematik. — 2018. — Т. 138, № 1. — С. 133—190.
17. Quantized tensor FEM for multiscale problems: diffusion problems in two and three dimensions [Текст] / V. Kazeev [и др.] // Multiscale Modeling & Simulation. — 2022. — Т. 20, № 3. — С. 893—935.
18. *Khoromskij*, *B.* A fast iteration method for solving elliptic problems with quasiperiodic coefficients [Текст] / B. Khoromskij, S. Repin // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2015. — Т. 30, № 6. — С. 329—344.
19. *Dolgov*, *S.* Fast solution of parabolic problems in the tensor train/quantized tensor train format with initial application to the Fokker-Planck equation [Текст] / S. Dolgov, B. Khoromskij, I. Oseledets // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2012. — Т. 34, № 6. — A3016—A3038.
20. *Sun*, *Y.* Numerical solution of high dimensional stationary Fokker-Planck equations via tensor decomposition and Chebyshev spectral differentiation [Текст] / Y. Sun, M. Kumar // Computers & Mathematics with Applications. — 2014. — Т. 67, № 10. — С. 1960—1977.
21. *Sun*, *Y.* A numerical solver for high dimensional transient Fokker-Planck equation in modeling polymeric fluids [Текст] / Y. Sun, M. Kumar // Journal of Computational Physics. — 2015. — Т. 289. — С. 149—168.
22. *Dolgov*, *S.* A tensor decomposition algorithm for large ODEs with conservation laws [Текст] / S. Dolgov // Computational Methods in Applied Mathematics. — 2019. — Т. 19, № 1. — С. 23—38.
23. Grid methods for Bayes-optimal continuous-discrete filtering and utilizing a functional tensor train representation [Текст] / C. Fox [и др.] // Inverse Problems in Science and Engineering. — 2020. — С. 1—19.
24. *Venkiteswaran*, *G.* A QMC approach for high dimensional Fokker-Planck equations modelling polymeric liquids [Текст] / G. Venkiteswaran, M. Junk // Mathematics and Computers in Simulation. — 2005. — Т. 68, № 1. — С. 43—56.