

Farklı yüksek boyutlu model gösterilim algoritmalarının çok değişkenli interpolasyon uygulamaları

Mehmet Alper TUNGA*, **Metin DEMİRALP**

İTÜ Bilişim Enstitüsü, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programı, 34469, Maslak, İstanbul

Özet

Bu çalışmada N adet bağımsız değişkene bağlı olan birçok değişkenli fonksiyonun değerlerinin bağımsız değişkenlerin sonlu sayıda değer takımı için verildiği ve fonksiyonun analitik yapısının istendiği çok değişkenli interpolasyon problemlerinin daha az değişkenli interpolasyon problemlerine indirgenmesi amaçlanmıştır. Böylelikle, hesaplama karmaşıklığı düşürülecek ve problemin bilgisayar ortamında programlanması da kolaylaşacaktır. Bu amaçla, N değişkenli bir interpolasyon problemi N adet tek bağımsız değişkenli interpolasyon problemi haline getirilmektedir. Belirtilen indirgeme için ilk olarak I.M. Sobol tarafından tasarlanan Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (YBMG) yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntem çok değişkenli verinin hiperprizmatik örgünün tüm düğümlerinde verildiği problemlerde veri bölümlenmesinde kullanılmaktadır. Bölümleme sonucunda elde edilen tek değişkenli veri kümesinden çok değişkenli fonksiyon için aranan analitik yapı yaklaşık olarak elde edilebilmektedir. Yöntemin temel felsefesini oluşturan sonlu terimden oluşan açılımın yapısı baskın olarak toplamsal özellikler taşıyan çokdeğişkenli veri kümelerine ait interpolasyon problemlerinde gerçek sonuca yakın gösterimler elde etmeyi sağlamaktadır. Aranan analitik yapı, yani verilen çok değişkenli veri kümesinin yapısı, toplamsal özelliklerden uzaklaşıp çarpımsal veya melez özelliklere sahip olmaya başladığında YBMG yönteminin verimi düşmektedir. Bu bağlamda alternatif yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu amaçla, problemde verilen veri takımının yapısına göre Çarpımsallaştırılmış Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (ÇYBMG) ve Melez Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (MYBMG) yöntemleri de oluşturulmuştur. Belirtilen bu yöntemler YBMG yöntemi aracılığıyla bölümlenmiş veriyi kullanarak çarpımsal veya melez yapıya sahip fonksiyonlar için daha iyi yaklaşıklık elde eden gösterimler oluşturmayı hedeflemektedir.

Anahtar Kelimeler: Yüksek boyutlu model gösterilim, çokdeğişkenli fonksiyonlar, interpolasyon, yaklaştırım.

*Yazışmaların yapılacağı yazar: Mehmet Alper TUNGA. alper@isikun.edu.tr; Tel: (216) 528 71 47.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Bilişim Enstitüsü'nde tamamlanmış olan "Data partitioning and multivariate interpolation via various high dimensional model representations (Çeşitli yüksek boyutlu model gösterimleri ile veri bölümlenmesi ve çokdeğişkenli interpolasyon)" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 31.03.2006 tarihinde dergiye ulaşmış, 18.04.2006 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 30.06.2007 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

Multivariate interpolation applications of different high dimensional model representations

Extended abstract

In this work, the main purpose is to reduce the multivariate interpolation problems to the less-variate interpolation problems in which the values of a multivariate function having N number of independent variables are given for a finite number of data and it is asked to determine an analytical structure for this function. As a result, the computational complexity of the problem will decrease and it will become easier to write programs for the computer-based applications. For this purpose, a package of N number of univariate interpolation problems is constructed from a N dimensional interpolation problem. High Dimensional Model Representation (HDMR) method is developed for the mentioned reduction process of the interpolation problem to determine approximate representation for the analytical structure of the sought function. HDMR is a divide – conquer method and was first proposed by I.M. Sobol, then generalized by H. Rabitz. HDMR has an expansion for a given multivariate function such that its components are ordered starting from a constant component (zeroth order multivariance) and continuing in ascending multivariance, that is, univariate, bivariate, trivariate components and so on. Components of this representation are determined by using an imposition of vanishing integrals. Since the main purpose of this work is to partition the given multivariate data into lower variate data, HDMR algorithm is reconstructed for data partitioning. This new method can be used for partitioning the data of multivariate interpolation problems in which the values of the sought function are given at all nodes of the hyperprismatic grid. Using these partitioned data the analytical structure for the sought function is obtained through Lagrange interpolation formula. When the nature of the HDMR expansion given below and the numerical implementations are examined it is seen that new methods are needed to obtain better approximate representations when the sought function does not have purely or dominantly additive nature. Hence, it can be said that the nature of the sought multivariate function and the features of the given data set have characteristic roles on the development of these methods. The sought function may have a multiplicative or an intermediate nature.

Certain other methods are developed for interpolation problems having these types of structures.

Factorized form of the HDMR method is called Factorized High Dimensional Model Representation (FHDMR). This method has a multiplicative expansion and the components of FHDMR expansion are evaluated by making comparisons between the HDMR and the FHDMR expansions of the multivariate function. To construct a unique comparison procedure certain idempotent operators are inserted into the HDMR expansion. After inserting these mentioned operators and expanding the FHDMR expansion into an additive expression, relations for FHDMR components of the multivariate function can be obtained in terms of the components of the data partitioning technique.

In most cases the nature of the given multivariate data and the sought multivariate function have neither a purely additive nor a purely multiplicative nature. They have a hybrid nature. So, a new method is developed to obtain better results and it is called Hybrid High Dimensional Model Representation (HHDMR). This new method has an expansion including both the HDMR and the FHDMR expansions of the multivariate function through a hybridity parameter. The main problem in this method is to determine the best value for this parameter to obtain the best representation in the given interpolation problem. A cost functional is defined to obtain this mentioned value for the hybridity parameter. Another cost functional is defined to find the best representation obtained through three methods that were mentioned; HDMR, FHDMR and HHDMR for the sought multivariate function. Several numerical implementations are also given in this paper to test the efficiency of all these three methods. Various test functions are selected to examine the performance of the given methods. When the norm values, defined for finding the best representation, obtained for each representation method in the implementations are examined the best representation for the purely or dominantly additive functions are obtained through HDMR method. If the sought function has a purely or dominantly multiplicative nature, FHDMR method gives the best representation. On the other hand when the sought function has an intermediate nature then HHDMR method is needed to determine a better representation.

Keywords: High dimensional model representation, multivariate functions, interpolation, approximation.

Giriş

Doğal, Uygulamalı ve de Sosyal Bilimler'in birçok dalında olduğu gibi Kuramsal ve Uygulamalı Mekaniğin de birçok alt alanında değişken sayısı 3'ten çok olan fonksiyonlarla karşılaşılır. Bu çok değişkenlilik, sayıtsal (istatistik) ya da kuvantum tabanlı olan çok serbestlik dereceli sistemlerde olağanüstü büyük değerlere tırmanabilir. Bu durumlarda, ilgilenilen fonksiyon ister analitik olarak isterse sayısal değer çizelgesiyle verilsin, incelemelerin alışlagelmişlerin dışında yöntem gerektireceği akla gelir. Bu çalışmada bu doğrultuda bir yapılandırım sergilenmektedir.

N adet bağımsız değişkene bağlı olan ve genel olarak $f(x_1, \dots, x_N)$ şeklinde gösterilen bir çok değişkenli fonksiyonun analitik yapısı yerine sonlu sayıda değer takımı için değerlerinin verildiği interpolasyon problemlerinin çözümü N sayısının büyümesi durumunda sorunlar yaratır. Böyle durumlarda problemi çok değişkenli interpolasyon yerine az sayıda değişkenli interpolasyon problemi haline getirmek yararlı olabilir. Bu tür problemlerde böl-yönet algoritmaları kullanılabilir. Sobol (Sobol, 1993; Sobol 2003) tarafından tasarılan Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (YBMG) algoritması taban alınarak geliştirilen çeşitli algoritmalar böl-yönet felsefesi ile ortaya çıkmıştır. Bu yöntem daha sonraları Herschel Rabitz (Rabitz ve Alış, 1999; Alış ve Rabitz, 2001; Li, Rosenthal ve Rabitz, 2001; Li, Wang ve Rabitz, 2002) ve Metin Demiralp (Demiralp, 2003; Baykara ve Demiralp, 2003) tarafından çeşitli araştırma alanlarında uygulanmak üzere geliştirilmiştir.

Ortaya çıkan interpolasyon problemlerindeki değer takımlarının özellikleri fonksiyonun yapısını belirlediği gibi Yüksek Boyutlu Model Gösterilim algoritmalarının seçimini de etkilemektedir. Verilen değer takımı her bir bağımsız değişkene ait olan noktalar kümesinin bir kartezyen çarpımı şeklinde oluşturulmuş ise dik koordinat sisteminde çalışılmaktadır. Bu yapının elde edilmesi amacıyla uygun bir ağırlık fonksiyonu tanımlanmalıdır. Buna bağlı olarak da Yüksek Boyutlu Model Gösterilim algoritması kullanılabilir (Demiralp ve Tunga, 2001). Bu

çalışmada bu tür verilerin içerildiği interpolasyon problemlerine yönelik geliştirilen algoritmalarından sözedilecektir.

Öte yandan fonksiyonun toplamsal veya çarpımsal özellikler taşımasına göre ya da her iki özelliği içeren bir yapıda olmasına göre kullanılacak algoritma farklılıklar göstermektedir. Yalnızca, toplamsal özelliklere sahip bir fonksiyona ait, kartezyen çarpım ile oluşturulmuş, bir değer takımı verildiğinde daha önce sözedilen Yüksek Boyutlu Model Gösterilim algoritması kullanılabilirken, çarpımsal özelliklere sahip bir fonksiyon için bu algoritmadan elde edilen bileşenlerin de yardımıyla oluşturulan Çarpımsallaştırılmış Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (ÇYBMG) algoritması kullanılabilir (Tunga ve Demiralp, 2004).

İncelenebilecek bir başka durum ise, fonksiyonun hem toplamsal hem de çarpımsal özellikler taşıyabileceği durumdur. Böyle bir durumda hem Yüksek Boyutlu Model Gösterilim algoritması hem de Çarpımsallaştırılmış Yüksek Boyutlu Model Gösterilim algoritması aynı algoritma içerisinde aynı anda kullanılarak oluşturulan Melez Yüksek Boyutlu Model Gösterilim (MYBMG) algoritması gündeme getirilebilir (Tunga ve Demiralp, 2003).

Bu çalışmada, belirtilen bu algoritmaların, analitik yapıları daha önceden bilinen, fonksiyonlara ait değer takımları üzerindeki uygulamaları ve gerçek yapılar ile bulunan yaklaşık yapılar arasındaki ilişkiler vurgulanmak istenmektedir. Bu amaca yönelik olarak burada bu algoritmaların yapısından kısaca sözedilecektir.

Yüksek boyutlu model gösterilim

Verilen bir $f(x_1, \dots, x_N)$ çok değişkenli fonksiyonu için YBMG açılımı aşağıdaki eşitlikle verilebilir.

$$f(x_1, \dots, x_N) = f_0 + \sum_{i_1=1}^N f_{i_1}(x_{i_1}) + \sum_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 < i_2}}^N f_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2}) + \dots + f_{12 \dots N}(x_1, \dots, x_N) \quad (1)$$

Burada verilen açılımın sağ yanında bulunan terimler aşağıda verilen koşulu sağlayacak şekilde bulunmaktadır.

$$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \cdots \int_{a_N}^{b_N} dx_N W(x_1, \dots, x_N) f_i(x_i) = 0, \quad (2)$$

$$1 \leq i \leq N$$

Yukarıda verilen koşula ait bağıntıda bulunan $W(x_1, \dots, x_N)$ ağırlık fonksiyonu tek değişkenli fonksiyonların çarpımından oluşturulmuş bir fonksiyondur.

$$W(x_1, \dots, x_N) = \prod_{j=1}^N W_j(x_j), \quad (3)$$

$$x_j \in [a_j, b_j] \quad 1 \leq j \leq N$$

Denklem (2)'de verilen koşul aşağıda verilen diklik koşuluna karşılık gelmektedir.

$$(f_{i_1 i_2 \dots i_k}, f_{i_1 i_2 \dots i_l}) = 0, \quad (4)$$

$$\{i_1, \dots, i_k\} \neq \{i_1, \dots, i_l\}, \quad 1 \leq k, l \leq N$$

Burada diklik koşulu bir iççarpım üzerinden tanımlanmakta ve Denklem (1)'de verilen gerek $f(x_1, \dots, x_N)$ fonksiyonunun gerekse sağ yandaki bileşenlerin karesi integre edilebilen fonksiyonlar olduğu varsayılmaktadır. Kare integraler ve iççarpım, bağımsız değişkenler için baştan belirlenen belli bir aralık üzerinde tanımlanmakta ve her bir değişken için o değişkene bağlı olarak verilen bir ağırlık fonksiyonu kullanılmaktadır.

$$(u, v) \equiv \int_{a_1}^{b_1} dx_1 W_1(x_1) \cdots \int_{a_N}^{b_N} dx_N W_N(x_N) \times (5)$$

$$\times u(x_1, \dots, x_N) v(x_1, \dots, x_N)$$

Ayrıca yukarıda sözü edilen bileşenlerin kolayca saptanabilmesi için, ağırlık fonksiyonlarının herbirinin ilgili aralık üzerindeki integralinin 1 olduğu yani,

$$\int_{a_j}^{b_j} dx_j W_j(x_j) = 1, \quad 1 \leq j \leq N \quad (6)$$

eşitliğinin geçerli olduğu da varsayılmaktadır.

Bu çalışma çok değişkenli interpolasyon amaçlı olduğundan her bir bağımsız değişkenin $(-\infty, \infty)$ aralığında değer aldığı varsayılmaktadır. $f(x_1, \dots, x_N)$ fonksiyonunun yapısının analitik bir şekilde olması yerine bir çizelge üzerinden x_1, \dots, x_N bağımsız değişkenlerinin tanımladığı Euclid uzayında verilen sonlu sayıda noktada aldığı değerler biçiminde verilmekte olduğu düşünülmektedir. Euclid uzayındaki noktalar ise kartezyen çarpım üzerinden tanımlanmaktadır. Bu tanım için önce x_j değişkeninin alabileceği değer takımı aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır.

$$\kappa_j = \left\{ \xi_j^{(k_j)} \right\}_{k_j=1}^{k_j=n_j} = \left\{ \xi_j^{(1)}, \dots, \xi_j^{(n_j)} \right\} \quad (7)$$

$$1 \leq j \leq N$$

Bu değer takımlarından aşağıdaki kartezyen çarpıma geçilebilir.

$$\kappa \equiv \kappa_1 \times \kappa_2 \times \cdots \times \kappa_N \quad (8)$$

κ 'nın açık tanımı aşağıdaki biçimde verilebilir.

$$\kappa \equiv \{ \tau \mid \tau = (x_1, \dots, x_N), x_j \in \kappa_j, 1 \leq j \leq N \} \quad (9)$$

İnterpolasyon için geliştirilmesi gereken yapı $f(x_1, \dots, x_N)$ fonksiyonunun yalnızca bu noktadaki değerlerini içermelidir. Dolayısıyla, $f(x_1, \dots, x_N)$ üzerinde alınması gereken integraler de salt bu noktadaki $f(x_1, \dots, x_N)$ değerlerini içermelidir. Bu yapı, ağırlık fonksiyonunun bu amaca göre yapılandırılması ile sağlanabilir. Bu amaçla yapılması gereken eylem ağırlık fonksiyonunun bir takım Dirac delta fonksiyonlarının (Zemanian, 1987) doğrusal birleşimi olarak tanımlanmasıdır.

$$W_j(x_j) = \sum_{k_j=1}^{n_j} \alpha_{k_j}^{(j)} \delta(x_j - \xi_j^{(k_j)}) \quad (10)$$

$$x_j \in [a_j, b_j] \quad 1 \leq j \leq N$$

Bu ana kadar verilen ağırlık fonksiyonu tanımlaması, özellikleri ve ortogonalite koşulları sayesinde Denklem (1)'in sağ yanında bulunan gösterilimin bileşenlerinden f_0 değişiminin belirlenmesi için (1) eşitliğinin her iki yanını $W_1(x_1) \cdots W_N(x_N)$ ile çarpılır ve bağımsız değişkenlerin tanımladığı Euclid uzayının tümü üzerinde integrali alınacak olursa:

$$f_0 = \sum_{\tau \in \mathcal{K}} \zeta(\tau) f(\tau), \quad (11)$$

$$\tau = (\xi_1^{(k_1)}, \dots, \xi_N^{(k_N)}) \Leftrightarrow \zeta(\tau) = \alpha_1^{(k_1)} \cdots \alpha_N^{(k_N)}, \quad (12)$$

$$1 \leq k_j \leq n_j, \quad 1 \leq j \leq N$$

sonucuna ulaşılır. $f_m(x_m)$ büyüklüğünün belirlenmesi için ise yine (1)'in her iki yanını $W_1(x_1) \cdots W_{m-1}(x_{m-1}) W_{m+1}(x_{m+1}) \cdots W_N(x_N)$ ile çarpılarak, x_m dışındaki tüm bağımsız değişkenlerin oluşturduğu Euclid uzayı üzerinde integrali alınacak olursa:

$$f_m(\xi_m^{(k_m)}) = \sum_{\tau_m \in \mathcal{K}^{(m)}} \zeta_m(\tau_m) f(\tau_m, \xi_m^{(k_m)}) - \sum_{\tau \in \mathcal{K}} \zeta(\tau) f(\tau), \quad (13)$$

$$\mathcal{K}^{(m)} \equiv \left\{ \begin{array}{l} \tau_m \mid \tau_m = (x_1, \dots, x_{m-1}, x_{m+1}, \dots, x_N), \\ x_j \in \mathcal{K}_j, \quad 1 \leq j \leq N, \quad j \neq m \end{array} \right\} \quad (14)$$

$$\xi_m^{(k_m)} \in \mathcal{K}_m, \quad 1 \leq k_m \leq n_m, \quad 1 \leq m \leq N$$

elde edilir. Böylece, $f_m(x_m)$ fonksiyonu için analitik bir yapı yerine n_m adet ikili (x_m 'ye karşı $f_m(x_m)$) değer takımı içeren bir çizelge elde edilir. Bu çizelge $f_m(x_m)$ fonksiyonunun varsayılan bir yapı altında belirlenmesine yani interpolasyon yapılmasına olanak sağlar. Böylelikle, çok değişkenli interpolasyon, en azından bu fonksiyonlar için, tek değişkenli interpolasyona indirgenmiş olur. Fonksiyonun genel yapısının bulunabilmesi için analitik bir yapının tanımlanmasına veya bir hesaplama kuralına gereksinim vardır. Eğer YBMG ile saptanacak olan fonksiyon yeterince düzgün ise, ilgili ara-

lıkların kartezyen çarpımı ile oluşturulan sürekli bölgeye ait tüm bağımsız değişkenlerin çokterimlisi ile yaklaştırılabilecektir. Bu amaçla, aşağıdaki çokterimli oluşturulabilir.

$$p_m(x_m) = \sum_{k_m=1}^{n_m} L_{k_m}(x_m) f_m(\xi_m^{(k_m)}), \quad (15)$$

$$\xi_m^{(k_m)} \in \mathcal{K}_m, \quad 1 \leq m \leq N$$

Burada bulunan $L_{k_m}(x_m)$ çokterimlileri, fonksiyonun yapısına bağlı olmayan Lagrange çokterimlileridir. Lagrange çokterimlilerinin belirlenmesi ile birlikte Denklem (15)'de verilen $p_m(x_m)$ tek bağımsız değişkenli fonksiyonları elde edilir. Bu fonksiyonlar, YBMG ile yaklaştırım yaparken kullanılan fonksiyonlardır. Bu fonksiyonlar ile değişmez terimin toplamının oluşturduğu açılım interpolasyon noktaları belli olan fonksiyona yaklaştırımın gerçekleşmesini sağlamaktadır. Bu yaklaştırım aşağıda verilmektedir.

$$f(x_1, \dots, x_N) \approx f_0 + \sum_{m=1}^N p_m(x_m) \quad (16)$$

Çarpımsallaştırılmış YBMG

Bu gösterilim özellikle çarpımsal özelliklere sahip çok değişkenli fonksiyonların analitik yapısının bulunmasında kullanılabilir olan bir açılıma sahiptir.

$$f(x_1, \dots, x_N) = r_0 \left[\prod_{i=1}^N (1 + r_{i_1}(x_{i_1})) \right] \times \left[\prod_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 < i_2}}^N (1 + r_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2})) \right] \times \cdots \times \left[(1 + r_{12 \dots N}(x_1, \dots, x_N)) \right] \quad (17)$$

Verilen bu bağıntı ile (1)'de verilen bağıntı arasında karşılaştırmalar yapılarak yeni bağıntılar elde edilebilir. Bu bağlamda karşılaştırma yapmak amacıyla aşağıdaki özelliklere sahip olan idempotent operatörler kullanılabilir.

$$I_j^{(id)} I_k^{(id)} \equiv I_k^{(id)} I_j^{(id)}, \quad [I_j^{(id)}]^2 \equiv I_j^{(id)}, \quad (18)$$

$j, k = 1, 2, \dots, N$

(1) ve (17)'de verilen bağıntılar belirtilen operatör kullanılarak

$$f(x_1, \dots, x_N) = f_0 I + \sum_{i_1=1}^N f_{i_1}(x_{i_1}) I_{i_1}^{(id)} + \sum_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 < i_2}}^N f_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2}) I_{i_1}^{(id)} I_{i_2}^{(id)} + \dots \quad (19)$$

$$f(x_1, \dots, x_N) = r_0 \left[\prod_{i_1=1}^N (I + r_{i_1}(x_{i_1}) I_{i_1}^{(id)}) \right] \times \left[\prod_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 < i_2}}^N (I + r_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2}) I_{i_1}^{(id)} I_{i_2}^{(id)}) \right] \times \dots \quad (20)$$

şeklinde yeniden yazılırsa ve operatörün ilgili katsayıları birbirleri ile eşleştirilirse aşağıdaki değişmez terim ve tek değişkenli bileşen elde edilir.

$$r_0 = f_0 \quad (21)$$

$$r_{i_1}(x_{i_1}) = \frac{f_{i_1}(x_{i_1})}{f_0} \quad (22)$$

Burada verilen bağıntıların sağ yanında bulunan bileşenler çok değişkenli fonksiyonun YBMG terimleridir. Böylece bu terimler kullanılarak ÇYBMG bileşenleri elde edilmiş olur. Bu bileşenler kullanılarak fonksiyonun ÇYBMG yaklaşımını sadece değişmez terim ile tek değişkenli terimler kullanılarak aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$f(x_1, \dots, x_N) \approx f_0 \prod_{i_1=1}^N \left(1 + \frac{f_{i_1}(x_{i_1})}{f_0} \right) \quad (23)$$

Melez YBMG

Toplamsal ve çarpımsal özelliklerin aynı anda bulunduğu bir fonksiyon yapısı gündeme geldi-

ğinde Melez Yüksek Boyutlu Model Gösterilim kullanılabilir. Bu durumda γ melezlik değiştirgeni olmak üzere

$$f(x_1, \dots, x_N) = \gamma \left(f_0 + \sum_{i_1=1}^N f_{i_1}(x_{i_1}) + \dots \right) + (1-\gamma) \left(r_0 \left[\prod_{i_1=1}^N (1 + r_{i_1}(x_{i_1})) \right] \times \dots \right) \quad (24)$$

anlatımı gündeme gelmektedir. Bu anlatım gözönüne alındığında bir yaklaşım

$$f(x_1, \dots, x_N) \approx h_{jk}(x_1, \dots, x_N; \gamma) \equiv \gamma S_j(x_1, \dots, x_N) + (1-\gamma) P_k(x_1, \dots, x_N) \quad (25)$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu yaklaşımın elemanları fonksiyonun analitik yapısını yaklaşık olarak betimleyecek (24) bağıntısını oluşturmaktadır. Bu elemanların genel yapısı; $S_j(x_1, \dots, x_N)$ YBMG yaklaşımını ve $P_k(x_1, \dots, x_N)$ ise ÇYBMG yaklaşımını göstermek üzere

$$S_j(x_1, \dots, x_N) = S_{j-1}(x_1, \dots, x_N) + \sum_{\substack{i_1, \dots, i_j=1 \\ i_1 < \dots < i_j}}^N f_{i_1 \dots i_j}(x_{i_1}, \dots, x_{i_j}), \quad 1 \leq j \leq N \quad (26)$$

ve

$$P_k(x_1, \dots, x_N) = P_{k-1}(x_1, \dots, x_N) \times \left[\prod_{\substack{i_1, \dots, i_k=1 \\ i_1 < \dots < i_k}}^N (1 + r_{i_1 \dots i_k}(x_{i_1}, \dots, x_{i_k})) \right], \quad 1 \leq k \leq N \quad (27)$$

şeklinde. Bu çalışmada verilen çok değişkenli veri en fazla tek değişkenli veri takımı cinsinden bölümlendiği ve değişmez terim ile tek değişkenli YBMG ve ÇYBMG terimleri kullanıldığı için Melez YBMG aracılığıyla en iyi sonucu alabilmek amacıyla h_{11} yaklaşımını gündeme getirilecektir.

$$h_{11}(x_1, \dots, x_N; \gamma) \equiv \gamma \mathcal{S}_1(x_1, \dots, x_N) + (1 - \gamma) P_1(x_1, \dots, x_N) \quad (28)$$

Bundan sonraki adım, melezlik değiştirgeninin yukarıda verilen yaklaşıran ile en iyi sonucun alınması için gerekli olan değerinin saptanmasıdır. Bu amaçla aşağıdaki fonksiyonel tanımlanmaktadır.

$$F(x_1, \dots, x_N; \gamma) \equiv \|f(x_1, \dots, x_N) - h_{11}(x_1, \dots, x_N; \gamma)\|^2 \quad (29)$$

Burada verilen normu en küçük yapan γ değeri aranan değer olacaktır. Bu nedenle aşağıdaki kısmi türevin sonucu hesaplanmalıdır.

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma} = 0 \quad (30)$$

Bu normun hesaplanabilmesi için Denklem (10)'da verilen ağırlık fonksiyonu ve Denklem (28)'de verilen MYBMG yaklaşıranının açık hali kullanılacaktır. Gerekli hesaplamalar yapıldığında

$$F(x_1, \dots, x_N; \gamma) \equiv \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) \times \left[f(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) - \gamma \mathcal{S}_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) - (1 - \gamma) P_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \right]^2 \quad (31)$$

sonucuna ulaşılır. Denklem (30)'da belirtilen kısmi türev alınırsa aşağıdaki sonuç elde edilir.

$$\gamma = \frac{A_2 + A_3 - A_4 - A_5}{A_1 + A_2 - 2A_5} \quad (32)$$

Bu sonuçta kullanılan kısaltmalar ise denklem 33'te tanımlanmıştır.

Bu ifadelerden elde edilen γ değeri Denklem (28)'de verilen bağıntıda yerine konursa analitik yapısı aranan çok değişkenli fonksiyona ait Melez YBMG yaklaşıranı elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned} A_1 &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) \mathcal{S}_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)})^2 \\ A_2 &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) P_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)})^2 \\ A_3 &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) f(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \times \mathcal{S}_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \\ A_4 &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) f(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \times P_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \\ A_5 &= \sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) \mathcal{S}_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \times P_1(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \end{aligned} \quad (33)$$

En iyi gösterilimin bulunması

Bu çalışmada değişmez ve tek değişkenli terimler kullanılarak YBMG, ÇYBMG ve MYBMG yaklaşıranları oluşturuldu. Oluşturulan bağıntılar ve problemde verilen veri takımı eşliğinde analitik yapısı aranan birçok değişkenli fonksiyona yaklaşık bir gösterilim elde edilebilmektedir. Ancak elde edilen bu yapıların hangisinin gerçek analitik yapıya daha yakın olduğunu bulabilmek ayrı bir öneme sahiptir. Bu bağlamda aşağıdaki norm tanımı yapılmaktadır.

$$N = \frac{\|f(x_1, \dots, x_N) - f_{new}(x_1, \dots, x_N)\|}{\|f(x_1, \dots, x_N)\|} \quad (34)$$

Bu ifadede bulunan $f_{new}(x_1, \dots, x_N)$ fonksiyonu YBMG, ÇYBMG ve MYBMG yaklaşıranlarından herhangi bir tanesine karşılık gelmektedir. Bu norm ifadesinin hesaplamaları yapılırsa ve

$$\theta_1 = \left(f(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) - f_{new}(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)}) \right)^2 \quad (35)$$

ile

$$\theta_2 = f(\xi_1^{(j_1)}, \dots, \xi_N^{(j_N)})^2 \quad (36)$$

tanımları kullanılırsa

$$N = \left[\frac{\sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) \theta_1}{\sum_{j_1=1}^{n_1} \dots \sum_{j_N=1}^{n_N} \left(\prod_{i=1}^N \alpha_{j_i}^{(i)} \right) \theta_2} \right]^{1/2} \quad (37)$$

bağıntısı elde edilir. Bu bağıntı kullanılarak elde edilen en küçük norm değeri en küçük bağıl hatayı verecektir. Bunun anlamı da, böylelikle en iyi gösterilimin hangisinin olduğunun bulunacağıdır.

Sayısal uygulamalar

Bu bölümde çalışmada verilen yöntemlerin değişik örnekler üzerinde uygulanarak elde edilen sayısal çözümlerin sonuçları verilecektir. Belirtilen yöntemler, verilecek üç ayrı örnek üzerinde denenecektir. Örneklerden birincisi toplamsal özelliklerin ikincisi ise çarpımsal özelliklerin ağır bastığı uygulamalar olacak. Sonuncu örnek olarak ise hem toplamsal hem de çarpımsal özellikleri içerisinde barındıran ve diğer örneklerle göre baskın özellikler taşımayan bir uygulama verilecektir. Bu uygulamaları oluşturabilmek ve gerçek sonuçlar ile karşılaştırıp bu çalışmada verilen yeni algoritmaların verimliliğini test edebilmek amacıyla analitik yapısı önceden bilinen çok değişkenli fonksiyonlar kullanılacaktır.

Bu örneklerde sayısal sonuçların elde edilmesinde MuPAD programlama dili kullanılmıştır (Oevel ve diğerleri, 2000). MuPAD, hem sayısal hem de simgesel hesaplamaların yapılabildiği sayısal tabanlı bir dildir. Sayısal sonuçların elde edilmesinde programlar 20 basamaklı duyarlılıkta çalıştırılmaktadır. Bunun yanısıra, problemlerde verilen değer takımlarının MuPAD'de yazılmış programlara uygun hale getirilmesi için birtakım yardımcı program parçacıkları da kullanılmaktadır. Bu programlar ise, PERL programlama dilinde yazılmıştır. PERL (Practical

Extraction and Report Language), dili bir raporlama dilidir.

İlk sayısal uygulamayı oluşturabilmek amacıyla aşağıdaki çok değişkenli fonksiyon kullanılmaktadır.

$$f(x_1, \dots, x_{10}) = \sum_{i=1}^{10} a_i x_i, \quad a_i = 2i - 1 \quad (38)$$

Bu fonksiyon 10 adet bağımsız değişkenden oluşmakta ve herbir değişken için aşağıdaki gibi tanım aralıkları verilmektedir. Aralıklardaki her noktanın arasındaki artım miktarı ise 0.1 kadardır.

$$\begin{aligned} 0.1 \leq x_1 \leq 0.4, \quad 0.4 \leq x_2 \leq 0.5, \\ 0.2 \leq x_3 \leq 0.3, \quad 0.5 \leq x_4 \leq 0.8, \\ 0.6 \leq x_5 \leq 0.7, \quad 0.9 \leq x_6 \leq 1.0, \\ 1.1 \leq x_7 \leq 1.2, \quad 1.7 \leq x_8 \leq 2.0, \\ 1.9 \leq x_9 \leq 2.0, \quad 1.6 \leq x_{10} \leq 1.9 \end{aligned} \quad (39)$$

Bu aralıkları kullanarak elde edilen kartezyen çarpım kümesi 16384 düğümden oluşur. Herbir düğüm 10 adet parametre ile ifade edilmektedir. Fonksiyonun bu düğüm noktalarındaki değerleri (38)'de verilen analitik yapı aracılığıyla elde edilebilmektedir. Böylece, çok değişkenli bir interpolasyon problemi için gerekli olan tüm veriler oluşturulmuştur. Bundan sonraki aşama YBMG yönteminde verilen değişmez ve tek değişkenli bileşenlerin bulunmasıdır. Daha önceden belirtilen MuPAD programları kullanılacak olursa değişmez terim için aşağıdaki değer elde edilir.

$$f_0 = 132.8 \quad (40)$$

Tek değişkenli bileşenleri bulmak demek yukarıda verilen bağımsız değişken aralıklarında bulunan noktalara karşılık YBMG yönteminin tek değişkenli terimlerinin değerlerinin bulunması demektir. Sadece bu uygulamaya özgü olarak elde edilen bu değerler açık bir şekilde aşağıda verilmektedir.

$$\begin{aligned}
 f_1(0.1) &= -0.15, & f_1(0.2) &= -0.05, \\
 f_1(0.3) &= 0.05, & f_1(0.4) &= 0.15, \\
 f_2(0.4) &= -0.15, & f_2(0.5) &= 0.15, \\
 f_3(0.2) &= -0.25, & f_3(0.3) &= 0.25, \\
 f_4(0.5) &= -1.05, & f_4(0.6) &= -0.35, \\
 f_4(0.7) &= 0.35, & f_4(0.8) &= 1.05, \\
 f_5(0.6) &= -0.45, & f_5(0.7) &= 0.45, \\
 f_6(0.9) &= -0.55, & f_6(1.0) &= 0.55, \\
 f_7(1.1) &= -0.65, & f_7(1.2) &= 0.65, \\
 f_8(1.7) &= -2.25, & f_8(1.8) &= -0.75, \\
 f_8(1.9) &= 0.75, & f_8(2.0) &= 2.25, \\
 f_9(1.9) &= -0.85, & f_9(2.0) &= 0.85, \\
 f_{10}(1.6) &= -2.85, & f_{10}(1.7) &= -0.95, \\
 f_{10}(1.8) &= 0.95, & f_{10}(1.9) &= 2.85,
 \end{aligned} \tag{41}$$

Verilen bu sonuçlar kullanıldığında aşağıdaki YBMG yaklaşıtırmı elde edilmektedir.

$$\begin{aligned}
 S_1(x_1, \dots, x_{10}) &= 1.0x_1 + 3.0x_2 + 5.0x_3 \\
 &+ 7.0x_4 + 9.0x_5 + 11.0x_6 + 13.0x_7 + 15.0x_8 \\
 &+ 17.0x_9 + 19.0x_{10} + 6.4623485 \times 10^{-27} x_4 \\
 &+ 9.20884666 \times 10^{-26}
 \end{aligned} \tag{42}$$

Burada $S_1(x_1, \dots, x_{10})$ fonksiyonu sadece değişmez terim ile tek değişkenli terimleri içeren YBMG yaklaşımına karşılık gelmektedir. Analitik yapısı aranan fonksiyonda toplamsal özellikleri baskın olarak ön plana çıktığından elde edilen yaklaşım bilgisayar ortamındaki çok ufak hesaplama hataları yok varsayıldığında tam sonuç olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu sonuç yapısı (34)'de verilen göreceli hata değerinde de gözlemlenebilmektedir.

$$N = 2.8425870876069956792 \times 10^{-25} \tag{43}$$

Elde edilen bu sonuç yeterli olduğundan bu tür uygulamalarda ÇYBMG veya MYBMG bileşenlerinin bulunup ilgili yaklaşımın oluşturulmaya gerek yoktur.

İkinci uygulama olarak ise çarpımsal özellikleri baskın olan aşağıdaki beş bağımsız değişkene sahip olan analitik yapıyı seçiyoruz.

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = \prod_{i=1}^5 x_i \tag{44}$$

Bu analitik yapının bağımsız değişkenlerinin alabileceği değerler kümelerini ise aşağıdaki gibi belirlemekteyiz.

$$\begin{aligned}
 \xi_1 &= \{0.42, 0.47, 0.51, 0.73\}, \\
 \xi_2 &= \{0.56, 0.76, 0.82, 0.91, 1.02\}, \\
 \xi_3 &= \left\{ \begin{array}{l} 0.11, 0.19, 0.27, 0.43, \\ 0.45, 0.49, 0.51, 0.69 \end{array} \right\}, \\
 \xi_4 &= \{0.32, 0.45\}, \\
 \xi_5 &= \{0.18, 1.05\}
 \end{aligned} \tag{45}$$

Bu değer kümeleri kullanılarak oluşturulan karzeten çarpım kümesi 640 düğümden meydana gelmektedir. Bu kümenin elemanları kullanılarak fonksiyonun o noktalardaki değerleri de belirlenmektedir. Bu veriler kullanılarak önce YBMG bileşenleri belirlenir, daha sonra bu bileşenler kullanılarak ÇYBMG bileşenleri oluşturulur. ÇYBMG yaklaşım ile elde edilen sonucun analitik yapısı uzun olduğundan burada verilmemektedir. Ancak, göreceli hata değerleri hem YBMG hem de ÇYBMG yaklaşımın için aşağıdaki gibi hesaplanmıştır.

$$\begin{aligned}
 N_{S_1} &= 0.31623397290076237087 \\
 N_{P_1} &= 0.8366157749323359 \times 10^{-24}
 \end{aligned} \tag{46}$$

Görüldüğü üzere fonksiyonun analitik yapısının baskın çarpımsal özellikler taşıması nedeniyle ÇYBMG yöntemi ile elde edilen yaklaşım YBMG ile elde edilen yaklaşıtıma göre daha iyi bir sonuç vermekle birlikte gerçek sonucu da vermiş bulunmaktadır.

Son sayısal uygulama olarak ise hem toplamsal hem de çarpımsal özelliklere sahip olan ve bu özelliklerden herhangi birisinin baskın olmadığı altı bağımsız değişkene sahip bir analitik yapıyı ele alıyoruz.

$$f(x_1, \dots, x_6) = \left(\sum_{i=1}^6 x_i \right)^5 \tag{47}$$

Bağımsız değişkenlerin tanım aralıkları ise aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned} 0.2 \leq x_1 \leq 0.5, \quad 0.6 \leq x_2 \leq 1.0, \\ 0.1 \leq x_3 \leq 0.4, \quad 0.3 \leq x_4 \leq 1.0, \\ 0.7 \leq x_5 \leq 1.1, \quad 1.2 \leq x_6 \leq 1.3 \end{aligned} \quad (48)$$

Birinci örnekte olduğu gibi burada da aralıklardaki her bir nokta arasındaki artım miktarı 0.1 kadardır. Bu veri takımı ile oluşturulacak kar-tezyen çarpım kümesi ise 6400 elemanlıdır. Bu çalışmada verilen üç algoritma da kullanılırsa elde edilen yaklaşımlar arasından en iyisinin tespit edilebileceği göreceli hata değerleri ise

$$\begin{aligned} N_{S_1} &= 0.072974820828389470502 \\ N_{P_1} &= 0.019171006720016314967 \\ N_{h_1} &= 0.0051259118232244553505 \end{aligned} \quad (49)$$

şeklinde elde edilmiştir. Sonuçlardan da görüldüğü üzere Melez YBMG yöntemi fonksiyonların baskın olarak belirli bir özelliğe sahip olmadığı durumlarda diğer iki yöntemi de içerdiği için daha verimli bir şekilde çalışmaktadır.

Sonuçlar

Çok değişkenli interpolasyon problemleri ele alındığında problemdeki değişken sayısı arttıkça standart yöntemlerin kullanılmasında sorunlar çıkmaktadır. İşlem karmaşıklığından kaynaklanan hatalar ve problemin bilgisayar sistemlerine yönelik modellenememesi gibi eksiklikler oluşmaktadır. Böyle durumlarda verilen çok değişkenli interpolasyon problemi yerine problemi daha az değişkenli alt problemlere indirgemek zaman kazanımı açısından önemlidir. Bu çalışmada, bu amaçla, verilen bir N değişkenli interpolasyon problemi Yüksek Boyutlu Model Gösterilim yöntemi aracılığıyla N adet tek değişkenli alt problemlerin toplamına indirgenmektedir. Yöntem kapsamında verilen açılımda bulunan daha fazla değişkenli bileşenler ise dışlanmaktadır. Böylece analitik yapısı aranan çok değişkenli fonksiyon için bir yaklaşım elde edilmektedir. Elde edilen bu yaklaşık sonucun birçok sayısal uygulamada kabul edilebilir ol-

duğu yapılan denemelerde gözlemlenebilmiştir. Bu şekilde çok değişkenli interpolasyon problemlerinin hesaplama karmaşıklığı oldukça düşürülmüş ve mühendislik problemleri için kabul edilebilir yakınsama oranlarında yaklaşımlar elde edilmiştir.

Bu çalışmada verilen üç yöntem yukarıda sözü edilen yaklaşımları elde edebilmek amacıyla kullanılmaktadır. Yüksek Boyutlu Model Gösterilim yöntemi kullanılarak veri bölümlenmesinin yapılması ve daha sonra bölümlenmiş bu veri takımından Lagrange interpolasyon formülü aracılığıyla analitik yapılar elde edilmesiyle oluşturulan yaklaşım özellikle toplamsallık özelliği baskın fonksiyonların analitik yapısının elde edilmesinde oldukça etkin olarak kullanılmaktadır. Bunu sağlayan YBMG açılımının toplamsal özellikler taşımasıdır.

Çarpımsal özelliklerin baskın olarak etkili olduğu fonksiyonların analitik yapılarının elde edilmesinde ise YBMG yöntemi her zaman başarılı sonuçlar verememektedir. Bu nedenle YBMG tabanlı başka bir yöntem gereksinim duyulmuştur. Çarpımsallaştırılmış YBMG yöntemi bu amaçla geliştirilmiştir. YBMG bileşenlerini kendi bileşenlerinin tespit edilmesi için kullanan bu yöntem, yapısı nedeniyle de özellikle çarpımsallık özelliklerini baskın olarak taşıyan çok değişkenli fonksiyonların analitik yapısının elde edilmesinde etkin olarak çalışmaktadır. Bu sonuç, verilen ikinci sayısal uygulamada da gözlemlenebilmektedir.

Yukarıda belirtilen fonksiyon yapılarından daha genel bir durum ise fonksiyonun analitik yapısı için tam bir baskın özellik söylenememesi durumudur. Böylece ara özelliklere sahip fonksiyonların analitik yapılarının bu iki yöntemi de birleştiren aracılığıyla tek bir açılım altında birleştirip melez bir açılım yardımıyla elde edilmesi amaçlanmıştır. Bu doğrultuda Melez YBMG yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntemde bulunan en önemli aşama melezlik değiştirgeninin uygun şekilde elde edilmesidir. Verilen sayısal uygulamada da görüleceği üzere yöntemin algoritmasında tanımlanan bir norm üzerinden bu değiştirgenin değeri istenilen oranda bulunabil-

mektedir. Bu yaklaşımların göreceli hata oranları bu çalışmada tanımlanan norm ifadeleri aracılığıyla hesaplanabilmekte ve eldeki çok değişkenli problem için en uygun YBMG yöntemi belirlenebilmektedir.

Kaynaklar

- Sobol, I. M., (1993). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models, *Mathematical Modeling and Computational Experiments*, **1**, 407-414.
- Sobol, I. M., (2003). Theorems and examples on high dimensional model representation, *Reliability Engineering and System Safety*, **79**, 187-193.
- Rabitz, H. ve Alış, Ö. F., (1999). General foundations of high dimensional model representations, *Journal of Mathematical Chemistry*, **25**, 197-233.
- Alış, Ö. F. ve Rabitz, H., (2001). Efficient implementation of high dimensional model representations, *Journal of Mathematical Chemistry*, **29**, 127-142.
- Li, G., Rosenthal, C. ve Rabitz, H., (2001). High dimensional model representations, *Journal of Physical Chemistry A*, **105**, 7765-7777.
- Li, G., Wang, S.-W. ve Rabitz, H., (2002). Practical approaches to construct RS-HDMR component functions, *Journal of Physical Chemistry A*, **106**, 8721-8733.
- Demiralp, M., (2003). High dimensional model representation and its application varieties, *Mathematical Research*, **9**, 146-159.
- Baykara, N.A. ve Demiralp, M., (2003). Hyper-spherical or hyperellipsoidal coordinates in the evaluation of high dimensional model representation approximants, *Mathematical Research*, **9**, 48-62.
- Demiralp M. ve Tunga, M.A., (2001). High dimensional model representation of multivariate interpolation via hypergrids, the sixteenth international symposium on computer and information sciences, November 5-7, 416-423, Antalya, Turkey.
- Tunga, M.A. ve Demiralp, M., (2004). A factorized high dimensional model representation on the nodes of a finite hyperprismatic regular grid, *Applied Mathematics and Computation*, (Kabul edildi).
- Tunga, B. ve Demiralp, M., (2003). Hybrid high dimensional model representation approximants and their utilization in applications, *Mathematical Research*, **9**, 438-446.
- Zemanian, A. H., (1987). *Distribution theory and transform analysis, an introduction to generalized functions with applications*, Dover Publications Inc., New York.
- Oevel, W., Postel, F., Wehmeier, S. ve Gerhard, J., (2000). *The Mupad Tutorial*, Springer.
- Deitel, H. M., Deitel, P. J., Nieto, T. R. ve McPhie, D. C., (2001). *Perl How to Program*, Prentice Hall.