

Bayes–adatfeldolgozás IV

Kálvin Sándor

2014 november 13

Paraméter-nélküli becslés

Legyen fizikai modellünk olyan, hogy a paramétereinek között szerepel egy folytonos $f(x)$ függvény, ahol x valamilyen helyváltozó.

Az $f(x)$ függvény tetszőleges lehet így nem jellemezhető néhány paraméterrel. Példa lehet erre, ha valamely plazmaparaméter folytonos helyfüggését akarjuk meghatározni.

A $\{d_k\}$ mérési adatok állnak rendelkezésre ahhoz, hogy következtetést vonjunk le az $f(x)$ függvényről, azaz, hogy meghatározzuk a $p(f(x)|\{d_k\}, I)$ 'poszterior eloszlást'.

Ezt a problémát free-form is feladatnak nevezzük.

Paraméter-nélküli becslés

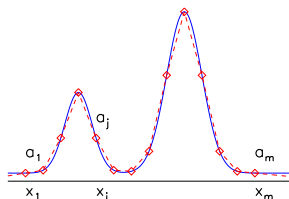
A poszterior meghatározásához meg kell adnunk a likelihood és a prior eloszlásokat.

A Bayes módszer csak véges paraméterek esetén alkalmazható, így a $f(x)$ függvényt alkalmas módon parametrizálni kell.

Lehetséges megoldások:

Az $f(x)$ függvény teljes függvényrendszer szerinti sorfejtése és csak véges sok tag figyelembevétele.

Az $f(x)$ függvényt bizonyos $\{x_j\}$ helyeken felvett $\{a_j\}$ értékeivel parametrizáljuk, és a függvényt ezen pontok közötti interpolálással adjuk meg.



Paraméter-nélküli becslés

Ha a meghatározandó $\{a_j\}$ paraméterek száma nagyobb mint a mérési adatok száma, vagy
ha a mérési adatok egy halmaza alig függ a meghatározandó $f(x)$ függvényről, és az $\{a_j\}$ paraméterekre egyenletes prior eloszlást használunk, akkor az $\{a_j\}$ paraméterek hibája nagy lehet (nagyon érzékeny a mérési hibákra) és/vagy a poszterior eloszlás lokális maximumokkal rendelkezik.

Nem-egyenletes prior használatával elérhető, hogy a poszterior eloszlás egyértelmű maximummal legyen jellemezhető. Ennek egyik lehetséges módja az úgynevezett regularizáció. Regularizáció esetén fizikailag indokolható megkötést adunk meg az $f(x)$ függvényre.

Paraméter-nélküli becslés

Regularizáció

Az $\{a_k\}$ paraméterek becslését a

$$L = -K \cdot S(\hat{f}(x)) + \ln [p(\{d_k\}|\{a_j\}, \alpha, \dots, I)p(\alpha, \dots | I)]$$

kifejezést maximalizálásával kaphatjuk meg.

$\hat{f}(x)$ az $\{a_j\}$ paraméterek által meghatározott függvény.

α, \dots a fizikai modellünk egyéb paraméterei.

$p(\{d_k\}|\{a_j\}, \alpha, \dots, I)$ a likelihood.

$p(\alpha, \dots | I)$ az α, \dots paraméterekre vonatkozó prior.

K a regularizációs paraméter, $S()$ a regularizációs függvény, ami az $f(x)$ fizikailag elvárt tulajdonságát jellemzi. A regularizációs függvényt úgy kell megválasztani, hogy értéke annál nagyobb legyen minél inkább eltér az $\hat{f}(x)$ függvény a fizikailag elvárt tulajdonságtól.

Paraméter-nélküli becslés

Vegyük az L kifejezés exponenciálisát.

$$\exp(L) = p(\{d_k\}|\{a_j\}, \alpha, \dots, I) p(\alpha, \dots | I) \exp \left[-K \cdot S(\hat{f}(x)) \right]$$

Az $\exp(L)$ kifejezés a poszterior eloszlással arányos, ahol a prior a

$$p(\alpha, \dots | I) \exp \left[-K \cdot S(\hat{f}(x)) \right]$$

$\hat{f}(x)$ az $\{a_j\}$ paramétereiktől függ, így a regularizáció az $\{a_j\}$ paraméterekre egy nem-egyenletes prior eloszlás alkalmazása.

Független, Gauss zajjal jellemezhető mérések esetén a regularizációs paraméter értékét úgy kell meghatározni, hogy

$\chi^2 = \sum_k^n (d_k - F_k)^2 / \sigma_k^2 \approx n$ legyen, ahol n a mérések száma. Ezen feltétel biztosítja, hogy a megoldás összeegyeztethető legyen a mért adatokkal.

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

A plazma elektronsűrűség meghatározásának egyik lehetséges módja a plazmába injektált semleges lítium nyaláb $2s$ - $2p$ atomi átmenetéhez tartozó nyaláb menti fényeloszlás mérése. A fényeloszlás függ a nyaláb menti elektronsűrűségtől, így a mérésből az elektronsűrűség profil meghatározható.

A mérés fizika modellje egyszerűsítve a következőképpen írható le: a $S(z)$ nyaláb menti fényintenzitást a

$$S(z, n_e(z), \alpha | I) = \alpha N_{2p}(z, n_e(z) | I)$$

egyenlet határozza meg, ahol N_{2p} a $2p$ atomi energiaszint betöltöttsége, z a nyaláb menti koordináta. Az α paraméter kapcsolja össze a $2p$ szint betöltöttségét a mért fényintenzitással.

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

Az N_i atomi szintek betöltöttségét a

$$\frac{dN_i(z)}{dz} = \sum_{j=1}^{M_{Li}} [n_e(z) a_{ij}(T_e(z), Z_{eff}(z), q(z), v_{Li}) + b_{ij}] N_j(z)$$

differenciálegyenlet rendszer határozza meg. a_{ij}, b_{ij} atomfizikai állandók, $T_e(z), Z_{eff}(z), q(z)$ a plazma hőmérséklete, effektív rendszáma és a szennyezők átlagos töltése és v_{Li} az atomok nyaláb menti sebessége. Ezen paramétereket ismertnek tételezzük fel. A modell meghatározandó paraméterei a nyaláb menti elektronsűrűség és az α paraméter. A $\{d_k\}$ mérési adatok a fényintenzitás értékei adott z_k helyeken, azaz $d_k = S(z_k, n_e(z), \alpha | I) + \varepsilon_k$. ε_k a mérések zaja, amiről feltételezzük, hogy Gauss eloszlású σ_k szórással.

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

A mérések függetlenségét felhasználva a likelihood a következő:

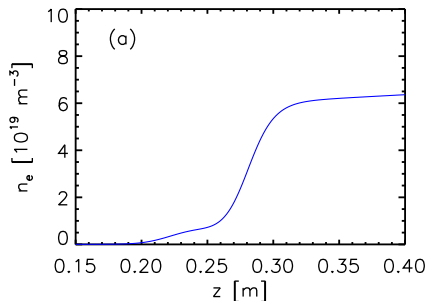
$$p(\{d_k\} | n_e(z), \alpha, I) = \\ = \frac{1}{\prod_k \sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left(\frac{d_k - S(z_k, n_e(z), \alpha | I)}{\sigma_k} \right)^2 \right]$$

Az $n_e(z)$ függvényt parametrizáljuk a $\{a_j\} = n_e(\{z_j\})$ értékekkel. A prior meghatározásánál azt a feltételt kell figyelembe venni, hogy mind a sűrűség mind az α paraméter csak pozitív értékeket vehet fel

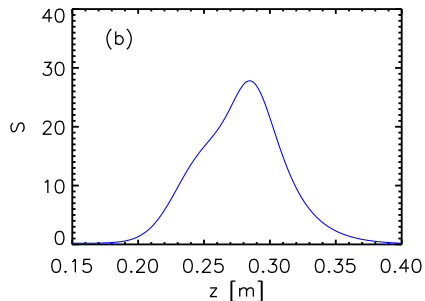
$$p^a(\{a_j\}, \alpha | I) = \begin{cases} \text{konstans} & \text{ha } a_j > 0 \text{ és } \alpha > 0 \\ 0 & \text{máshol.} \end{cases}$$

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

A feldolgozást egy numerikus szimuláción keresztül mutatjuk meg, azaz egy feltételezett elektronsűrűség profilt használva kiszámoltuk a mérési adatokat (a mérés hibáját Gauss zaj hozzáadásával modelleztük), majd ezen adatokat felhasználva végeztük el a kiértékelést.



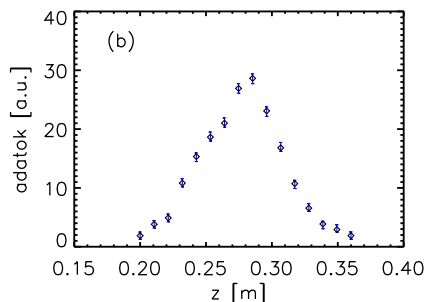
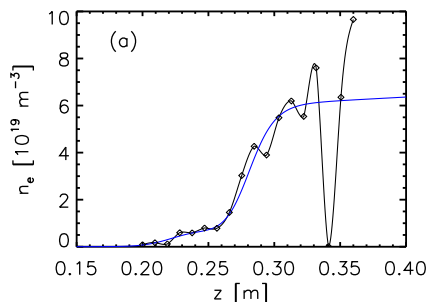
$n_e(z)$ elektronsűrűség profil.



Az $S(z)$ fényprofil.

Paraméternélküli becslés

A meghatározott sűrűségprofil regularizáció nélkül.



(a) Kék görbe – a numerikus szimulációnál használt eredeti profil.
Fekete görbe – a visszaállított profil. A \diamond a profil parametrizálásához használt interpolációs pontok.

(b) A mért adatok és a visszaállított sűrűségprofilból számolt zaj nélküli mérés (\diamond).

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

A következő feltételeket adhatjuk meg a profil fizikailag elvárt tulajdonságára: az első, hogy a profil általában monoton növekszik a nyaláb mentén. A második: hogy a profil lokálisan sima.

Regularizációval ezeket a tulajdonságokat figyelembe tudjuk venni a kiértékelés során. Az első feltétel a

$$p^m(\{a_j\}|I) = \exp \left\{ -R^m \left[\sum_i \frac{(a_{i+1} - a_i)^2}{(a_{i+1} + a_i)^2} (\operatorname{sgn}(a_i - a_{i+1}) + 1) \right] \right\},$$

a második feltétel a

$$p^s(\{a_j\}|I) = \exp \left\{ -R^s \int \left[\frac{d^2 \hat{n}_e(z)}{dz^2} \right]^2 dz \right\}$$

prior alkalmazásával érhető el.

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

Ezen prior eloszlások alkalmazása nem zárja ki, csak bünteti a fizikailag nemvárt tulajdonságokat. Ha a mérési adatok alátámasztják, akkor a megoldásként kapott profil nem mindenütt felel meg az elvárásoknak.

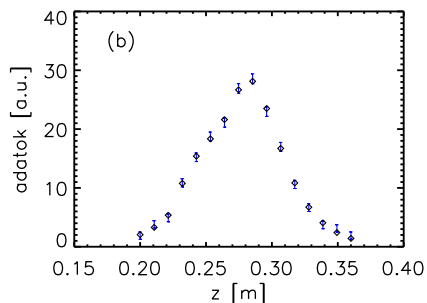
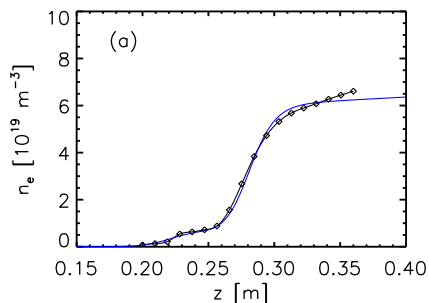
A Bayes-tételnek megfelelően a poszterior eloszlás

$$p(\{a_j\}, \alpha | \{d_k\}, I) \propto p(\{d_k\} | \{a_j\}, \alpha, I) \times \\ \times p^a(\{a_j\}, \alpha | I) p^m(\{a_j\} | I) p^s(\{a_j\} | I).$$

A poszterior eloszlás logaritmusát véve belátható, hogy R^m és R^s regularizációs paraméterek. Ezen paraméterek alkalmas megválasztásával elérhető, hogy a meghatározott eloszlás kompatibilis legyen a mért adatokkal és fizikailag elvárható tulajdonságú legyen.

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás

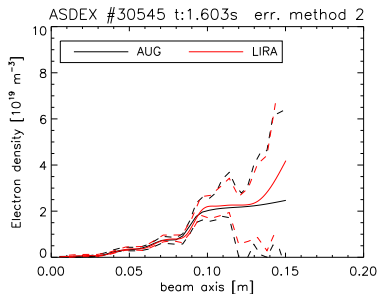
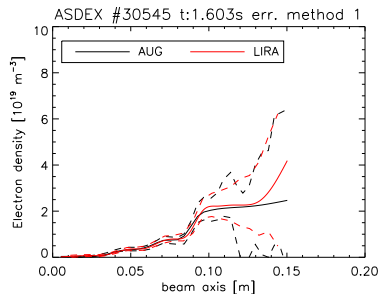
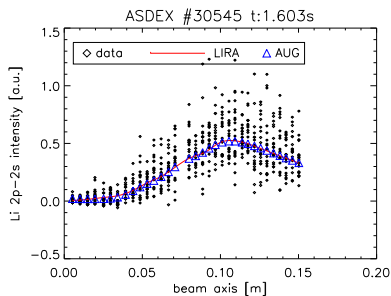
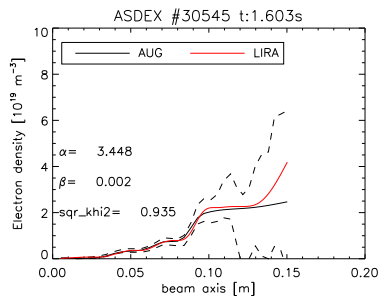
A meghatározott sűrűségprofil regularizáció alkalmazásával.



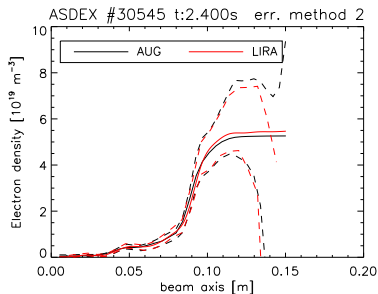
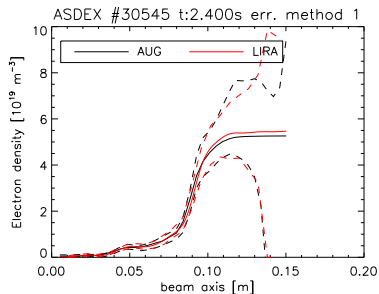
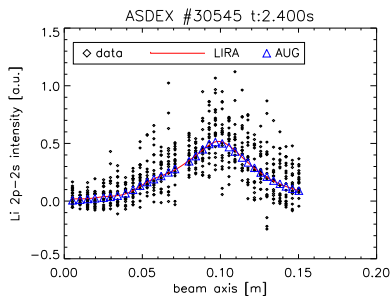
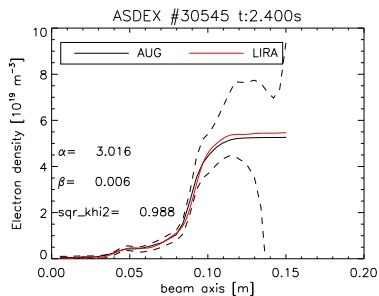
(a) Kék görbe – a numerikus szimulációnál használt eredeti profil.
Fekete görbe – a visszaállított profil. A \diamond a profil parametrizálásához használt interpolációs pontok.

(b) A mért adatok és a visszaállított sűrűségprofilból számolt zaj nélküli mérés (\diamond).

Paraméter-nélküli becslés – alkalmazás



Paraméternélküli becslés – alkalmazás



Pelletek térfogatának meghatározása

A plazmába belőtt fagyasztott pelleteket használunk a plazma ionjainak pótlására illetve instabilitások kontrolására. Ezekben a kísérletekben fontos paraméter a pellet térfogata. A belőtt pelletek henger alakúak, méretük kb. mm, de nem azonosak.

A pelletek térfogatának meghatározására a következő mérési eljárás lett kifejlesztve. A felgyorsított pelletek elhaladnak egy kamera előtt, ahol kétdimenziós árnyékkép készül róluk (Meghatározzuk a kétdimenziós vetületét.).

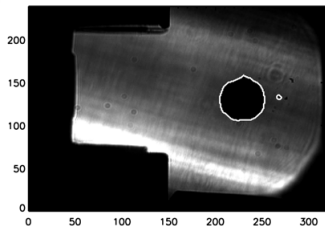
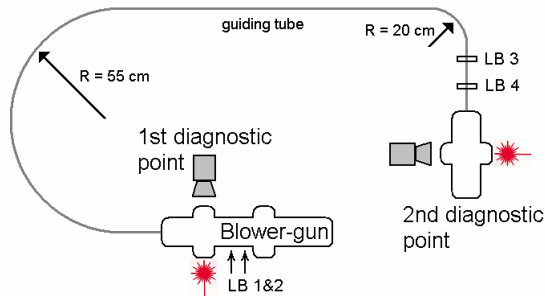
A pellet térfogatát ezen képekből kell meghatározni.

Mivel a kétdimenziós vetületből nem határozható meg egyértelműen a pellet térfogata, valamint a pelletek véletlenszerű irányítottsággal haladnak el a kamera előtt, a térfogatra csak valószínűségi értékeket adhatunk meg.

A kiértékelés során a Bayes elméletet fogjuk használni.

Pelletek térfogatának meghatározása

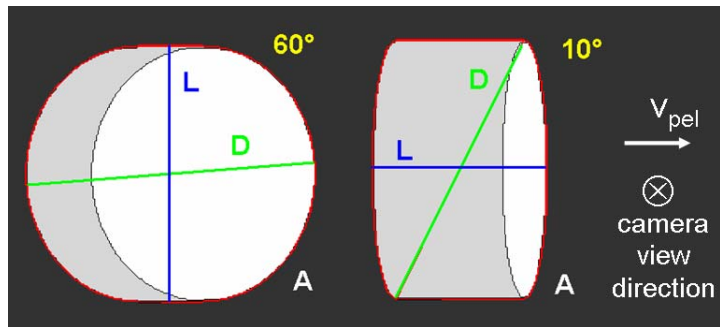
Mérési elrendezés.



A baloldali ábra a kísérleti berendezés. A jobboldali képen egy pelletről készült felvétel látható.

Pelletek térfogatának meghatározása

A felvételek kiértékelése, azaz a mérési adatok meghatározása.



A képekből a következő paramétereket határoztuk meg:

A pellet képének

legkisebb mérete (L)

legnagyobb mérete (D)

területe (A)

Pelletek térfogatának meghatározása

Legyen az összetett hipotézisünk, hogy a pellet henger ami a magasságával (H) és sugarával(R) jellemezhető. A pellet tengelye ϕ szöget zár be a kamera tengelyével. (A mérési adatok csak a ϕ szögtől függenek.)

A hipotézis paraméterei és mért adatok közötti összefüggés legyen

$$L = L(H, R, \phi) \quad D = D(H, R, \phi) \quad A = A(H, R, \phi)$$

Analitikusan csak a $L = L(H, R, \phi)$ és $A = A(H, R, \phi)$ adható meg, így a számolásokat numerikusan kell elvégezni.

A numerikus számolások miatt H -t, R -t ϕ diszkrét paraméterként kezeljük.

Legyenek ezek h_i , r_j és ϕ_k .

Legyen egy mérési adatunk l , d és a .

Pelletek térfogatának meghatározása

A Bayes tétel használva a h_i , r_j és ϕ_k paraméterek poszterior eloszlása

$$p(h_i, r_j, \phi_k | l, d, a, l) \propto p(l, d, a | h_i, r_j, \phi_k, l) p(h_i, r_j, \phi_k | l).$$

A likelihood a következő alakban adható meg

$$p(l, d, a | h_i, r_j, \phi_k, l) \propto \exp \left\{ \frac{(l - L(h_i, r_j, \phi_k))^2}{2\sigma_l^2} \right\} \dots$$

σ_l az l meghatározásának hibája...

Feltételezhetjük, hogy H , R és ϕ prior eloszlása független, így

$$p(h_i, r_j, \phi_k | l) = p(h_i | l) p(r_j | l) p(\phi_k | l)$$

$$p(h_i | l) = \begin{cases} C & \text{ha } 0.1\text{mm} \leq h_i \leq 1.1\text{mm} \\ 0 & \text{máshol} \end{cases}$$

Pelletek térfogatának meghatározása

$$p(r_j|l) = \begin{cases} C & \text{ha } 0.1\text{mm} \leq r_j \leq 1.1\text{mm} \\ 0 & \text{máshol} \end{cases}$$

$$p(\phi_k|l) = \begin{cases} \sin(\phi_k) & \text{ha } 0 \leq \phi_k \leq 90^\circ \\ 0 & \text{máshol} \end{cases}$$

ϕ érdektelen paraméter, h és r valószínűségi eloszlását marginalizációval kapjuk meg.

$$p(h_i, r_j|l, d, a, l) = \sum_k p(h_i, r_j, \phi_k|l, d, a, l)$$

$$p(h_i|l, d, a, l) = \sum_j p(h_i, r_j|l, d, a, l)$$

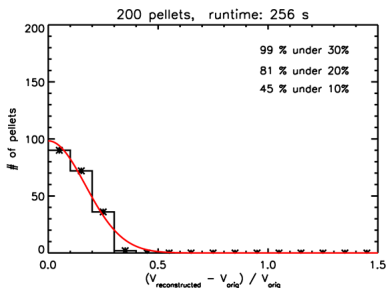
$$p(r_i|l, d, a, l) = \sum_i p(h_i, r_j|l, d, a, l)$$

Pelletek térfogatának meghatározása

A H és az R paraméterek valószínűségi eloszlásának ismeretében meghatározható a pellet térfogatának várható értéke.

$$\bar{V} = \sum_{i,j} V(h_i, r_j) p(h_i, r_j | l, d, a, l)$$

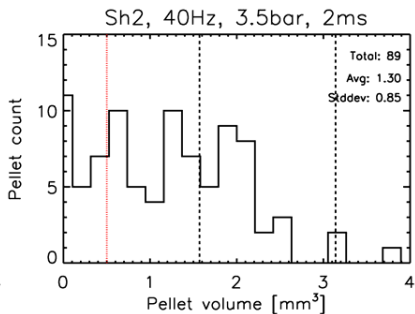
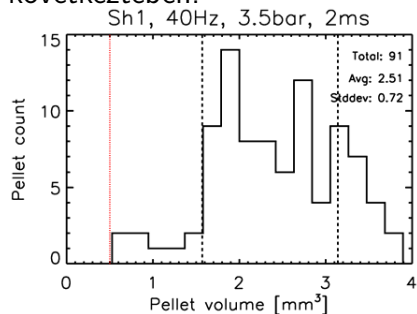
Egy numerikus kísérlet eredménye.



A térfogat meghatározásának relatív hibája.

Pelletek térfogatának meghatározása

A pellet térfogatának csökkenése a vezetősőben történő párolgás következtében.



baloldali ábra – a pelletek térfogatának eloszlása a vezetőső elején

jobboldali ábra – a pelletek térfogatának eloszlása a vezetőső végén