

Hochdimensionale Approximation mit teilweise periodischen Randbedingungen

Pascal Schröter

Rhein-Ruhr-Workshop

11.02.2023



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
IN DER KULTURHAUPTSTADT EUROPAS
CHEMNITZ

Betrachten d -dimensionale Funktionen

$$f: \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{C}, \mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x}).$$

Wir können diese Funktion als Fourierreihe darstellen

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{T}^d$$

mit Fourier-Basisfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \prod_{s=1}^d \exp(2\pi i k_s x_s)$ oder auch Kosinus-Basisfunktionen.

Ziel

Gegeben: $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\} \subset \mathbb{T}^d$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$ mit $f(\mathbf{x}_j) = y_j, j = 1, \dots, M$

Gesucht: $\hat{f}_{\mathbf{k}} \approx c_{\mathbf{k}}(f) \in \mathbb{C}$, endliche Indexmenge $\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^d$,

$$\text{sodass } \tilde{f}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x})$$

Betrachten d -dimensionale Funktionen

$$f: \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{C}, \mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x}).$$

Wir können diese Funktion als Fourierreihe darstellen

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{T}^d$$

mit Fourier-Basisfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \prod_{s=1}^d \exp(2\pi i k_s x_s)$ oder auch Kosinus-Basisfunktionen.

Ziel

Gegeben: $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\} \subset \mathbb{T}^d$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$ mit $f(\mathbf{x}_j) = y_j, j = 1, \dots, M$

Gesucht: $\hat{f}_{\mathbf{k}} \approx c_{\mathbf{k}}(f) \in \mathbb{C}$, endliche Indexmenge $\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^d$,

sodass $\tilde{f}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x})$

Betrachten d -dimensionale Funktionen

$$f: \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{C}, \mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x}).$$

Wir können diese Funktion als Fourierreihe darstellen

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{T}^d$$

mit Fourier-Basisfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \prod_{s=1}^d \exp(2\pi i k_s x_s)$ oder auch Kosinus-Basisfunktionen.

Ziel

Gegeben: $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\} \subset \mathbb{T}^d$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$ mit $f(\mathbf{x}_j) = y_j, j = 1, \dots, M$

Gesucht: $\hat{f}_{\mathbf{k}} \approx c_{\mathbf{k}}(f) \in \mathbb{C}$, endliche Indexmenge $\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^d$,

sodass $\tilde{f}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x})$

Problem: Fluch der Dimensionen, Auswertung der Trigonometrischen Polynome $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_j)$ an den Stellen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, M$ hat mit NFFT die Laufzeit $\mathcal{O}(|\mathcal{I}| \log |\mathcal{I}| + |\log \epsilon|^d M)$

Satz: Zerlegung in ANOVA Terme^①

$$\begin{aligned}
 f &= f_{\emptyset} && \dots 1 \times \text{konstante Funktion} \\
 &+ f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}} && \dots d \times \text{univariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}} && \dots \binom{d}{2} \times \text{bivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}} && \dots \binom{d}{3} \times \text{trivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3,4\}} + f_{\{1,2,3,5\}} + \dots + f_{\{d-3,d-2,d-1,d\}} \\
 &\vdots \\
 &+ f_{\{1,2,\dots,d\}} && \dots 1 \times d\text{-variate Funktion}
 \end{aligned}$$

^①Kuo, F. Y. and Sloan, I. H. and Wasilkowski, G. W. and Woźniakowski, H., **On decompositions of multivariate functions**, Math. Comput., (2010).

Problem: Fluch der Dimensionen, Auswertung der Trigonometrischen Polynome $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_j)$ an den Stellen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, M$ hat mit NFFT die Laufzeit $\mathcal{O}(|\mathcal{I}| \log |\mathcal{I}| + |\log \epsilon|^d M)$

Satz: Zerlegung in ANOVA Terme^①

$$\begin{aligned}
 f &= f_{\emptyset} && \dots 1 \times \text{konstante Funktion} \\
 &+ f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}} && \dots d \times \text{univariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}} && \dots \binom{d}{2} \times \text{bivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}} && \dots \binom{d}{3} \times \text{trivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3,4\}} + f_{\{1,2,3,5\}} + \dots + f_{\{d-3,d-2,d-1,d\}} \\
 &\vdots \\
 &+ f_{\{1,2,\dots,d\}} && \dots 1 \times d\text{-variate Funktion}
 \end{aligned}$$

^①Kuo, F. Y. and Sloan, I. H. and Wasilkowski, G. W. and Woźniakowski, H., **On decompositions of multivariate functions**, Math. Comput., (2010).

Problem: Fluch der Dimensionen, Auswertung der Trigonometrischen Polynome $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_j)$ an den Stellen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, M$ hat mit NFFT die Laufzeit $\mathcal{O}(|\mathcal{I}| \log |\mathcal{I}| + |\log \epsilon|^d M)$

Satz: Zerlegung in ANOVA Terme^①

$$\begin{aligned}
 f &= f_{\emptyset} && \dots 1 \times \text{konstante Funktion} \\
 &+ f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}} && \dots d \times \text{univariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}} && \dots \binom{d}{2} \times \text{bivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}} && \dots \binom{d}{3} \times \text{trivariate Funktionen} \\
 &+ f_{\{1,2,3,4\}} + f_{\{1,2,3,5\}} + \dots + f_{\{d-3,d-2,d-1,d\}} \\
 &\vdots \\
 &+ f_{\{1,2,\dots,d\}} && \dots 1 \times d\text{-variate Funktion}
 \end{aligned}$$

^①Kuo, F. Y. and Sloan, I. H. and Wasilkowski, G. W. and Woźniakowski, H., **On decompositions of multivariate functions**, Math. Comput., (2010).

Problem: Fluch der Dimensionen, Auswertung der Trigonometrischen Polynome $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_j)$ an den Stellen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, M$ hat mit NFFT die Laufzeit $\mathcal{O}(|\mathcal{I}| \log |\mathcal{I}| + |\log \epsilon|^d M)$

Satz: Zerlegung in ANOVA Terme

$$f \approx f_{\emptyset}$$

$$+ f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}}$$

$$+ f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}}$$

$$+ f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}}$$

$$+ f_{\{1,2,3,4\}} + f_{\{1,2,3,5\}} + \dots + f_{\{d-3,d-2,d-1,d\}} \quad \textcircled{2}$$

$$\vdots$$

$$+ f_{\{1,2,\dots,d\}} \quad \textcircled{2}$$

... 1 \times konstante Funktion

... d \times univariate Funktionen

... $\binom{d}{2}$ \times bivariate Funktionen

... $\binom{d}{3}$ \times trivariate Funktionen

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Problem: Fluch der Dimensionen, Auswertung der Trigonometrischen Polynome $\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_j)$ an den Stellen \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, M$ hat mit NFFT die Laufzeit $\mathcal{O}(|\mathcal{I}| \log |\mathcal{I}| + |\log \epsilon|^d M)$

Satz: Zerlegung in ANOVA Terme

$$f \approx f_{\emptyset}$$

$$+ f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}}$$

$$+ f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}}$$

$$+ f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}}$$

$$+ f_{\{1,2,3,4\}} + f_{\{1,2,3,5\}} + \dots + f_{\{d-3,d-2,d-1,d\}} \quad \textcircled{2}$$

$$\vdots$$

$$+ f_{\{1,2,\dots,d\}} \quad \textcircled{2}$$

... 1 \times konstante Funktion

... d \times univariate Funktionen

... $\binom{d}{2}$ \times bivariate Funktionen

... $\binom{d}{3}$ \times trivariate Funktionen

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Gliederung

1. Motivation
2. Orthonormalbasen
3. ANOVA Zerlegung
4. ANOVA Approximation
5. Auswertung von Fourier-Kosinus-Polynomen
6. Anwendung
7. Zusammenfassung

Fourier-Kosinus-Basisfunktionen

Die Funktionen

$$\phi_{\mathbf{k}}^{m,n} : \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{C},$$

$$\phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}) := \left(\prod_{s=1}^m \exp(2\pi i k_s x_s) \right) \cdot \left((\sqrt{2})^{|\text{supp}((k_j)_{j=m+n}^n)|} \prod_{s=m+1}^{m+n} \cos(\pi k_s x_s) \right), \quad \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n$$

bilden eine Orthonormalbasis in $L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$.

Satz

Für alle $f \in L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$ gilt $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n$ mit

$$c_{\mathbf{k}}(f) := \langle f, \phi_{\mathbf{k}}^{m,n} \rangle_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}.$$

ANOVA Terme

Wir bezeichnen die Funktionen

$$f_{\mathbf{u}}: L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \rightarrow \mathbb{C}, \quad f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) := \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \\ \text{supp } \mathbf{k} = \mathbf{u}}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$$

als ANOVA-Terme zur Teilmenge von Indizes $\mathbf{u} \subset \{1, \dots, m+n\}$.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\})} f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$$

Satz

Für alle $f \in L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$ gilt $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n$ mit

$$c_{\mathbf{k}}(f) := \langle f, \phi_{\mathbf{k}}^{m,n} \rangle_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}.$$

ANOVA Terme

Wir bezeichnen die Funktionen

$$f_{\mathbf{u}}: L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \rightarrow \mathbb{C}, \quad f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) := \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \\ \text{supp } \mathbf{k} = \mathbf{u}}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$$

als ANOVA-Terme zur Teilmenge von Indizes $\mathbf{u} \subset \{1, \dots, m+n\}$.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\})} f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$$

Satz

Für alle $f \in L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$ gilt $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n$ mit

$$c_{\mathbf{k}}(f) := \langle f, \phi_{\mathbf{k}}^{m,n} \rangle_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}.$$

ANOVA Terme

Wir bezeichnen die Funktionen

$$f_{\mathbf{u}}: L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \rightarrow \mathbb{C}, \quad f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) := \sum_{\substack{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \\ \text{supp } \mathbf{k} = \mathbf{u}}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$$

als ANOVA-Terme zur Teilmenge von Indizes $\mathbf{u} \subset \{1, \dots, m+n\}$.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\})} f_{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$$

abgeschnittene ANOVA Zerlegung

Wir bezeichnen

$$\mathbb{T}_U f = \sum_{\mathbf{u} \in U} f_{\mathbf{u}}$$

als abgeschnittene ANOVA Zerlegung, wobei $U \subseteq \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\})$, sodass $\mathbb{T}_U f \approx f$ gilt.

Beispiel für $f: \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{C}$ und $U = \{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, d\}) \mid |\mathbf{u}| \leq 2\}$

$$\begin{aligned}
 f &= f_{\emptyset} + f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}} \\
 &\quad + f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}} \\
 &\quad + f_{\{1,2,3\}} + f_{\{1,2,4\}} + \dots + f_{\{d-2,d-1,d\}} \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + f_{\{1,2,\dots,d\}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbb{T}_U f &= f_{\emptyset} + f_{\{1\}} + f_{\{2\}} + \dots + f_{\{d\}} \\
 &\quad + f_{\{1,2\}} + f_{\{1,3\}} + \dots + f_{\{d-1,d\}} \\
 &\quad + \cancel{f_{\{1,2,3\}}} + \cancel{f_{\{1,2,4\}}} + \dots + \cancel{f_{\{d-2,d-1,d\}}} \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + \cancel{f_{\{1,2,\dots,d\}}}
 \end{aligned}$$

abgeschnittene ANOVA Zerlegung

Wir bezeichnen

$$T_U f = \sum_{\mathbf{u} \in U} f_{\mathbf{u}}$$

als abgeschnittene ANOVA Zerlegung, wobei $U \subseteq \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\})$, sodass $T_U f \approx f$ gilt.

Varianz

Wir bezeichnen

$$\sigma^2(f) := \underbrace{\|f\|_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}^2}_{L_2\text{-Norm}} - \underbrace{|c_{\mathbf{0}}(f)|^2}_{\text{Erwartungswert}} = \sum_{\mathbf{k} \in (\mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n) \setminus \{\mathbf{0}\}} |c_{\mathbf{k}}(f)|^2$$

als Varianz der Funktion f .

Globaler Sensitivitätsindex^③

Wir bezeichnen

$$\rho(\mathbf{u}, f) := \frac{\sigma^2(f_{\mathbf{u}})}{\sigma^2(f)}$$

als globalen Sensitivitätsindex der Menge \mathbf{u} der Funktion f .

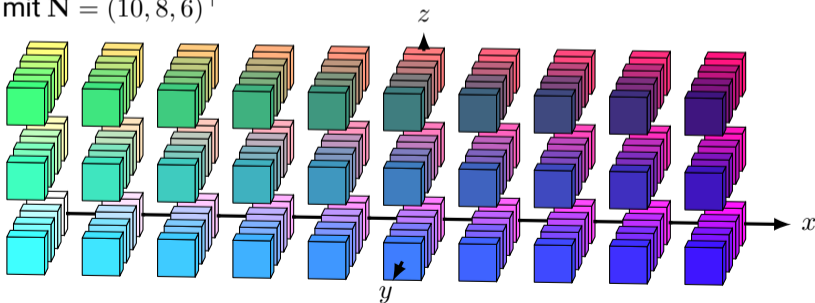
$$\sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\}) \setminus \{\emptyset\}} \rho(\mathbf{u}, f) = \frac{\sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{P}(\{1, \dots, m+n\}) \setminus \{\emptyset\}} \sigma^2(f_{\mathbf{u}})}{\sigma^2(f)} = \frac{\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \setminus \{\mathbf{0}\}} |c_{\mathbf{k}}(f)|^2}{\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \setminus \{\mathbf{0}\}} |c_{\mathbf{k}}(f)|^2} = 1$$

^③ Sobol, I. M., **Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates**, Math. Comput. Simulation, (2001).

Menge der Frequenzen

$$\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n} := \left\{ \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^m \times \mathbb{N}_0^n \mid k_j \geq -\frac{N_j}{2}, j = 1, \dots, m; \quad k_j < \frac{N_j}{2}, j = 1, \dots, m+n \right\}, \mathbf{N} \in (2\mathbb{N})^{m+n}$$

Beispiel: $\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{1,2}$ mit $\mathbf{N} = (10, 8, 6)^\top$



Approximation

Gegeben: $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\} \subseteq \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$ mit $f(\mathbf{x}_j) \approx y_j, j = 1, \dots, M$

Gesucht: $\tilde{f} \in C(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \cap L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$ mit $\tilde{f}(\mathbf{x}_j) \approx y_j, j = 1, \dots, M$

Partialsommenoperator

Wir bezeichnen die Menge $\mathcal{T}_N := \{\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_N^{m,n}} c_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n} \mid c_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}\}$ als Fourier-Kosinus-Polynome bis zum Grad N . Die orthogonale Projektion auf \mathcal{T}_N bezeichnen wir mit

$$S_N: L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \rightarrow \mathcal{T}_N, S_N f(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_N^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$$

Idee: $\tilde{f} := S_N f$

Approximation

Gegeben: $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\} \subseteq \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$ mit $f(\mathbf{x}_j) \approx y_j, j = 1, \dots, M$

Gesucht: $\tilde{f} \in C(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \cap L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n)$ mit $\tilde{f}(\mathbf{x}_j) \approx y_j, j = 1, \dots, M$

Partialsommenoperator

Wir bezeichnen die Menge $\mathcal{T}_N := \{\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_N^{m,n}} c_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n} \mid c_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}\}$ als Fourier-Kosinus-Polynome bis zum Grad N . Die orthogonale Projektion auf \mathcal{T}_N bezeichnen wir mit

$$S_N: L_2(\mathbb{T}^m \times [0, 1]^n) \rightarrow \mathcal{T}_N, S_N f(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_N^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x})$$

Idee: $\tilde{f} := S_N f$

Approximation der Koeffizienten^②

$$\begin{aligned}
 \|f - S_{\mathbf{N}}f\|_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}^2 &= \int_{\mathbb{T}^m \times [0,1]^n} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \\
 &\approx \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M |y_j - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x}_j)|^2 \\
 &= \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2 \\
 (c_{\mathbf{k}}(f))_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} &\approx \hat{\mathbf{f}} := \arg \min_{\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{g}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2
 \end{aligned}$$

→ kleinste Quadrate Verfahren

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Approximation der Koeffizienten^②

$$\begin{aligned}
 \|f - S_{\mathbf{N}}f\|_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}^2 &= \int_{\mathbb{T}^m \times [0,1]^n} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \\
 &\approx \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M |y_j - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x}_j)|^2 \\
 &= \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2 \\
 (c_{\mathbf{k}}(f))_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} &\approx \hat{\mathbf{f}} := \arg \min_{\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{g}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2
 \end{aligned}$$

→ kleinste Quadrate Verfahren

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Approximation der Koeffizienten^②

$$\begin{aligned}
 \|f - S_{\mathbf{N}}f\|_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}^2 &= \int_{\mathbb{T}^m \times [0,1]^n} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \\
 &\approx \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M |y_j - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x}_j)|^2 \\
 &= \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2 \\
 (c_{\mathbf{k}}(f))_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} &\approx \hat{\mathbf{f}} := \arg \min_{\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{g}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2
 \end{aligned}$$

→ kleinste Quadrate Verfahren

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Approximation der Koeffizienten^②

$$\begin{aligned}
 \|f - S_{\mathbf{N}}f\|_{L_2(\mathbb{T}^m \times [0,1]^n)}^2 &= \int_{\mathbb{T}^m \times [0,1]^n} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \\
 &\approx \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M |y_j - S_{\mathbf{N}}f(\mathbf{x}_j)|^2 \\
 &= \frac{1}{|M|} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} c_{\mathbf{k}}(f) \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2 \\
 (c_{\mathbf{k}}(f))_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} &\approx \hat{\mathbf{f}} := \arg \min_{\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}} \sum_{j=1}^M \left| y_j - \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{g}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}_j) \right|^2
 \end{aligned}$$

→ kleinste Quadrate Verfahren

^②Schmischke, M., **Interpretable Approximation of High-Dimensional Data based on the ANOVA Decomposition**, Thesis, Universitätsverlag Chemnitz, (2022).

Fourier-Kosinus-Polynome

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}), \hat{f} \in \mathbb{C}$$

Trigonometrische Polynome

$$f^{\text{exp}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}} \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}} \exp(2\pi i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle), \hat{f}^{\text{exp}} \in \mathbb{C}$$

Mit der NFFT kann $(f^{\text{exp}}(x_j))_{j=1}^M$ in $\mathcal{O}(|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| \log |\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| + |\log \epsilon|^{m+1} M)$ ausgewertet werden

$$|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| = \prod_{j=1}^m N_j$$

Fourier-Kosinus-Polynome

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \hat{f}_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{m,n}(\mathbf{x}), \hat{f} \in \mathbb{C}$$

Trigonometrische Polynome

$$f^{\text{exp}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}} \hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}} \exp(2\pi i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle), \hat{f}^{\text{exp}} \in \mathbb{C}$$

Mit der NFFT kann $(f^{\text{exp}}(x_j))_{j=1}^M$ in $\mathcal{O}(|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| \log |\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| + |\log \epsilon|^m M)$ ausgewertet werden

$$|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,0}| = \prod_{j=1}^m N_j$$

Satz

Sei $\hat{\mathbf{f}} = (\hat{f}_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}$ ein Koeffizientenvektor für ein Fourier-Kosinus-Polynom f . Wir definieren durch

$$\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}} := \begin{cases} 0 & , \exists j > m : k_j = -\frac{N_j}{2} \\ (\sqrt{2})^{-|\text{supp}(k_j)_{j=m+1}^{m+n}|} \hat{f} \left(\begin{pmatrix} (k_j)_{j=1}^m \\ (|k_j|)_{j=m+1}^{m+n} \end{pmatrix} \right) & , \text{sonst} \end{cases}, \mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}$$

den Koeffizientenvektor $\hat{\mathbf{f}}^{\text{exp}} = (\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}})_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}|}$ für das trigonometrische Polynom f^{exp} . Dann gilt folgende Identität zwischen dem Fourier-Kosinus-Polynom f und dem trigonometrischen Polynom f^{exp} ,

$$f(\mathbf{x}) = f^{\text{exp}} \left(\begin{pmatrix} (x_j)_{j=1}^m \\ (\frac{1}{2}x_j)_{j=m+1}^{m+n} \end{pmatrix} \right) \forall \mathbf{x} \in \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n.$$

Folgerung

Fourier-Kosinus-Polynome können mit einer NFFT ausgewertet werden.

Satz

Sei $\hat{\mathbf{f}} = (\hat{f}_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m,n}|}$ ein Koeffizientenvektor für ein Fourier-Kosinus-Polynom f . Wir definieren durch

$$\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}} := \begin{cases} 0 & , \exists j > m: k_j = -\frac{N_j}{2} \\ (\sqrt{2})^{-|\text{supp}(k_j)_{j=m+1}^{m+n}|} \hat{f} \left(\begin{array}{c} (k_j)_{j=1}^m \\ (|k_j|)_{j=m+1}^{m+n} \end{array} \right) & , \text{sonst} \end{cases}, \mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}$$

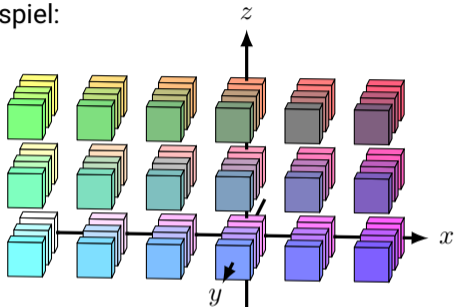
den Koeffizientenvektor $\hat{\mathbf{f}}^{\text{exp}} = (\hat{f}_{\mathbf{k}}^{\text{exp}})_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}} \in \mathbb{C}^{|\mathcal{I}_{\mathbf{N}}^{m+n,0}|}$ für das trigonometrische Polynom f^{exp} . Dann gilt folgende Identität zwischen dem Fourier-Kosinus-Polynom f und dem trigonometrischen Polynom f^{exp} ,

$$f(\mathbf{x}) = f^{\text{exp}} \left(\left(\begin{array}{c} (x_j)_{j=1}^m \\ (\frac{1}{2}x_j)_{j=m+1}^{m+n} \end{array} \right) \right) \forall \mathbf{x} \in \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n.$$

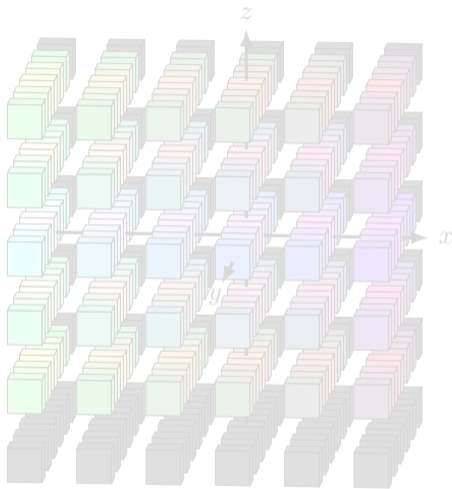
Folgerung

Fourier-Kosinus-Polynome können mit einer NFFT ausgewertet werden.

Beispiel:

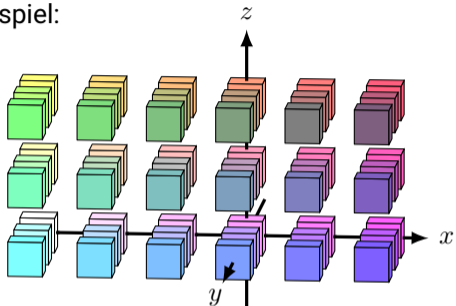


$$\mathcal{I}_{(6,6,6)}^{1,2 \top}$$

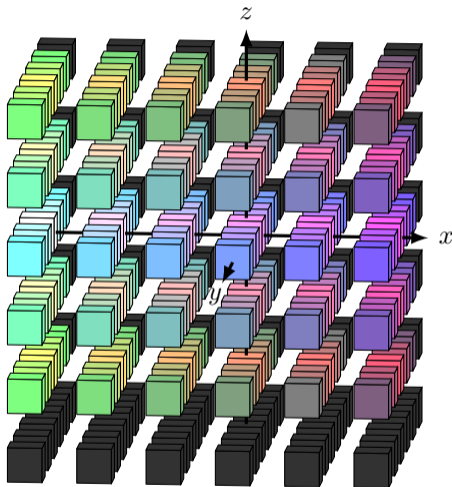


$$\mathcal{I}_{(6,6,6)}^{3,0 \top}$$

Beispiel:

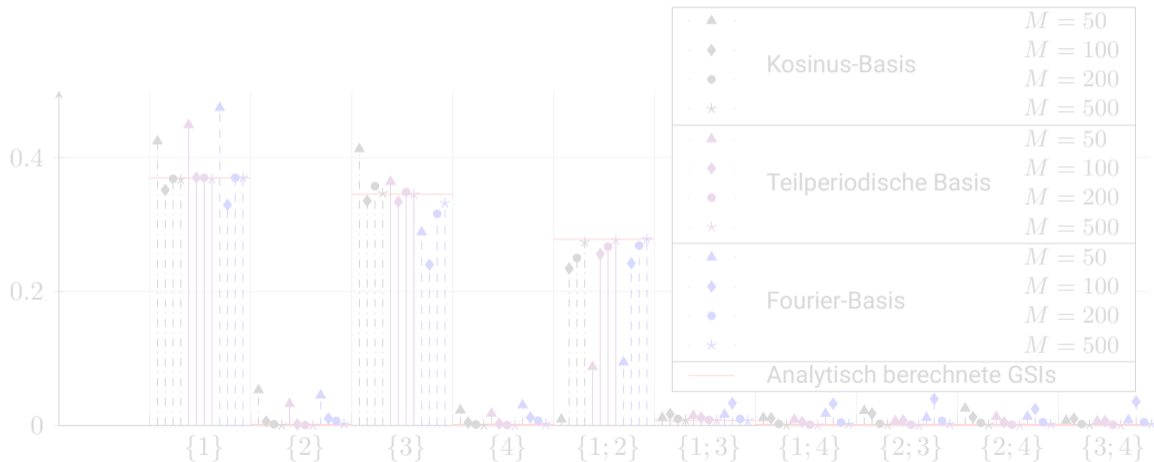


$$\mathcal{I}_{(6,6,6)}^{1,2 \top}$$

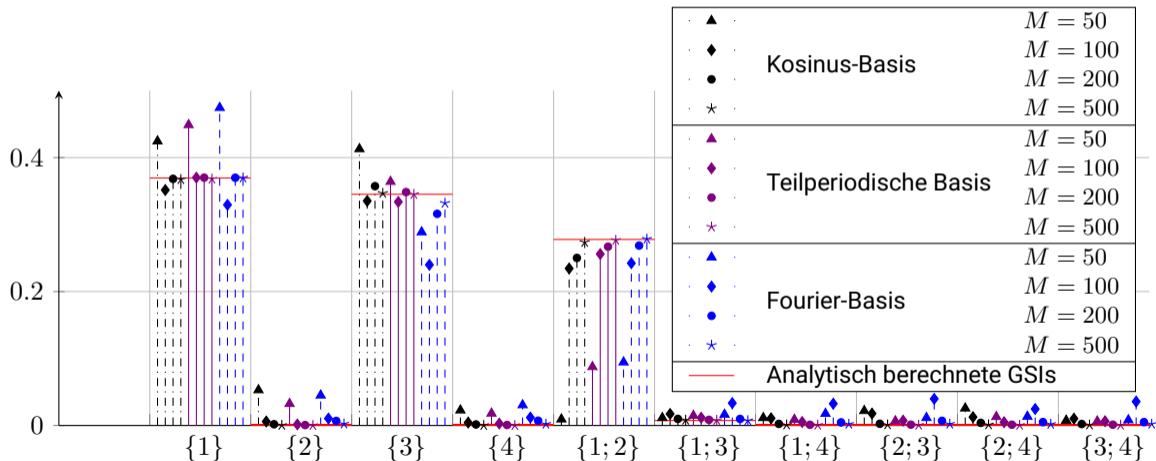


$$\mathcal{I}_{(6,6,6)}^{3,0 \top}$$

$$f: [0, 1]^4 \rightarrow \mathbb{C}, f(x_1, x_2, x_3, x_4) := (2x_1 - 1)^2 x_3 + 10 \sin(2\pi x_1) \left(x_2 - \frac{1}{2}\right)^2 + \exp(x_3)$$

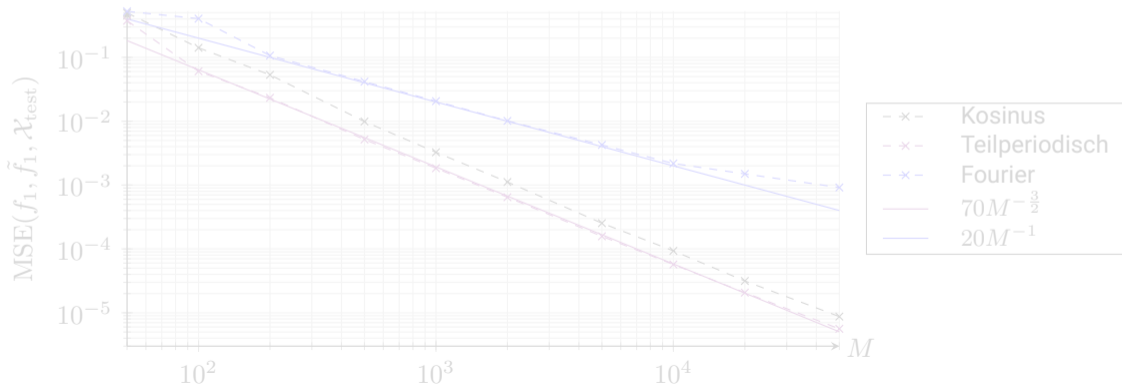


$$f: [0, 1]^4 \rightarrow \mathbb{C}, f(x_1, x_2, x_3, x_4) := (2x_1 - 1)^2 x_3 + 10 \sin(2\pi x_1) \left(x_2 - \frac{1}{2}\right)^2 + \exp(x_3)$$



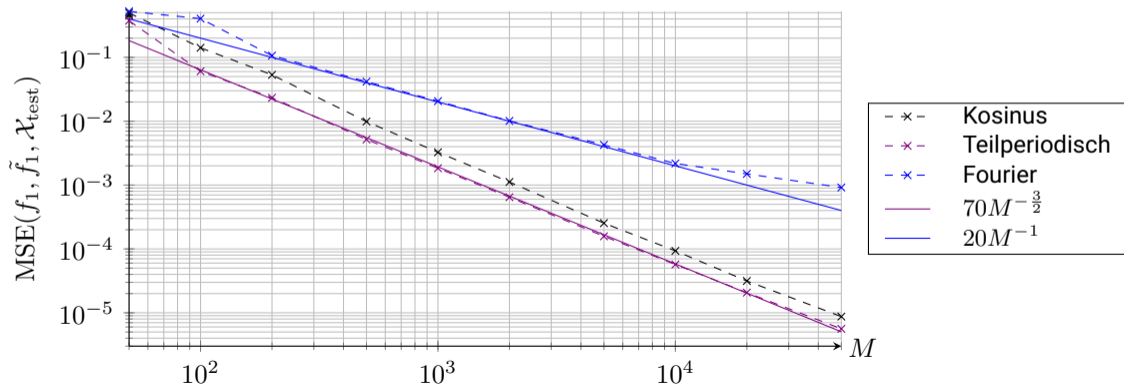
$$f: [0, 1]^4 \rightarrow \mathbb{C}, f(x_1, x_2, x_3, x_4) := (2x_1 - 1)^2 x_3 + 10 \sin(2\pi x_1) \left(x_2 - \frac{1}{2}\right)^2 + \exp(x_3)$$

$$\text{MSE}(f, \tilde{f}, \mathcal{X}_{\text{test}}) := \frac{1}{|\mathcal{X}_{\text{test}}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_{\text{test}}} |f(\mathbf{x}) - \tilde{f}(\mathbf{x})|^2$$



$$f: [0, 1]^4 \rightarrow \mathbb{C}, f(x_1, x_2, x_3, x_4) := (2x_1 - 1)^2 x_3 + 10 \sin(2\pi x_1) \left(x_2 - \frac{1}{2}\right)^2 + \exp(x_3)$$

$$\text{MSE}(f, \tilde{f}, \mathcal{X}_{\text{test}}) := \frac{1}{|\mathcal{X}_{\text{test}}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_{\text{test}}} |f(\mathbf{x}) - \tilde{f}(\mathbf{x})|^2$$



Zusammenfassung

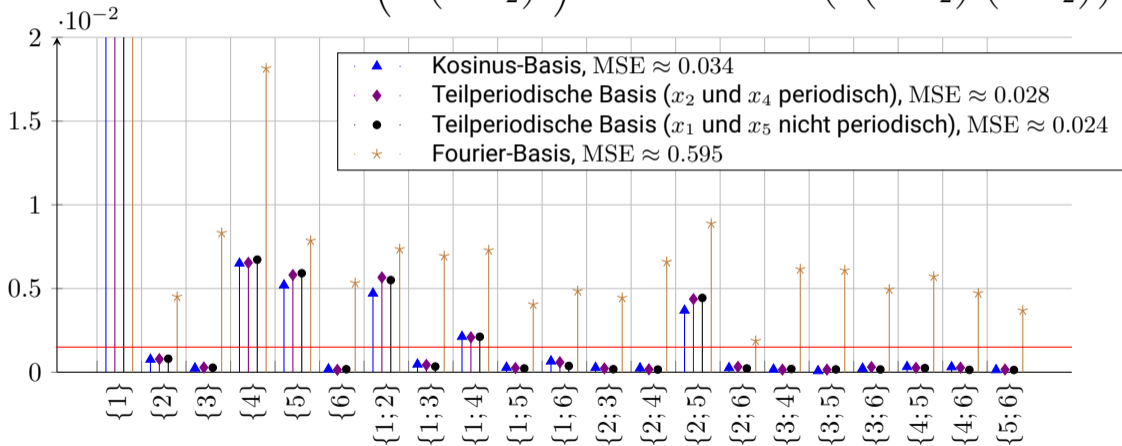
- ▶ Können teilweise periodische Funktionen $f: \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{C}$ approximieren
- ▶ schnell für Funktionen mit hauptsächlich niederdimensionalen Kopplungen
- ▶ Funktionalität ist im ANOVA Paket implementiert als Branch NFFCT
 - ▶ <https://github.com/NFFT/NFFT3.jl/tree/NFFCT>
 - ▶ <https://github.com/NFFT/GroupedTransforms.jl/tree/NFFCT>
 - ▶ <https://github.com/NFFT/ANOVAapprox.jl/tree/NFFCT>
- ▶ Ausblick: Anwendung für Approximation auf \mathbb{B}^d und \mathbb{S}^d

Zusammenfassung

- ▶ Können teilweise periodische Funktionen $f: \mathbb{T}^m \times [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{C}$ approximieren
- ▶ schnell für Funktionen mit hauptsächlich niederdimensionalen Kopplungen
- ▶ Funktionalität ist im ANOVA Paket implementiert als Branch NFFT
 - ▶ <https://github.com/NFFT/NFFT3.jl/tree/NFFT>
 - ▶ <https://github.com/NFFT/GroupedTransforms.jl/tree/NFFT>
 - ▶ <https://github.com/NFFT/ANOVAapprox.jl/tree/NFFT>
- ▶ Ausblick: Anwendung für Approximation auf \mathbb{B}^d und \mathbb{S}^d

Vielen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit

$$f: [0, 1]^6 \rightarrow \mathbb{C}, f(\mathbf{x}) := 5x_1^2 + 3 \left(x_1^2 \left(x_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \right)^3 + \sin(x_1 x_4) + 4 \cos \left(\pi \left(x_2 - \frac{1}{2} \right) \left(x_5 - \frac{1}{2} \right) \right)$$



$$f: [0, 1]^6 \rightarrow \mathbb{C}, f(\mathbf{x}) := 5x_1^2 + 3 \left(x_1^2 \left(x_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \right)^3 + \sin(x_1 x_4) + 4 \cos \left(\pi \left(x_2 - \frac{1}{2} \right) \left(x_5 - \frac{1}{2} \right) \right)$$

MSE($f_1, \tilde{f}_1, \mathcal{X}_{\text{test}}$)			x_1			
			cos		exp	
			x_2		x_2	
			cos	exp	exp	cos
x_4	cos	x_5 cos	0.01995	0.01496	0.33073	0.33592
		exp	0.01971	0.01457	0.33329	0.33557
	exp	x_5 exp	0.02385	0.01873	0.32361	0.33935
		cos	0.02409	0.01927	0.33555	0.33948

d -dimensionale Kugelkoordinaten

$$q_d: \mathbb{T} \times [0, 1]^{d-1} \rightarrow \mathbb{B}^d, \quad q_d(x_1, \dots, x_d) := \begin{pmatrix} x_d \cos(\pi x_{d-1}) \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \cos(\pi x_{d-2}) \\ \vdots \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \dots \sin(\pi x_2) \cos(2\pi x_1) \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \dots \sin(\pi x_2) \sin(2\pi x_1) \end{pmatrix}$$

Basisfunktionen auf Kugeln

Die Funktionen

$$\phi_{\mathbf{k}}^{d, \mathbb{B}}: \mathbb{B}^d \rightarrow \mathbb{C}, \quad \phi_{\mathbf{k}}^{d, \mathbb{B}}(\mathbf{y}) := (\phi_{\mathbf{k}}^{1, d-1} \circ q_d^{-1})(\mathbf{y}), \quad \mathbf{k} \in \mathbb{Z} \times \mathbb{N}_0^{d-1}$$

bilden eine Orthonormalbasis in $L_2(\mathbb{B}^d, |\det(J_{q_d^{-1}})|)$.

d -dimensionale Kugelkoordinaten

$$q_d: \mathbb{T} \times [0, 1]^{d-1} \rightarrow \mathbb{B}^d, \quad q_d(x_1, \dots, x_d) := \begin{pmatrix} x_d \cos(\pi x_{d-1}) \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \cos(\pi x_{d-2}) \\ \vdots \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \dots \sin(\pi x_2) \cos(2\pi x_1) \\ x_d \sin(\pi x_{d-1}) \dots \sin(\pi x_2) \sin(2\pi x_1) \end{pmatrix}$$

Basisfunktionen auf Kugeln

Die Funktionen

$$\phi_{\mathbf{k}}^{d, \mathbb{B}}: \mathbb{B}^d \rightarrow \mathbb{C}, \quad \phi_{\mathbf{k}}^{d, \mathbb{B}}(\mathbf{y}) := (\phi_{\mathbf{k}}^{1, d-1} \circ q_d^{-1})(\mathbf{y}), \quad \mathbf{k} \in \mathbb{Z} \times \mathbb{N}_0^{d-1}$$

bilden eine Orthonormalbasis in $L_2(\mathbb{B}^d, |\det(J_{q_d^{-1}})|)$.