arXiv:2304.01685v1 [math.NA] 4 Apr 2023

基于格的核近似的两种搜索准则比较

Frances Y. Kuo* Weiwen Mo† Dirk Nuyens†Ian H. Sloan* AbiramiSrikumar*

2023年4月5日

摘要

在再生核希尔伯特空间中，对于使用同一组函数值对函数进行的所有近似，核插值函数在最坏情形意义下是最优的。本文比较了两种搜索准则，用于构造基于格的核近似所需的格点集。第一个候选准则 $\mathcal{P}_n^*$基于机器学习文献中出现的幂函数。第二个准则 $\mathcal{S}_n^*$用于生成采用截断傅里叶级数进行近似的格。我们发现，使用$\mathcal{P}_n^*$ 和$\mathcal{S}_n^*$ 构造的格之间的误差在经验上的差异很小。由于判据$\mathcal{S}_n^*$ 在计算上更高效，并且具有已证明的误差界，因此更推荐使用该判据。

1 引言

核插值旨在对定义在 $[0,1]^d$ 上的函数 f 在 n 个点处进行插值，从而得到一个近似（见 [11, 25, 26]）。该近似利用再生核希尔伯特空间H的再生核构造，形式如下：

$$A_n^*(f)(\boldsymbol{y}) \coloneqq \sum_{k=0}^{n-1} a_k\, K(\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{y}) \qquad \text{for} \quad \boldsymbol{y} \in [0,1]^d. \tag{1.1}$$

这里， $K(\cdot,\cdot)$ 是 H 的再生核，我们的 n 个互异插值点记为 $\boldsymbol{t}_k \in [0,1]^d$，其中 $k = 0,\ldots,n-1$。在最坏情形意义下，核插值函数在所有使用相同函数值的近似中具有最优性；相关证明见 [11]。

近似质量取决于 n 插值点的选择，这促使我们思考如何获得一组“优质”的

新南威尔士大学数学与统计学院，悉尼，新南威尔士州 2052，澳大利亚，(f.kuo|i.sloan)@unsw.edu.au|a.srikumar@student.unsw.edu.au

†鲁汶大学计算机科学系，Celestijnenlaan 200A，3001 鲁汶，比利时，(weiwen.mo|dirk.nuyens)@kuleuven.be

点以减小近似误差。本文将研究基于格的核近似，其中 n 插值点构成一个 n 点的秩-1格，即由生成向量 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{U}_n^d$ 表征的、位于 $[0,1]^d$ 上的一组格点，

$$\boldsymbol{t}_k \coloneqq \left\{ \frac{k\boldsymbol{z}}{n} \right\} \qquad \text{for} \quad k = 0, \ldots, n-1, \tag{1.2}$$

其中 $\mathbb{U}_n \coloneqq \{1 \le z \le n-1 : \gcd(z,n) = 1\}$，而 $\{\cdot\}$ 表示对向量中每个分量取小数部分。

我们使用逐分量 (CBC) 算法构造生成向量 $\boldsymbol{z}$，以定义一个“优良”格点。CBC 算法通过从集合 $\mathbb{U}_n$ 中依次选取分量 z_j，构造 $\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots, z_d)$，从而在每个维数下使可计算的误差准则最小化，或满足某个特定条件（对于“重构格”而言）。众所周知，格点生成向量的 CBC 构造能够确保高维数下数值积分和逼近具有良好的误差界，参见例如 [3,5,8,10,12–16]。

我们考虑加权 Korobov 空间 $H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$，其中的函数定义在 $[0,1]^d$ 上，是 d 元、周期为 1 的函数，且其傅里叶级数绝对收敛（见第 2 节）。其中 $\alpha > 1/2$ 称为光滑度参数。当 α 为整数时，$H = H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 中的函数具有平方可积的混合偏导数，且每个坐标上的阶数至多为 α。此外，$\boldsymbol{\gamma} \coloneqq \{\gamma_{\mathfrak{u}}\}_{\mathfrak{u} \subset \mathbb{N}}$ 是正权重，用于量化不同变量子集的相对重要性。

给定近似算法 A_n，关于 L_2-范数的最坏情况误差定义为

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n; L_2) \coloneqq \sup_{\|f\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}} \le 1} \|f - A_n(f)\|_{L_2([0,1]^d)},$$

其中 $\|\cdot\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 表示 Korobov 空间范数（见下文 (2.1)）。最坏情况误差难以获得可计算形式，因此 CBC 构造的搜索准则采用最坏情况误差的上界。

核近似已应用于通过径向基函数对散乱多元数据进行插值，并且是机器学习和信号处理中的一个常见研究主题 [1,23]。给定任意插值点集 $\Lambda = \{\boldsymbol{t}_0, \ldots, \boldsymbol{t}_{n-1}\}$（不一定是格点），幂函数 $P_\Lambda(\boldsymbol{y})$ 定义为逐点误差泛函 [6,22,24] 的范数。当 Λ 是由生成向量 $\boldsymbol{z}$确定的格点点集时，幂函数恰好就是我们的基于格的核近似 A_n^*的最坏情况逐点误差，

$$P_\Lambda(\boldsymbol{y}) \coloneqq \sup_{\|f\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}} \le 1} |f(\boldsymbol{y}) - A_n^*(f)(\boldsymbol{y})|. \tag{1.3}$$

很容易得出

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n^*; L_2) \le \left(\int_{[0,1]^d} P_\Lambda(\boldsymbol{y})^2 \, \mathrm{d}\boldsymbol{y} \right)^{1/2} =: \mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}). \tag{1.4}$$

量 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 是 CBC 构造的一种潜在搜索准则。 $P_\Lambda(\boldsymbol{y})$ 和 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的显式公式可见下文的 (3.2) 和 (3.4)。

在 [6] 中提出了一种贪心的数据无关方法：通过加入使基于当前数据集构造的幂函数达到最大值的点，逐步构造越来越大的点集 Λ （不一定是格点）。在他们的设定中，该算法的收敛速率对维数的依赖较差。

看来， [26] 首次使用格点作为插值点集 Λ。 [26, 的定理 3] 证明，存在一个生成向量 $\boldsymbol{z}$ ，使得 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 以 $\mathcal{O}(n^{-\alpha/2+1/4+\delta})$ 的速率收敛，其中 $\delta > 0$。 [26] 以及随后关于核插值误差的论文 [25] ，都没有给出用于核近似的秩-1格的显式 CBC 构造。

根据核近似的最优性，我们有

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n^*; L_2) \le e^{\mathrm{wor}}(A_n; L_2)$$

对于任何使用格点集 Λ 上的点 f 的相同函数值所构造的近似 A_n ，均有此结论。在 [4, 13] 中证明，使用格点的截断三角多项式近似 A_n 满足 $e^{\mathrm{wor}}(A_n; L_2) \le \mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$，其中 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 由下文的 (2.9) 给出。因此

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n^*; L_2) \le \min\{\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}), \mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})\},$$

它提供了 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$，作为核近似 CBC 构造的第二种搜索准则。

文献 [4,13] 证明，基于 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的 CBC 构造对于 $\delta > 0$ 可达到 $\mathcal{O}(n^{-\alpha/2+\delta})$ 的收敛速率，这也是采用完整秩-1格的基于格点算法所能达到的最佳收敛速率（参见 [2, 11]）。需要指出的是，基于格点的近似算法通常并非最优；在我们的设定下，其收敛速率仅为最优收敛速率 $\mathcal{O}(n^{-\alpha+\delta})$ 的一半（参见 [9, 19]）。基于线性泛函信息或仅基于函数值（非基于格点）的算法可以达到更好的收敛速率；不过，基于格点的算法更易于实现，效率也更高。

我们的研究发现，使用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 作为搜索准则效率更高，因为可以采用“快速”CBC 算法（例如参见 [16]）。据我们所知，$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 判据尚无此类快速算法。此外，对于较大的 n ，使用双精度可以准确计算 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$，而 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 则需要更高精度。我们还发现，通过最小化 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 生成的格点与通过最小化 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 生成的格点之间，按 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 衡量的误差差异很小。

本文结构如下。第 2 节将详细介绍第 3 节推导核方法上界及其可计算形式所需的一些背景知识。第 4 节提出一种显式 CBC 算法，该算法使用 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 作为搜索准则。最后，第 5 节使用针对不同参数、分别由相应 CBC 算法得到的生成向量，对 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 和 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 进行数值比较。

2 预备知识

2.1 加权 Korobov 空间

对于 $\alpha > \frac{1}{2}$ 和正权重参数 $\boldsymbol{\gamma} \coloneqq \{\gamma_{\mathfrak{u}}\}_{\mathfrak{u} \subset \mathbb{N}}$，我们考虑定义在 $[0,1]^d$ 上的单周期 L_2 函数的希尔伯特空间 $H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$，其傅里叶级数绝对收敛

$$f(\boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{h} \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(\boldsymbol{h})\, \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{y}} \quad \text{with} \quad \widehat{f}(\boldsymbol{h}) \coloneqq \int_{[0,1]^d} f(\boldsymbol{y})\, \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{y}}\, \mathrm{d}\boldsymbol{y},$$

其中，$\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{y} = \sum_{j=1}^d h_j y_j$ 表示通常的点积。$H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 中的范数定义为

$$\|f\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}^2 \coloneqq \sum_{\boldsymbol{h} \in \mathbb{Z}^d} \left|\widehat{f}(\boldsymbol{h})\right|^2 r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}), \tag{2.1}$$

$$r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}) \coloneqq \frac{1}{\gamma_{\mathrm{supp}(\boldsymbol{h})}} \prod_{j \in \mathrm{supp}(\boldsymbol{h})} |h_j|^{2\alpha},$$

其中 $\mathrm{supp}(\boldsymbol{h}) \coloneqq \{1 \le j \le d : h_j \ne 0\}$。参数 α 刻画了范数中傅里叶系数的衰减速率；当α 为整数时，可将其视为光滑度参数，表示 f关于所有可能的变量子集都具有阶数为 α 的平方可积混合偏导数。

$H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 的内积为

$$\langle f, g \rangle_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}} \coloneqq \sum_{\boldsymbol{h} \in \mathbb{Z}^d} \widehat{f}(\boldsymbol{h})\, \overline{\widehat{g}(\boldsymbol{h})}\, r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}),$$

范数为 $\|\cdot\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}} = \langle \cdot, \cdot \rangle_{d\ \alpha\ ,,\boldsymbol{\gamma}}^{1/2}$，这与 (2.1) 一致。此外，$H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 是一个再生核希尔伯特空间，其再生核为

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{h} \in \mathbb{Z}^d} \frac{\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{h} \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})},$$

它满足以下性质：(i) 对所有,,

$$K\ \boldsymbol{x}\ \boldsymbol{y}\ = K\ \boldsymbol{y}\ \boldsymbol{x}\qquad \boldsymbol{x}\ \boldsymbol{y} \in [0,1]^d\qquad K\quad \boldsymbol{y}\ \in (,)\ (,);$$

(ii) 对 $H_{d\ \alpha\ \boldsymbol{\gamma}}\qquad \boldsymbol{y} \in [0,1]^d\qquad f\ K\quad \boldsymbol{y}\ _{d\ \alpha\ \boldsymbol{\gamma}} = f\ \boldsymbol{y}\qquad f \in H_{d\ \alpha\ \boldsymbol{\gamma}}$ 所有，$(\cdot)\ ,,$；(iii) 对所有,,以及所有 $\boldsymbol{y} \in [0,1]^d$，$\langle ,(\cdot)\rangle ,,(\ )$。最后一条性质称为再生性质。应注意，$r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}) = r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(-\boldsymbol{h})$，因此 $K(\cdot,\cdot)$只取实数值。

对于整数 $q > 1$，有（参见 [20, (24.8.3)]）

$$\frac{-(2\pi \mathrm{i})^q}{q!} B_q(y) = \sum_{h \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \frac{\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} h y}}{h^q} \quad \text{for} \quad y \in [0,1]. \tag{2.2}$$

因此，该核可以用周期伯努利多项式表示，

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{\mathfrak{u} \subseteq \{1:d\}} \gamma_{\mathfrak{u}} \prod_{j \in \mathfrak{u}} \left[(-1)^{\alpha+1} \frac{(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!} B_{2\alpha}\left(\{x_j - y_j\}\right) \right],$$

其中，$\{1:d\}$ 是从 1 到 d 的整数集合；与之前一样，花括号表示取输入的小数部分。

2.2 核插值函数

我们用形式为 (1.1) 的核插值函数来近似 $f \in H_{d,\alpha,\gamma}$ ，该函数在由 (1.2) 给出的 n 个秩-1格点处插值 f ，即

$$A_n^*(f)(\boldsymbol{t}_\ell) = f(\boldsymbol{t}_\ell) \quad \text{for all } \ell = 0, \ldots, n-1. \tag{2.3}$$

系数 a_k、 $k=0$、.....、 $n-1$ 可通过结合式 (1.1) 和 (2.3)，并求解所得的线性方程组得到，

$$f(\boldsymbol{t}_\ell) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k \, K(\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{t}_\ell) \quad \text{for all } \ell = 0, \ldots, n-1. \tag{2.4}$$

为简化记号，我们定义矩阵

$$\mathcal{K} \coloneqq \big[K(\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{t}_\ell)\big]_{\ell,\, k=0,\ldots,n-1}, \tag{2.5}$$

以及向量

$$\boldsymbol{a} \coloneqq \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}_\Lambda \coloneqq \begin{pmatrix} f(\boldsymbol{t}_0) \\ f(\boldsymbol{t}_1) \\ \vdots \\ f(\boldsymbol{t}_{n-1}) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y}) \coloneqq \begin{pmatrix} K(\boldsymbol{t}_0, \boldsymbol{y}) \\ K(\boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{y}) \\ \vdots \\ K(\boldsymbol{t}_{n-1}, \boldsymbol{y}) \end{pmatrix}. \tag{2.6}$$

注意，矩阵 $\mathcal{K}$ 是循环且对称的。

于是，(2.4) 等价于以下线性方程组

$$\boldsymbol{f}_\Lambda = \mathcal{K}\, \boldsymbol{a}. \tag{2.7}$$

如果$\mathcal{K}$ 满秩，则逆矩阵$\mathcal{K}^{-1}$ 存在，且方程（2.7）的解 $\boldsymbol{a}$ 唯一，即

$$\boldsymbol{a} = \mathcal{K}^{-1} \boldsymbol{f}_\Lambda,$$

而且逆矩阵$\mathcal{K}^{-1}$ 继承了矩阵$\mathcal{K}$的循环结构和对称性。 $\boldsymbol{a}$ 和$\mathcal{K}^{-1}$ 均可通过快速傅里叶变换（FFT）求得。

使用已定义的记号， $A_n^*(f)(\boldsymbol{y})$的等价表达式为:

$$A_n^*(f)(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{f}_\Lambda^\top \mathcal{K}^{-1} \boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y}). \tag{2.8}$$

2.3 The$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 判据

由 [3, 13] 得到的截断三角多项式逼近定义如下。我们首先将 f 的傅里叶展开截断到有限指标集$\mathcal{A}_d(M) \coloneqq \big\{\boldsymbol{h} \in \mathbb{Z}^d : r_{d,\,\alpha,\,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}) \le M\big\} \subset \mathbb{Z}^d$ 然后$\widehat{\ }$使用一个 n点秩-1格规则逼近傅里叶系数， $f(\boldsymbol{h})$，其中 $\boldsymbol{h} \in \mathcal{A}_d(M)$，即

$$f(\boldsymbol{y}) \approx \sum_{\boldsymbol{h} \in \mathcal{A}_d(M)} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(\boldsymbol{t}_k)\, \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{t}_k} \right) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{y}}.$$

选择 M 以使截断误差与逼近误差上界之和最小后， [3,13] 证明了最坏情况误差的一个上界为

$$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}) \coloneqq \sqrt{2}\,[S_{n,d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{z})]^{1/4} = \mathcal{O}(n^{-\alpha/2+\delta}), \qquad \delta > 0, \tag{2.9}$$

with

$$S_{n,d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{z}) = \sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d} \frac{1}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})} \sum_{\substack{\boldsymbol{\ell}\in\mathbb{Z}^d\setminus\{\mathbf{0}\} \\ \boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{z}\equiv_n 0}} \frac{1}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}+\boldsymbol{\ell})}.$$

(2.9)中的隐含常数取决于 α 和权重参数$\boldsymbol{\gamma}$。如果 $\boldsymbol{\gamma}$ 满足某个条件，则该常数与维数 d 无关。上述收敛速率对素数和合数 n均适用。对于嵌入规则，收敛阶会乘上一个n 的对数因子（见 [13]）。

对于乘积权重 $\gamma_{\mathfrak{u}} = \prod_{j\in\mathfrak{u}} \gamma_j$， $S_{n,\ d,\ \alpha,\ \boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{z})$的一个简单且可计算的表达式见 [7]：

$$\begin{aligned} S_{n,d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{z}) = &-\prod_{j=1}^{d}(1+2\gamma_j^2\zeta(4\alpha)) + \frac{1}{n}\prod_{j=1}^{d}(1+2\gamma_j\zeta(2\alpha))^2 \\ &+ \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n-1}\prod_{j=1}^{d}\left(1+(-1)^{\alpha+1}\gamma_j\frac{(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!}B_{2\alpha}\left(\left\{\frac{kz_j}{n}\right\}\right)\right)^2. \end{aligned} \tag{2.10}$$

算法1使用了一个适用于乘积权重的$S_{n,\ d,\ \alpha,\ \boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{z})$的替代公式，该公式见 [4]。尽管这个公式看起来更复杂，但它在数学上等价于(2.10)，而且与使用(2.10)的算法相比，在较低精度下更准确。将矩阵 $\boldsymbol{\Omega}_n$ 和 $\boldsymbol{\Psi}_n$ 的行与列重新排序为循环矩阵后，第7行的矩阵-向量乘法可使用快速傅里叶变换计算。因此，算法1的计算成本为$\mathcal{O}(d\,n\log\ n)$（例如，见 [16–18]）。有关更多细节，例如其他类型权重的实现以及用于逼近的嵌入格序列，请参阅 [3,4,13,14]。

3 搜索准则$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$的构造

我们首先推导核插值方法最坏情形逼近误差的上界$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$，并给出该上界的显式表达式。

定理3.1。 在(1.4) 中定义的量 $P_n^*(\boldsymbol{z})$ 可写为

$$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}) = \left(K(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) - \int_{[0,1]^d} \boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})^\top \mathcal{K}^{-1}\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})\ \mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)^{1/2}, \tag{3.1}$$

其中， $K(\cdot,\cdot)$ 是 $H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$, $\boldsymbol{k}_\Lambda$ 的再生核，其定义见(2.6)，而 $\boldsymbol{K}^{-1}$ 是(2.5)中定义的矩阵 $\boldsymbol{K}$ 的逆矩阵。这对任意再生核都成立。

算法1： 使用$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$的快速 CBC 算法

输入 ：点数 $n \geq 2$；参数 $\alpha > 1/2$；权重 $\{\gamma_j\}_{j\geq 1}$；最大维数 d。

输出： 生成向量 $\boldsymbol{z}$；$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的值。

设置 $S = 0$

$\Omega_n = \left[\omega(z,\ k)\right]_{z\in\mathbb{U}_n,\ k=0,\ \ldots,\ n-1}$ 其中 $\omega(z,\ k) = (-1)^{\alpha+1}\frac{(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!}\ B_{2\alpha}\left(\left\{\frac{kz}{n}\right\}\right)$

$\Psi_n = \left[(\omega(z,k))^2 - 2\zeta(2\alpha)\right]_{z\in\mathbb{U}_n,\ k=0,\ \ldots,\ n-1}$

$\boldsymbol{p}_0 = \mathbf{1}\cdot\prod_{j=2}^{d}(1+\zeta(2\alpha)\gamma_j^2)$ `// Vector of size` n

`/* CBC construction of generating vector` $\boldsymbol{z}$ `*/`

对 $s \leftarrow 1$ **至** d **执行**

  $W_{d,s} = \frac{1}{n}\Psi_n\,\gamma_s^2\,\boldsymbol{p}_{s-1} + \frac{2}{n}\Omega_n\,\gamma_s\,\boldsymbol{p}_{s-1}$ `// ` $W_{d,s}$ `is a vector of size` $|\mathbb{U}_n|$

  求 $W_{d,s}$ 的最小值，并令 $z_s =$ 为 $\operatorname{argmin} W_{d,s}$，然后 $\boldsymbol{z} = [\boldsymbol{z}, z_s]$，$S = S +$ 最小值 $W_{d,s}$

  $\boldsymbol{p}_s = (1+\gamma_s\Omega_n(z_s,\ :))^2 .*\ \boldsymbol{p}_{s-1}/(1+\zeta(2\alpha)\gamma_{s+1}^2)$

结束循环 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}) = \sqrt{2}\,S^{1/4}$

证明。 固定 $\boldsymbol{y} \in [0,1]^d$。定义向量 $\boldsymbol{\mu}_\Lambda(\boldsymbol{y}) \coloneqq \mathcal{K}^{-1}\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})$，其形式为

$$\boldsymbol{\mu}_\Lambda(\boldsymbol{y}) = \begin{pmatrix}\mu_0(\boldsymbol{y}) & \mu_1(\boldsymbol{y}) & \ldots & \mu_{n-1}(\boldsymbol{y})\end{pmatrix}^\top.$$

利用 (2.8) 和核函数的再生性质，我们得到

$$f(\boldsymbol{y}) - A_n^*(f)(\boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{f}_\Lambda^\top\boldsymbol{\mu}_\Lambda(\boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} f(\boldsymbol{t}_k)\mu_k(\boldsymbol{y})$$

$$= \left\langle f, K(\cdot,\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} K(\cdot,\boldsymbol{t}_k)\mu_k(\boldsymbol{y})\right\rangle_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}.$$

应用柯西–施瓦茨不等式，我们得到，

$$|f(\boldsymbol{y}) - A_n^*(f)(\boldsymbol{y})| \leq \|f\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}\left\|K(\cdot,\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} K(\cdot,\boldsymbol{t}_k)\mu_k(\boldsymbol{y})\right\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}},$$

其中，当 f 且 $K(\cdot\ \boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} K(\cdot\ \boldsymbol{t}_k)\ \mu_k(\boldsymbol{y})$ 线性相关时，等号成立。因此，由（1.3）定义的幂函数实际上是误差泛函在 $H_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}$ 处的范数，在 $\boldsymbol{y}$ 处取值，其等价表达式如下

$$P_\Lambda(\boldsymbol{y}) = \left\|K(\cdot,\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} K(\cdot,\boldsymbol{t}_k)\mu_k(\boldsymbol{y})\right\|_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}.$$

现在我们有

$$P_\Lambda(\boldsymbol{y})^2 = \left\langle K(\cdot,\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1} K(\cdot,\boldsymbol{t}_k)\mu_k(\boldsymbol{y}), K(\cdot,\boldsymbol{y}) - \sum_{\ell=0}^{n-1} K(\cdot,\boldsymbol{t}_\ell)\mu_\ell(\boldsymbol{y}) \right\rangle_{d,\alpha,\gamma}$$
$$= K(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) - 2\sum_{k=0}^{n-1}\mu_k(\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{t}_k,\boldsymbol{y}) + \sum_{k=0}^{n-1}\sum_{\ell=0}^{n-1}\mu_k(\boldsymbol{y})\mu_\ell(\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{t}_k,\boldsymbol{t}_\ell). \quad (3.2)$$

由于 $\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y}) = \mathcal{K}\boldsymbol{\mu}_\Lambda(\boldsymbol{y})$，我们有

$$K(\boldsymbol{t}_\ell,\boldsymbol{y}) = \sum_{k=0}^{n-1}\mu_k(\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{t}_\ell,\boldsymbol{t}_k) \quad \text{for } \ell = 0,1,\ldots,n-1. \quad (3.3)$$

将 (3.3) 代入 (3.2) 并化简后，我们继续得到

$$P_\Lambda(\boldsymbol{y})^2 = K(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) - \sum_{k=0}^{n-1}\mu_k(\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{t}_k,\boldsymbol{y}) = K(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})^\top\mathcal{K}^{-1}\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y}),$$

如所要求。 □

下面的定理通过为 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 提供一个可计算的表达式，进一步阐述了前面的定理，其中 $\alpha > 1/2$ 以及给定的权重参数 $\boldsymbol{\gamma}$。注意，表达式 (3.4) 已在 [26, 引理 2] 中推导出。

定理 3.2。 给定 $\alpha > 1/2$ 以及权重参数 $\boldsymbol{\gamma} := \{\gamma_{\mathfrak{u}}\}_{\mathfrak{u}\subset\mathbb{N}}$，$P_n^*(\boldsymbol{z})$ 的一个等价表达式为

$$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}) = \left(\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}[2\zeta(2\alpha)]^{|\mathfrak{u}|} - \mathrm{tr}(\mathcal{K}^{-1}\mathcal{M})\right)^{1/2}, \quad (3.4)$$

其中，$\zeta(\cdot)$ 为黎曼ζ函数，矩阵 $\boldsymbol{K}$ 定义见 (2.5)，对称循环矩阵 $\boldsymbol{M}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 的元素为

$$\mathcal{M}_{\ell,k} := \int_{[0,1]^d} K(\boldsymbol{t}_\ell,\boldsymbol{y})\,K(\boldsymbol{t}_k,\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \quad (3.5)$$
$$= \sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}^2\prod_{j\in\mathfrak{u}}\left[-\frac{(2\pi)^{4\alpha}}{(4\alpha)!}B_{4\alpha}\left(\left\{\frac{(\ell-k)z_j}{n}\right\}\right)\right].$$

证明。 根据 (2.6) 和矩阵$\mathcal{M}$的定义，我们可以将 (3.1) 中的积分写为

$$\int_{[0,1]^d}\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})^\top\mathcal{K}^{-1}\boldsymbol{k}_\Lambda(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}(\mathcal{K}^{-1})_{\ell,k}\int_{[0,1]^d}K(\boldsymbol{t}_\ell,\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{t}_k,\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}$$
$$= \sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}(\mathcal{K}^{-1})_{\ell,k}\,\mathcal{M}_{\ell,k} = \mathrm{tr}(\mathcal{K}^{-1}\mathcal{M}),$$

这里用到了矩阵$\mathcal{M}$显而易见的对称性。我们还有

$$K(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})=\sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d}\frac{1}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})}=\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}\prod_{j\in\mathfrak{u}}\sum_{h\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}}\frac{1}{|h|^{2\alpha}}=\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}[2\zeta(2\alpha)]^{|\mathfrak{u}|},$$

结合上述结果即可得到（3.4）。

可以如下得到 $\mathcal{M}_{\ell,k}$ 的显式表达式

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{\ell,k}&=\int_{[0,1]^d}\left(\sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\boldsymbol{h}\cdot(\boldsymbol{t}_\ell-\boldsymbol{y})}}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})}\right)\left(\sum_{\boldsymbol{h}'\in\mathbb{Z}^d}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\boldsymbol{h}'\cdot(\boldsymbol{t}_k-\boldsymbol{y})}}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}')}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{y}\\&=\sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d}\sum_{\boldsymbol{h}'\in\mathbb{Z}^d}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{t}_\ell}}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\boldsymbol{h}'\cdot\boldsymbol{t}_k}}{r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h}')}\underbrace{\int_{[0,1]^d}\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}(\boldsymbol{h}+\boldsymbol{h}')\cdot\boldsymbol{y}}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}}_{=\delta_{\boldsymbol{h},-\boldsymbol{h}'}}\\&=\sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d}\frac{1}{[r_{d,\alpha,\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{h})]^2}\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{z}(\ell-k)/n}.\end{aligned}\tag{3.6}$$

进一步化简上述表达式可得

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{\ell,k}=&\sum_{\boldsymbol{h}\in\mathbb{Z}^d}\gamma_{\mathrm{supp}(\boldsymbol{h})}^2\prod_{j\in\mathrm{supp}(\boldsymbol{h})}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}h_jz_j(\ell-k)/n}}{|h_j|^{4\alpha}}=\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}^2\prod_{j\in\mathfrak{u}}\sum_{h\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}hz_j(\ell-k)/n}}{|h|^{4\alpha}}\\=&\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\gamma_{\mathfrak{u}}^2\prod_{j\in\mathfrak{u}}\left[-\frac{(2\pi)^{4\alpha}}{(4\alpha)!}B_{4\alpha}\left(\left\{\frac{(\ell-k)z_j}{n}\right\}\right)\right].\end{aligned}$$

最后一个等式用到了（2.2）。

由（3.6）可见，$\mathcal{M}$ 的每一列都只是前一列向下移一位，因此矩阵 $\mathcal{M}$ 是循环矩阵。 □

如 [26], 所指出的，通过计算积分（3.5）来求值 $[\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})]^2$，当 $\alpha>1$ 和 $d>2$ 时会导致灾难性的舍入误差。在 [26, Theorem 1], 中，作者提出了 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的另一种形式。作者通过截断相关无穷级数来近似$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$，其截断误差为 $\mathcal{O}(n^{-2\alpha})$。相反，我们将使用下面的算法 2，以任意精度计算 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$。

4 基于$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$的 CBC 构造

在本节中，我们考虑乘积权重，即 $\gamma_{\mathfrak{u}}=\prod_{j\in\mathfrak{u}}\gamma_j$，对于$\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}$。由于 $\sum_{\mathfrak{u}\subseteq\{1:d\}}\prod_{j\in\mathfrak{u}}a_j=\prod_{j=1}^d(1+a_j)$，矩阵 $\mathcal{K}$ 和 $\mathcal{M}$ 的元素变为

$$\mathcal{K}_{\ell,k}=\prod_{j=1}^d\left(1+(-1)^{\alpha+1}\frac{(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!}\gamma_jB_{2\alpha}\left(\left\{\frac{(\ell-k)z_j}{n}\right\}\right)\right),$$

and

$$\mathcal{M}_{\ell,k}=\prod_{j=1}^d\left(1-\frac{(2\pi)^{4\alpha}}{(4\alpha)!}\gamma_j^2B_{4\alpha}\left(\left\{\frac{(\ell-k)z_j}{n}\right\}\right)\right).$$

算法 2： 以 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 为误差准则的 CBC 算法

输入 ：点数 $n \geq 2$；参数 $\alpha > 1/2$；权重 $\{\gamma_j\}_{j\geq 1}$；最大维数 d。

输出： 生成向量 $\boldsymbol{z}$；$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的值。

/* Initialization: first column of K and M at dimension 1 */

集合 $z_1 = 1$

$\boldsymbol{k}_1 = \big[k_1(\ell)\big]_{\ell=0}^{n-1}$, $\quad k_1(\ell) = 1 + \gamma_1 B_{2\alpha}\big(\big\{\frac{\ell}{n}\big\}\big)\dfrac{(-1)^{\alpha+1}(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!}$

$\boldsymbol{m}_1 = \big[m_1(\ell)\big]_{\ell=0}^{n-1}$, $\quad m_1(\ell) = 1 - \gamma_1^2 B_{4\alpha}\big(\big\{\frac{\ell}{n}\big\}\big)\dfrac{(2\pi)^{4\alpha}}{(4\alpha)!}$

/* CBC construction of generating vector $\boldsymbol{z}$ */

对于 $s \leftarrow 2$ **至** d，**执行**

  以及 $z_1, \ldots, z_{s-1}$ 固定的，$\boldsymbol{z} = [z_1, \ldots, z_{s-1}]$

  对于 z 属于 $\mathbb{U}_n = \{1 \leq z \leq n-1 : \gcd(z, n) = 1\}$ **执行**

    $\boldsymbol{k}_s = \big[k_s(\ell)\big]_{\ell=0}^{n-1}$,
    $k_s(\ell) = k_{s-1}(\ell)\big[1 + (-1)^{\alpha+1}\dfrac{(2\pi)^{2\alpha}}{(2\alpha)!}\gamma_s B_{2\alpha}\big(\big\{\frac{\ell z}{n}\big\}\big)\big]$

    $\boldsymbol{m}_s = \big[m_s(\ell)\big]_{\ell=0}^{n-1}$, $\quad m_s(\ell) = m_{s-1}(\ell)\big[1 - \dfrac{(2\pi)^{4\alpha}}{(4\alpha)!}\gamma_s^2 B_{4\alpha}\big(\big\{\frac{\ell z}{n}\big\}\big)\big]$

    $\widehat{\boldsymbol{k}}_s$ =快速傅里叶变换($\boldsymbol{k}_s$)

    $\widehat{\boldsymbol{m}}_s$ =快速傅里叶变换($\boldsymbol{m}_s$)

    $T_s(z)$ = 求和($\widehat{\boldsymbol{m}}_s$ ./ $\widehat{\boldsymbol{k}}_s$)

  结束循环

  求最大值 $_{z\in\mathbb{U}_n} T_s(z)$ 并将 z_s 设为最大化点，因此 $\boldsymbol{z} = [\boldsymbol{z}, z_s]$

结束循环

$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}) = \Big[\prod_{j=1}^{d}(1 + \gamma_j[2\zeta(2\alpha)]) - T_d(z_d)\Big]^{1/2}$

由于 $\mathcal{K}$ 和 $\mathcal{M}$是循环矩阵，因此可以对这两个矩阵的第一列应用离散傅里叶变换（DFT），从而得到它们的特征值，即

$$\widehat{k}_\ell = \sum_{j=0}^{n-1} \mathcal{K}_{j,0}\, \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}\frac{\ell j}{n}} \text{ and } \widehat{m}_\ell = \sum_{j=0}^{n-1} \mathcal{M}_{j,0}\, \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}\frac{\ell j}{n}} \text{ for } \ell = 0, 1, \ldots, n-1.$$

矩阵 $\mathcal{K}^{-1}\mathcal{M}$ 也是一个循环矩阵，其特征值为 $\widehat{m}_\ell/\widehat{k}_\ell$，其中 $\ell = 0, .., n-1$。因此，$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 可根据（3.4）通过以下方式计算，

$$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}) = \left[\prod_{j=1}^{d}(1 + \gamma_j[2\zeta(2\alpha)]) - \sum_{\ell=0}^{n-1}\frac{\widehat{m}_\ell}{\widehat{k}_\ell}\right]^{1/2},$$

从而得到 CBC 算法 2，其计算成本为 $\mathcal{O}(n^2\, d \log\, n)$。

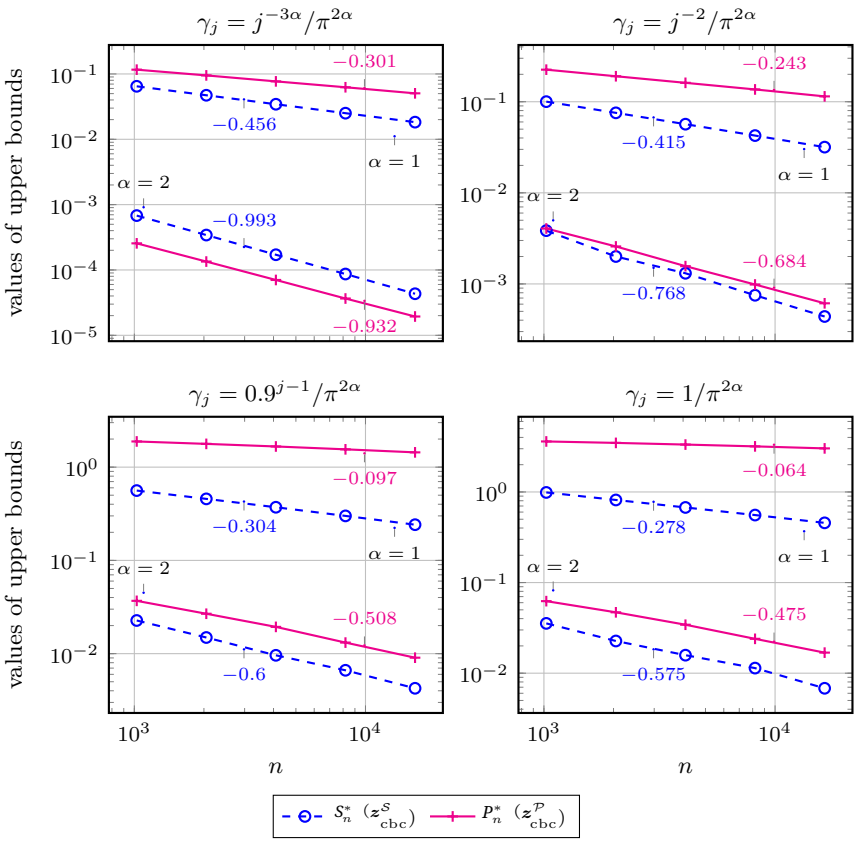


图1：对于不同的权重参数，分别通过相应的 CBC 构造得到的$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$ 和$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$ 的值，其中 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}}$ 和 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}}$ 对应于各自的 $n = 2^{10}$，2_{11}，……，2_{14}。维数设为 $d = 10$。每个子图中的负数分别表示相应直线的斜率。

5 数值结果

最后，我们给出使用 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 和 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 准则进行数值实验的结果。我们绘制了在不同乘积形式权重参数选择下 $\gamma_j > 0$ 对 $\alpha = 1$ 和 $\alpha = 2$ 的两个上界。权重参数包含一个缩放因子 $\pi^{-2\alpha}$，因此两个准则的可计算表达式都只包含有理数。这样，我们便能通过解析计算测试用例，轻松验证数值结果。请注意，生成向量 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}}$ 和 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}}$ 是针对每个 n，分别由各自的 CBC 算法构造的。

图1绘出了维数为 $d = 10$时，上界随点数 $n = 2^m$ 变化的情况，其中 $m = 10$、……、14。我们发现，在几乎所有选定场景中，当 $d = 10$时，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$的表现都优于$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$,

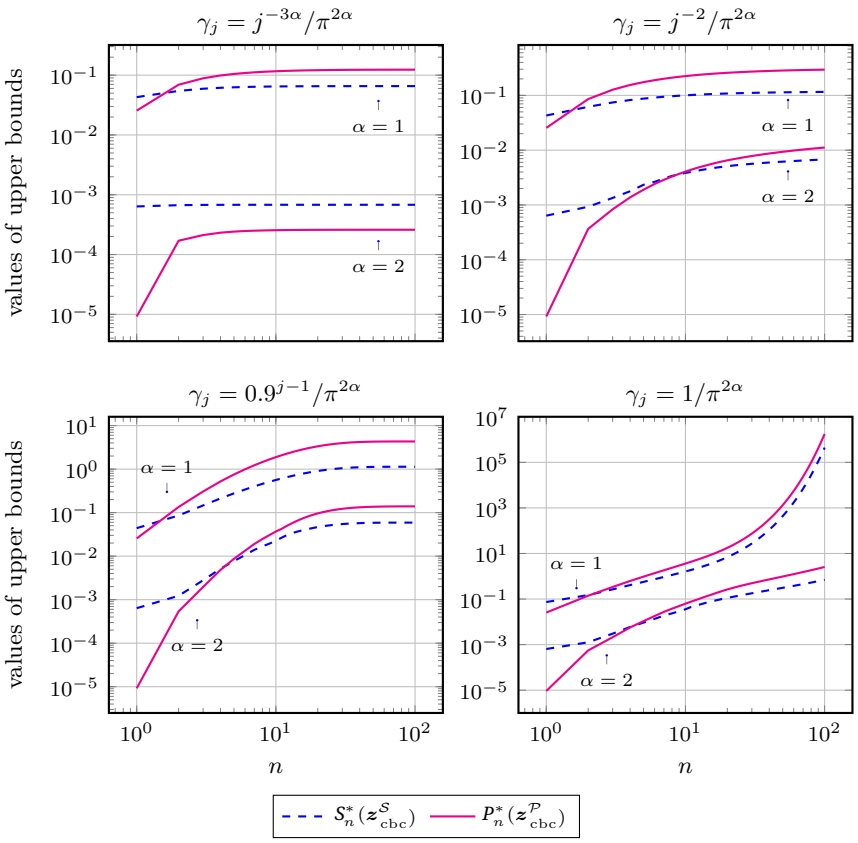


图2：对于不同的权重参数，采用各自的 CBC 构造得到的生成向量对应的 d with $d = 1$、2、.....、100 时，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$ 和 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$ 的取值。点数固定为 $n = 2^{10}$。

但 $\gamma_j = j^{-3\alpha}/\pi^{2\alpha}$ 在 $\alpha = 2$时的情况除外。图1各子图中的负数表示 $\delta > 0$ 时以$\mathcal{O}(n^{-\nu+\delta})$表示的收敛速率 ν。我们观察到，当ν 接近 $\alpha/2$时，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$呈现出 [3, 13] 中证明的趋势，快速衰减权重下尤为明显。然而，对于 $\alpha = 1$，$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$的收敛速率表现不如$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$，慢速衰减权重 $\gamma_j = 0.9^{j-1}/\pi^{2\alpha}$ 和等权重 $\gamma_j = 1/\pi^{2\alpha}$下尤为明显。

为了观察维数如何影响各项指标的表现，我们绘制了图2。该图展示了固定 $n = 2^{10}$ 时，维数从第一维增加到 $d = 100$ 时的两个上界。我们看到，尽管图1表明在大多数情况下，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的表现优于 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$，但在较小维数下并非如此，此时 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 可能优于 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 判据。对于 $d = 10$ 和 $n = 2^{10}$，图2与图1的发现一致。

我们绘制图3，以观察使用算法 2 构造的生成向量

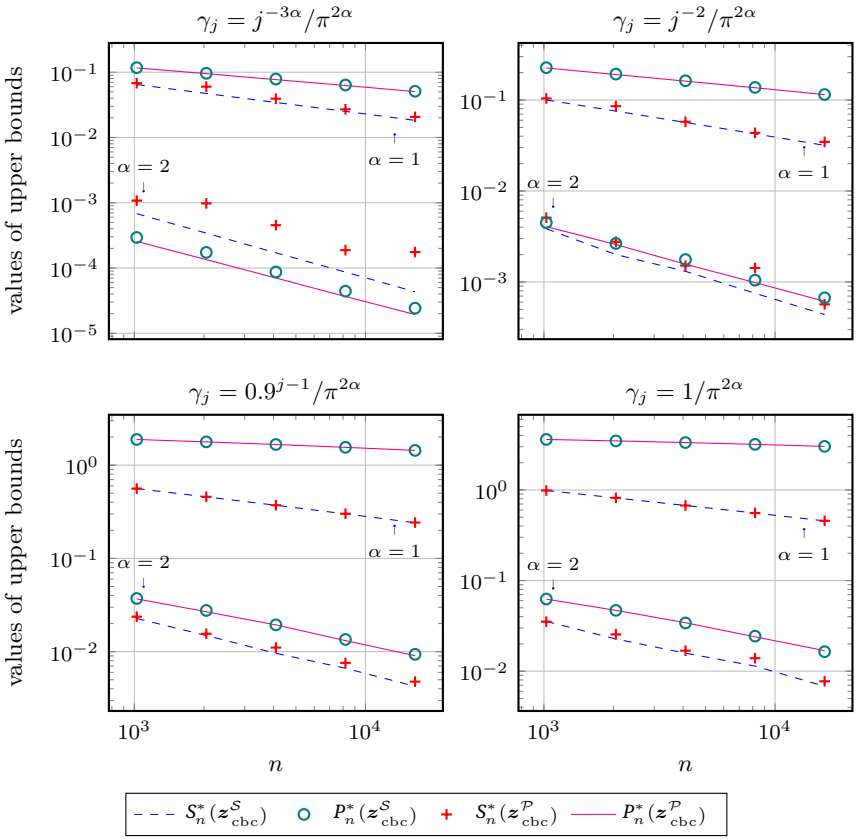


图3：对于不同的权重参数，使用各自的 CBC 构造得到的 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}}$和 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}}$ 对应的 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$、$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$、$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$ 和$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$ 的取值，其中 $n = 2^{10}, 2_{11}, \ldots, 2_{14}$。维数设为 $d = 10$。

$\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}}$ 时$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$的表现，以及使用算法1构造的生成向量 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}}$ 时$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$的表现。该图直接比较$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$在 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}}$ 和 $\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}}$处的取值。我们也对$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$进行了同样的比较。可以看到，在所有选定场景中，$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$与$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$都非常相似；而对于快速衰减权重，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{P}})$在 $\alpha = 1$ 时与$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z}_{\mathrm{cbc}}^{\mathcal{S}})$较为接近，但在 $\alpha = 2$ 时则没有那么接近。我们发现，即使使用$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$构造格点，按照$\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$判据衡量的误差也很小。

对于采用乘积权重的近似，使用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 作为搜索准则的快速 CBC 构造，其总体计算成本为 $\mathcal{O}(dn\log\ n)$ [4],；而使用 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 的 CBC 构造，其计算成本为 $\mathcal{O}(dn^2 \log n)$，因此使用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 构造格点效率更高。

对于较大的 n （尤其是当 $\alpha > 1$ 时），在计算 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 时出现的矩阵 $\mathcal{M}$ 的元素会开始非常接近 1，从而导致

矩阵病态。因此，双精度无法提供足够的精度，必须使用任意精度计算才能准确计算特征值，这会增加计算时间。只有在使用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 进行计算时，n 非常大才会出现此类问题。

我们得出结论，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 是生成用于多元逼近的格点算法时更有用的选择。从实现角度来看，我们发现使用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 进行计算更加高效。我们可以利用快速 CBC算法1 计算 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$；与使用 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 作为搜索准则的算法 2 相比，该方法的计算成本更低。此外，对于 n 的某些取值，$\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 可以使用双精度计算，而计算 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 则需要任意精度。从数值角度来看，我们还发现，对于所测试的情况，即使使用 $\mathcal{P}_n^*(\boldsymbol{z})$ 进行测量，利用 $\mathcal{S}_n^*(\boldsymbol{z})$ 生成的格点的最坏情况误差上界也仅存在很小差异。

致谢 我们谨此感谢澳大利亚研究理事会（DP21010083）和弗兰德斯研究基金会（FWO G091920N）提供的支持。同时，我们也要感谢 Vesa Kaarnioja 和 Ronald Cools 分享他们的见解。

参考文献

[1] Belhadji, A., Bardenet, R., Chainais., P.：连续体积采样的核插值。载于：第37届国际机器学习会议（ICML'20）论文集。JMLR.org，第68篇，725–735（2020）。[2] Byrenheid, G., Kämmerer, L., Ullrich, T., Volkmer, T.：混合混合光滑性空间中秩-1格点采样的紧误差界。Numer. Math. **136**，993–1034（2017）[3] Cools, R., Kuo, F.Y., Nuyens, D., Sloan, I.H.：具有一般权重的周期空间中多元逼近的格点算法。Contemp. Math. **754**，93–113（2020）[4] Cools, R., Kuo, F.Y., Nuyens, D., Sloan, I.H.：利用POD权重和SPOD权重进行多元逼近的格点算法的快速 CBC 构造。Math. Comput. **90**，787–812（2021）[5] Cools, R., Nuyens, D.：格点规则的比利时观点。载于：Keller, A., Heinrich, S., Niederreiter, H.（编）2006年蒙特卡罗与准蒙特卡罗方法，第3–21页。Springer（2008）[6] De Marchi, S., Schaback, R., Wendland, H.：用于径向基函数插值的近乎最优、与数据无关的点位置。Adv. Comput. Math. **23**，317–330（2005）[7] Dick, J., Kritzer, P., Kuo. F.Y., and Sloan, I.H.：卷积型核的第二类Fredholm积分方程的格点Nyström方法。J. Complexity，**23**，752–772（2007）。[8] Dick, J., Kuo, F.Y., Sloan, I.H.：高维积分：准蒙特卡罗方法。数值学报 **22**，133–288（2013）

[9] Dolbeault, M. Krieg, D., Ullrich, M.： L_2中的采样数的精确上界。Appl. Comput. Harmon. Anal. **63**，113–134（2023）。[10] Gross, C., Iwen, M.A., Kämmerer, L., Volkmer, T.：构造多个近乎最优规模秩-1格的确定性算法。Adv. Comput. Math. **47**，86（2021）[11] Kaarnioja, V., Kazashi, Y., Kuo, F.Y., Nobile, F., Sloan, I.H.：通过基于周期核的格点插值实现快速逼近及其在不确定性量化中的应用。Numer. Math. **150**，33–77（2022）[12] Kämmerer, L., Volkmer, T.：基于沿多个秩-1格进行采样的多元周期函数逼近。J. Approx. Theory **246**，1–27（2019）[13] Kuo, F.Y., Mo, W., Nuyens, D.：构造具有合数个点的嵌入式格点算法，用于多元函数逼近。doi:10.48550/ARXIV.2209.01002[14] Kuo, F.Y., Sloan, I.H., Woźniakowski, H.：最坏情形设置下的多元逼近格点规则。载于：Niederreiter, H., Talay, D.（编）2004年蒙特卡洛与准蒙特卡洛方法，第289–330页。Springer（2006）[15] L'Ecuyer, P., Munger, D.：关于随机移位格规则的优值。载于：Plaskota, L., Woźniakowski, H.（编）2010年蒙特卡洛与准蒙特卡洛方法，第133–159页。Springer（2012）[16] Nuyens, D.：优良格点规则与多项式格规则的构造。载于：Kritzer, P., Niederreiter, H., Pillichshammer, F., Winterhof, A.（编）均匀分布与准蒙特卡洛方法。拉东计算与应用数学系列，第15卷，第223–256页，De Gruyter（2014）[17] Nuyens, D., Cools, R.：平移不变再生核希尔伯特空间中秩-1格点规则逐分量构造的快速算法。Math. Comp. **75**，903–920（2006）[18] Nuyens, D., Cools, R.：具有非素数个点的秩-1格点规则的快速逐分量构造。J. Complexity**22**，4–28（2006）[19] Novak, E., Sloan, I.H., Woźniakowski, H.：经典和量子计算机上加权 Korobov 空间逼近的可处理性。Found. Comput. Math. **4**，121–156（2004）[20] Olver, F.W.J., et al.：NIST数学函数数字图书馆。http://dlmf.nist.gov/（2022）。访问日期：2022年12月7日[21] Sloan, I.H., Joe, S.：多重积分的格点方法。牛津大学出版社，牛津，1994年[22] Schaback, R.：径向基函数插值的误差估计与条件数。Adv. Comput. Math. **3**，251–264（1995）[23] Schaback, R., Wendland, H.：核技术：从机器学习到无网格方法。数值学报 **15**，543–639（2006）

[24] Wu, Z.M., Schaback, R.：散乱数据径向基函数插值的局部误差估计。IMA J. Numer. Anal.**13**，13–27（1993）[25] Zeng, X.Y., Kritzer, P., Hickernell, F.J.：使用积分格点和数字网的样条方法。Constr. Approx. **30**，529–555（2009）[26] Zeng, X.Y., Leung, K.T., Hickernell, F.J.：使用格设计的周期问题样条误差分析。载于：Niederreiter, H., Talay, D.（编），2004年蒙特卡洛与准蒙特卡洛方法，第501–514页。施普林格（2006）