

HELSINGIN YLIOPISTO — HELSINGFORS UNIVERSITET — UNIVERSITY OF HELSINKI

Tiedekunta/Osasto — Fakultet/Sektion — Faculty		Laitos — Institution — Department	
Matemaattis-luonnontieteellinen		Matematiikan ja tilastotieteen laitos	
Tekijä — Författare — Author			
Otto Lamminpää			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Tilastollisen inversio-ongelman dimensioreduktio käyttäen informatiivisia suuntia			
Oppiaine — Läroämne — Subject			
Soveltava matematiikka			
Työn laji — Arbetets art — Level		Aika — Datum — Month and year	
Pro gradu -tutkielma		Kesäkuu 2017	
		Sivumäärä — Sidoantal — Number of pages	
		68 s.	
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Tutkielmassa esitellään laskennallisten inversio-ongelmien teoriaa erityisesti tilastollista lähestymistapaa käyttäen. Kirjallisuuden ja tieteellisten artikkelien perusteella tutustutaan mittauksen informaatioisisältöön ja esitellään menetelmä inversio-ongelman dimension alentamiseksi. Tätä menetelmää sovelletaan ilmakehän kaukokartoitukseen metaanin tiheysprofiilin ratkaisemisen nopeuttamiseksi.</p> <p>Laskennallisessa inversio-ongelmassa ratkaistaan yhtälö</p> $y = F(x) + \varepsilon, \quad (1)$ <p>missä $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ on suora malli tila-avaruudesta \mathbb{R}^n data-avaruuteen \mathbb{R}^m, $x \in \mathbb{R}^n$ on tuntematon, $y \in \mathbb{R}^m$ on kohinallinen mittaus ja $\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ on esimerkiksi mittausvirheestä johtuvaa kohinaa.</p> <p>Tilastollisessa inversiossa mallinnetaan kaikkia ongelman parametreja satunnaismuuttujilla. Käyttämällä Bayesin kaavaa saadaan inversio-ongelman ratkaisuksi posterioritodennäköisyysjakauma</p> $\pi(x y) \propto \pi(y x)\pi_{pr}(x), \quad (2)$ <p>missä $\pi(y x)$ on mittauksen y uskottavuus tilalla x ja $\pi_{pr}(x)$ on tuntemattoman x prioritodennäköisyysjakauma.</p> <p>Tutkielmassa rajoitutaan tarkastelemaan reaaliavaruuksien välisiä kuvauksia, mutta tulokset voidaan yleistää koskemaan yleisempiä Hilbertin avaruuksia. Matemaattisena esitietona esitellään lieaarialgebrasta ominais- ja singulaariarvohajotelmat ja näytetään esimerkkinä niiden käyttöä pääkomponenttianalyysissä.</p> <p>Inversio-ongelmien klassista teoriaa käydään läpi vain pintapuolisesti, ja käsitellään syvemmin tilastollista lähestymistapaa normaalijakautuneita satunnaismuuttujia käyttäen. Annetaan myös joitain esimerkkejä priorien rakentamisesta ja käytöstä. Numeerisista ratkaisumenetelmistä esitellään lyhyesti tutkielmassa käytettävät Levenbergin-Marquardt'n algoritmi (LevMar) sekä Markovin ketju Monte Carlo -menetelmä (MCMC).</p> <p>Mittaus sisältää usein vain rajallisen määrän informaatiota. Lähdekirjallisuuden tulosten perusteella esitellään tapa tutkia mittauksen informaatioisisältöä sekä löytää inversio-ongelman informatiivinen aliavaruus (LIS). Näytetään myös tässä aliavaruudessa löydetyn ratkaisun approksimoivan ongelman oikeaa ratkaisua mahdollisimman hyvin. Lopuksi sovelletaan kehitettyä menetelmää Ilmatieteen laitoksen Sodankylän tutkimusasemalla suoritettavan FTIR-mittauksen yksinkertaistettuun versioon sekä vertaillaan täyden ja redusoidun avaruuden ratkaisuja keskenään.</p> <p>Tutkielma on tehty kokonaisuudessaan Ilmatieteen laitoksella Uudet havaintomenetelmät -yksikön Ilmakehän kaukokartoitus -ryhmässä vuosina 2016-2017. Työn ohjaajina toimivat Prof. Samuli Siltanen (Helsingin yliopisto, matematiikan ja tilastotieteen laitos), prof. Johanna Tamminen (Ilmatieteen laitos) sekä FT Marko Laine (Ilmatieteen laitos).</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
Inversio-ongelmat, tilastollinen inversio, dimensioreduktio, informaatioisisältö			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Kumpulan tiedekirjasto			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			

Tilastollisen inversio-ongelman dimensioreduktio
käyttäen informatiivisia suuntia

Otto Lamminpää

Sisältö

1 Johdanto	3
1.1 Esipuhe	3
1.2 FTIR-mittaus	4
2 Esitietoja	8
2.1 Ominaisarvohajotelma	8
2.2 Neliömuodon pääakselit	9
2.3 Singulaariarvohajotelma	10
3 Inversio-ongelmat	12
3.1 Klassisista inversio-ongelmista	12
3.1.1 Lineaarisista inversio-ongelmista	13
3.2 Tilastollinen inversio	16
3.2.1 Teorian muotoilu	17
3.3 Normaali-jakautunut satunnaismuuttuja	19
3.3.1 Estimaatit	22
3.3.2 Priorista	23
3.4 Markovin ketju Monte Carlo -menetelmä	25
4 Informaatio-sisältö	27
4.1 Tila- ja data-avaruus	27
4.2 Kuinka monta riippumatonta komponenttia voidaan mitata?	31
4.2.1 Mittauksen informaatio-sisältö verrattuna kohinaan	31
4.2.2 Vapausasteet	33
5 Posteriorijakauman informatiiviset suunnat	35
5.1 Määritelmiä	36
5.2 Lineaariset ongelmat	37
5.3 Epälineaariset ongelmat	42

5.4	Posteriorin approksimointi	44
6	Laskennalliset sovellukset	48
6.1	Johdannon esimerkki	48
6.2	LISin rakentaminen	49
6.3	Tulokset	50
6.4	Yhteenveto ja jatkokehitysideoita	54
	Loppupuhe	55
	Liitteet	56
	Kirjallisuutta	66

Luku 1

Johdanto

1.1 Esipuhe

Tässä tutkielmassa esitellään tilastollinen lähestymistapa laskennallisten inversio-ongelmien ratkaisemiseen. Inversio-ongelmalla tarkoitetaan tilannetta, jossa mitatusta datasta pyritään selvittämään kiinnostuksen kohteena olevan suureen tai parametrin arvo, jota ei ole suoraan havaittu. Tämä on päinvastainen lähestymistapa verrattuna tavanomaiseen ongelman asetteluun, missä alkuarvoista pyritään ratkaisemaan lopputulos. Inversio-ongelmat muodostavat aktiivisen ja kasvavan poikkitieteellisen tutkimusalan, joka matematiikan lisäksi sivuaa esimerkiksi fysiikkaa, insinööritieteitä ja tilastotiedettä. Kehitetyillä menetelmillä ja teoreemilla onkin usein lukuisia hyvin erilaisia sovelluskohteita ongelmanasettelun yleisluonteisuuden seurauksena.

Tutkielman päätavoite on esitellä nykyaikaista tutkimusta laskennallisesti raskaiden inversio-ongelmien ulottuvuuden alentamiseksi sekä implementoida esitellyn teorian pohjalta ratkaisumenetelmä realistiseen ongelmaan. Käsittelemme läpi tutkielman esimerkkinä ilmakehän kaukokartoitusta, eli ilmakehän koostumuksen mittausta esimerkiksi satelliiteista tai maan pinnalta spektrometria käyttämällä. Ilmakehän kaukokartoitus on yhteiskunnallisesti ja globaalisti merkittävä tutkimuskohde, sillä ilmakehästä saatava tarkka tieto luo tieteellistä pohjaa ilmastopäätöksille sekä antaa ihmisille pohjan perusteltujen mielipiteiden muodostamiseen ympäristöasioista.

Johdantoluvussa esitellään tutkielman motivaationa olevana sovelluksena Ilmatieteen laitoksen Sodankylässä sijaitsevassa Arktisessa tutkimuskeskuksessa suoritettavaa ilmakehän koostumuksen mittausta. Ongelman näytetään olevan huonosti määritelty ja tämän takia hankalasti ratkeava. Luvussa 2 käydään läpi koko loppututkielman kannalta oleelliset ominais- ja singulaariarvohajotelmat sekä havainnollistuksissa hyödyllinen esimerkki neliömuodon pääakseleista. Kolmannessa luvussa esitellään lyhyesti klassinen lähestyminen huonosti määritelyihin inversio-ongelmiin sekä perehdytään syvemmin tämän tutkielman

kannalta keskeiseen tilastolliseen lähestymistapaan. Luku 4 keskittyy linearisoidun mittauksen informaation sisällön tarkasteluun ja siihen, kuinka paljon mittauksesta voidaan saada informaatiota. Viidennessä luvussa esitellään alan viimeaikaisten julkaisujen tuloksia (T. Cui & al., [5], sekä Spantini et al., [6]) ja kehitetään niiden perusteella dimensio-reduktiomenetelmä, jota sovelletaan luvussa 6 yksinkertaistettuun versioon Sodankylän mittauksesta. Lopuksi esitellään vielä joitain jatkotutkimusideoita.

1.2 FTIR-mittaus

Tarkastellaan Sodankylässä sijaitsevassa Ilmatieteen laitoksen Arktisessa tutkimuskeskuksessa (Arctic Research Centre, ARC) tehtävää ilmakehän koostumuksen mittausta. Sodankylään vuonna 2009 asennetun fouriermuuntavan infrapunaspektrometrin (FTIR: Fourier Transform Infrared Spectrometer) mittauksia käytetään esimerkiksi ylitselentävien satelliittien mittaaman datan validointiin. FTIR-laite mittaa suoraan auringosta laitteeseen tulevaa valoa ja edelleen ilmakehässä tapahtuvaa valon absorboitumista. Ilmakehän eri kaasujen (CO_2 , CH_4 , ...) absorptiospektristä voidaan laskea niiden *pystyprofiilit*, eli kyseisen kaasun osuus ilmakehässä korkeuden funktiona.

Todellisuudessa valo siroaa ilmakehässä osuessaan hiukkasiin, mutta tämä ilmiö on suhteellisen vähäistä ja voidaan tässä työssä esimerkkien yksinkertaistuksen vuoksi jättää huomiotta. Tarkastellaan absorptiospekttriä alueella, jossa on m aallonpituutta. Ilmakehän lävitse spektrometriin osuvan valon absorptiota mallinnetaan käyttäen *Lambertin-Beerin* lakia, joka antaa aallonpituudella $\lambda_j, j \in [1, \dots, m]$, maan pinnalle saapuvan valon intensiteetiksi

$$(1.1) \quad I(\lambda_j) = I_0(\lambda_j) \exp \left(- \sum_{k=1}^K \int_0^\infty \mathcal{C}_k(\lambda_j, z) \rho_k(z) dz \right) (a\lambda_j^2 + b\lambda_j + c) + d,$$

missä I_0 on auringosta lähtevän valon intensiteetti, ilmakehässä on K erilaista absorboivaa kaasua, $\mathcal{C}_k(\lambda_j, z)$ on kaasun k absorptiokerroin, joka riippuu korkeudesta z sekä valon aallonpituudesta, ja $\rho_k(z)$ on kaasun k tiheys korkeudella z . Toisen asteen polynomia ja vakiotermiä d käytetään kaavassa (1.1) kuvaamaan spektrin sileysominaisuuksia sekä korjaamaan spektraalisiirtymiä. Nämä ovat tiheyden kannalta vain vakiokertoimia, joten ne voidaan profiilin muotoa tarkasteltaessa jättää huomioimatta. Tästä eteenpäin tässä tutkielmassa oletetaan myös, että ilmakehässä olisi vain yksi absorboiva kaasu, eli kaavassa (1.1) $K = 1$. Näillä yksinkertaistuksilla saadaan kaavalle yleisesti käytetty muoto

$$(1.2) \quad - \ln \frac{I(\lambda_j)}{I_0(\lambda_j)} = \int_0^\infty \mathcal{C}(\lambda_j, z) \rho(z) dz.$$

Todellisissa mittauksissa ilmakehän korkeus sekä mittausten määrä ovat äärelliset. Näin kaavan (1.1) integraalia voidaan approksimoida summalla jakamalla ilmakehä n :ään l -korkuiseen kerrokseen. Kaavoissa oletamme myös, että valo osuu spektrometriin taivaan lakipisteestä suoraan ylhäältäpäin. Todellisuudessa mittauksen geometriassa olisi otettava huomioon valonsäteen lakipisteestä poikkeava tulokulma.

Huomautus 1.1. Muodossa (1.2) linearisoitua ongelmaa ei kuitenkaan ole tässä tutkielmassa mielekäästä ratkaista, sillä myöhemmin esiteltävän normaalijakautuneisiin satunnaismuuttujiin perustuvaa ratkaisumenetelmää ei voida käyttää. Logaritmin ottaminen kaavasta (1.1) muuttaa mittausvirheen statistiikkaa, jolloin sitä ei voida käsitellä normaalijakautuneena (katso esim [18]).

Tekemiemme oletusten ja yksinkertaistusten jälkeen absorptiokertoimet \mathcal{C}_i riippuvat tietyllä aallonpituudella vain korkeudesta $i = 0, 1, \dots, n$. Edellisen diskretoinnin myötä myös tiheys ρ_i saadaan jokaiselle kerrokselle erikseen arvioitua kerroksen sisässä vakioksi, jolloin profiilin tarkkuus paranee mitä tiheämpää jakoa n käytetään. Näillä yksinkertaisuksilla saadaan kaava (1.1) muotoon

$$(1.3) \quad I(\lambda_j) = I_0(\lambda_j) \exp \left(- \sum_{i=1}^n \mathcal{C}_i(\lambda_j) \rho_i l \right)$$

Edellisenkaltainen ongelma on yksinkertaista ratkaista minimoimalla tässä tapauksessa euklidinen *residuaalinormi*

$$(1.4) \quad \|R\|, \quad R = y - b$$

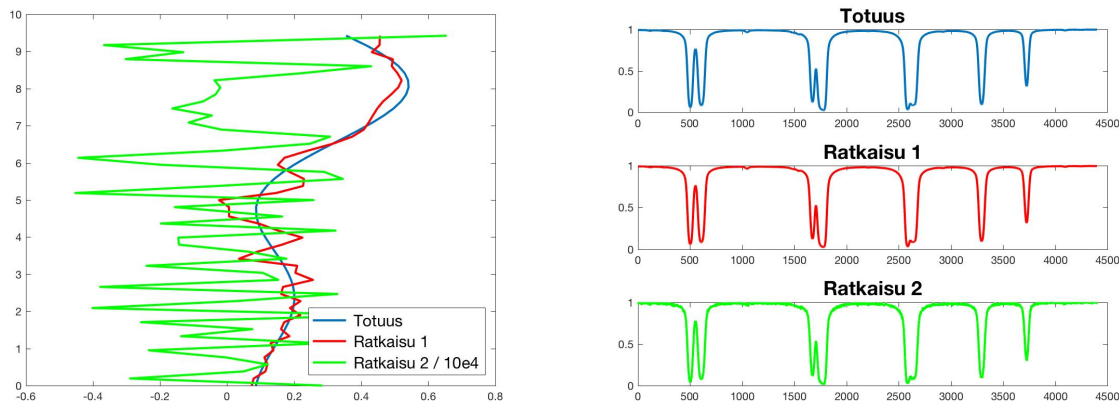
missä $y \in \mathbb{R}^m$ on data sekä $b \in \mathbb{R}^m$ on yhtälön 1.3 kuvaama malli. Merkinnällä $\|\cdot\|$ tarkoitetaan euklidista normia. Minimi löydetään lähimpänä oikeaa profiilia ρ olevalla ratkaisulla $\tilde{\rho}$. Ihanteellisessa mittauksessa saataisiin $R = 0$ eli $\rho = \tilde{\rho}$.

Mittauksen simuloimiseksi ja residuaalin minimoimiseksi käytetään tässä tutkielmassa Matlab-ohjelmistoa. Normalisoidaan ongelma siten, että $I_0(\lambda_j) = 1$ kaikilla aallonpituuksilla sekä että ilmakehän jokaisen kerroksen korkeus $l = 1$. Mittausta kuvaavaksi suoraksi malliksi saadan näin

$$(1.5) \quad I(x) = \exp(-Ax),$$

missä $x \in \mathbb{R}^n$ on tuntematon profiilin tiheysvektori sekä $A = BC$, missä $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pitää sisällään absorptiokertoimet m aallonpituudelle $\lambda_j, j \in [1, \dots, m]$ ja $C \in \mathbb{R}^{n \times p}$ on matriisi, joka keskiarvoistaa simuloidun jatkuvan p -ulotteisen profiilin ($p \gg n$) mitatuksi diskreetiksi n -ulotteiseksi profiiliksi. Tarkemmat yksityiskohdat löytyvät liitteestä 6.4 Matlab-koodeina.

Käytetään ongelman ratkaisemiseen seuraavaa yleisesti käytettyä numeerista optimintimenetelmää:



Kuva 1.1: Vasemmalla: todellinen profiili ja kaksi erillistä LevMar-algoritmilla ratkaistua profiilia, punainen ilman mittausvirhettä, vihreä pienellä kohinalla. Oikealla mallifunktio evaluoituna vastaavilla profiileilla.

Määritelmä 1.1. *Levenberg-Marquardt* (LevMar) algoritmi on epälineaarisiiin ongelmiin käytettävä iteratiivinen optimointialgoritmi pienimmän neliösumman estimaatin löytämiseksi. Tämä lasketaan minimoimalla lauseke

$$(1.6) \quad \mathcal{S}(x) := \|f(x) - y\|^2,$$

missä $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ on kahdesti differentioituva mallifunktio, $y \in \mathbb{R}^m$ mitattu data ja $\|\cdot\|$ on euklidinen normi avaruudessa \mathbb{R}^m . Algoritmin käyttämä iteraatio määritellään

$$(1.7) \quad x_{i+1} = x_i + (J^T(x_i)J(x_i) + \gamma_i \text{diag}(J^T(x_i)J(x_i)))^{-1} J^T(x_i)R(x_i),$$

missä matriisi $J(x_i) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ on mallifunktion f derivaatat pisteessä x_i sisältävä *jakobiaani*, $J_{kl} = \frac{\partial f_k}{\partial x_l}$, $k \in [1 \dots m]$, $l \in [1 \dots n]$, $R(x_i)$ on residuaali pisteessä x_i ja γ_i on erikseen määriteltävä kerroin, joka määrittää iteraation lopetuskohdan. Algoritmin johto sekä toiminta on käsitelty tarkemmin kirjassa [19], eikä siihen tämän tutkielman kontekstissa paneuduta tämän tarkemmin.

Simuloidaan sitten mittausa y ja etsitään residuaalin R minimoiva alkio $\tilde{\rho}$ LevMar-algoritmilla. Kuvassa 1.2 nähdään vasemmalla sinisellä alkuperäinen profiili, josta simuloidaan mallifunktiota käyttäen mittausvirhettä sisältämätöntä mittausa eli oikealla näkyvää absorptiospektriä. Edeltävä esimerkkitapaus on äärimmäisen yksinkertaistettu, mutta toimii silti hyvänä havainnollistuksena huonosti asetetusta ongelmasta.

Residuaalin minimoinnissa joudutaan ongelmiin jo silloin, kun simuloitu mittaus ei sisällä mittausvirhettä. Kuvassa 1.2 on esitetty punaisella minimoinnilla löydetty ratkaisu mittausvirhettä sisältämättömästä mittauksesta. Suuria hyppyjä sisältävä ja muutenkin huonosti käyttäytyvä arvio ei juuri vastaa todellisuutta. Kun mittaukseen lisätään realistisuuden nimissä pieni määrä kohinaa, tilanne pahenee entisestään: vihreällä esitetty kohinaisesta mittauksesta estimoitu profiili räjähtää käsiin useamman kertaluokan virheellä.

Edellä esitelty mittausmalli on esimerkki huonosti määritellystä ongelmasta. Tarkemmin kyseessä on ensimmäisen asteen *Fredhomlin integraali*. Näitä käsitteitä avataan myöhemmissä luvuissa, mutta tässä vaiheessa jo kuitenkin nähdään, että ongelma käyttäytyy patologisesti sitä ratkaistaessa. Tämä johtuu siitä, että kyseessä oleva integraaliyhtälö voidaan ratkaista useilla erilaisilla tiheysprofileilla siten, että integraali tuottaa saman absorptiospektrin. Ratkaisu ei siis ole yksikäsitteinen. Lisäksi Fredhomlin integraali on erittäin epävakaa mittausvirheen suhteen, ja kuten huomasimme, ratkaisu ei ollut todellisuutta kuvaava datan sisältäessä mittausvirhettä. Tämänkaltaisia huonosti määriteltyjä ongelmia kutsutaan yleisesti *inversio-ongelmiksi* eli käänteisongelmiksi. Tutkimusala ja sen sovellukset erikoistuvatkin tällaisen patologisen käyttäytymisen kiertämiseen. Etsitään siis erilaisia tapoja, joilla mittausta voidaan *regularisoida* eli vakauttaa. Näillä menetelmillä voidaan ongelman ratkaisuun lisätä aikaisemmista tuloksista johdettua tietoa, jolloin pystytään sulkemaan pois varmasti vääriä vastauksia. Kuten myöhemmin tullaan huomaamaan, on tässä tutkielmassa esiteltävä tilastollinen ratkaisumenetelmä laskennallisesti vaativa. Usein mittaus ei myöskään sisällä paljoakaan informaatiota ennakkotietoihimme nähden. Tämän huomion pohjalta esitellään tutkielman keskeisenä tuloksena keino ongelman *dimension redusoimiseksi* eli ulottuvuuden pudottamiseksi, sekä kehitetään laskennallinen sovellus, jossa esiteltyä lähestymistapaa pyritään käyttämään edeltävän esimerkin ongelman ratkaisemiseksi tähänastisia menetelmiä tehokkaammin.

Luku 2

Esitietoja

Käsitlemissämme inversio-ongelmissa oletamme, että ongelma voidaan diskretoida ja esittää mitattu data sekä tuntematon vektoreina $y \in \mathbb{R}^m$ ja $x \in \mathbb{R}^n$. Tämän oletuksen myötä pyrimme esittämään mittausta kuvaavan *suoran mallin* matriisina. Myöhemmin, *tilastollisen inversion* yhteydessä, saadaan kaikille ongelman suureille myös määriteltyä *kovarianssimatriisi*, mikä kertoo muuttujien keskinäisistä riippuvuuksista. Tämän tutkielman näkökulmasta näitä matriiseja tulisi kyetä analysoimaan ja löytämään niistä ongelman dimension pudottamiseksi ns. informaatiopitoisimmat suunnat. Tässä luvussa esitellään jatkossa tärkeät *ominais-* sekä *singulaariarvohajotelmat*. Näillä pystytään esittämään matriisi lineaarikombinaationa sen *ominaisvektoreista*, ja samalla löytämään tarkastelemillemme avaruuksille uusi kanta.

2.1 Ominaisarvohajotelma

Olkoon $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ neliömatriisi. Matriisin A *ominaisvektorit* $r_i \in \mathbb{R}^n$ ja *ominaisarvot* $\lambda_i \in \mathbb{R}$ toteuttavat yhtälön

$$(2.1) \quad Ar_i = \lambda_i r_i.$$

Yhtäpitävästi voidaan sanoa, että $(A - \lambda_i \mathbf{1})r_i = 0$, missä $\mathbf{1}$ on $n \times n$ yksikkömatriisi. Edelliselle yhtälölle on olemassa jokin muu ratkaisu kuin $r_i = 0$ ainoastaan, jos A :n aste on pienempi kuin n , eli jos $\det(A) = 0$. Ominaisvektorit r_i toteuttavat yhtälön 2.1 mielivaltaisella reaalityyppisellä skaalattunakin, joten on tavallista normittaa ne. Tämä tarkoittaa skalaarilla kertomista siten, että $r_i^T r_i = 1$.

Ominaisvektorit voidaan kerätä matriisiin R siten, että

$$(2.2) \quad AR = R\Lambda.$$

Tässä matriisin R sarakkeet on muodostettu ominaisvektoreista r_i ja Λ on diagonaalimatriisi, jonka diagonaalilta löytyvät R :n sarakkeita vastaavat ominaisarvot λ_i .
 Olkoon $L = (R^T)^{-1}$. Kertomalla yhtälö 2.2 oikealta matriisilla L^T saadaan matriisin A ominaisarvohajotelma

$$(2.3) \quad A = R\Lambda L^T = \sum \lambda_i r_i l_i^T.$$

Vektoreita r_i kutsutaan A :n oikeanpuolisiksi ominaisvektoreiksi, samoin vektoreita l_i vasemmanpuolisiksi ominaisvektoreiksi. Symmetriselle matriisille Σ pätee $\Sigma = \Sigma^T$. Tällöin on oltava $R = L$, erityisesti $L^T L = L L^T = \mathbf{1}$ tai vastaavasti $L^T = L^{-1}$.

2.2 Neliömuodon pääakselit

Tarkastellaan skalaariyhtälöä

$$(2.4) \quad x^T \Sigma x = 1$$

missä $x \in \mathbb{R}^n$ ja $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ on symmetrinen matriisi. Kyseessä on origokeskeisen kvadraattisen pinnan yhtälö.

Esimerkki 2.1. Olkoon $\Sigma \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ diagonaalimatriisi, $\text{diag}(\Sigma) = \{\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}\}$, $a, b, c \in \mathbb{R}$ sekä $x \in \mathbb{R}^3$. Tällöin

$$(2.5) \quad x^T \Sigma x = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{a} x_1^2 + \frac{1}{b} x_2^2 + \frac{1}{c} x_3^2 = 1.$$

Tämä on origokeskeinen ellipsoidi, jonka sädevektori on x .

Pinnan 2.4 normaali pisteessä x on gradientti $\nabla(x^T \Sigma x) = 2\Sigma x$. Pisteet, joissa sädevektori ja pinnan normaali ovat yhdensuuntaiset, saadaan ratkaistua yhtälöstä

$$(2.6) \quad \Sigma x_i = \lambda_i x_i$$

Näissä pisteissä pinnan *pääakselit* eli toisiaan vasten kohtisuorat maksimipituiset sädevektorit leikkaavat pinnan. Samoin pätee $x_i^T \Sigma x_i = 1$, joten $x_i^T \lambda_i x_i = 1$ ja edelleen

$$(2.7) \quad \lambda_i = \frac{1}{x_i^T x_i}$$

Toisin sanoen symmetrisen matriisin Σ ominaisarvot λ_i ovat vastaavan ellipsoidin pääakselien neliöiden käänteislukuja.

Käyttämällä ominaisarvohajotelmaa voidaan 2.4 kirjoittaa muodossa

$$(2.8) \quad x^T L \Lambda L^T x = 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{x}^T \Lambda \tilde{x} = 1 \quad \Rightarrow \quad \sum \lambda_i \tilde{x}_i^2 = 1,$$

missä $\tilde{x} = L^T x$.

2.3 Singulaariarvohajotelma

Yleisessä tapauksessa ominaisarvohajotelmaa ei välttämättä pystytä tekemään, sillä jos A ei ole neliömatriisi, on vektoreilla Ar ja r eri dimensio, jolloin yhtälö 2.1 ei enää päde. Mielivaltaiselle matriisille $K \in \mathbb{R}^{m \times n}$ voidaan kuitenkin rakentaa symmetrinen lauseke

$$(2.9) \quad \begin{bmatrix} 0 & K \\ K^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix},$$

missä $u \in \mathbb{R}^n$, $v \in \mathbb{R}^m$ ja $0 \in \mathbb{R}^{n \times m}$ on nollamatriisi. Tässä yhteydessä vektoreita u ja v sanotaan *singulaarivektoreiksi* ja skalaaria λ *singulaariarvoksi*. Tästä päästään ominaisarvongelmaan

$$(2.10) \quad \begin{aligned} Kv &= \lambda u \quad \text{ja} \\ K^T u &= \lambda v. \end{aligned}$$

Edelleen sijoittamalla saadaan

$$(2.11) \quad \begin{aligned} K^T K v &= \lambda K^T u = \lambda^2 v \quad \text{ja} \\ K K^T u &= \lambda K v = \lambda^2 u. \end{aligned}$$

Edellisestä nähdään, että u ja v ovat matriisien $KK^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ja $K^T K \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ominaisvektoreita ja että molemmilla on sama positiivinen ja reaalinen ominaisarvo λ^2 .

Rakennettaessa matriiseja singulaarivektoreista u ja v on huomioitava, että näitä saatetaan olla eri määrät. Jos matriisin K aste on p , voidaan näyttää sillä olevan p nollasta poikkeavaa singulaariarvoa. Edelleen matriiseilla KK^T ja $K^T K$ on tällöin p nollasta poikkeavaa ominaisarvoa. Mahdolliset "ylimääräiset" ominaisvektorit vastaavat ominaisarvoa 0 ja ne voidaan jättää huomioimatta. Nyt saadaan

$$(2.12) \quad \begin{bmatrix} 0 & K \\ K^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix} \Lambda,$$

missä $\Lambda \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $U \in \mathbb{R}^{m \times p}$ ja $V \in \mathbb{R}^{n \times p}$. Tällöin jäljelle jää vielä $n + m - p$ singulaarivektoria, jotka kaikki vastaavat singulaariarvoa 0.

Yhtälöstä 2.12 nähdään, että $KV = U\Lambda$. Kertomalla vasemmalta matriisilla U^T saadaan $U^T KV = \Lambda$. Tämän takia matriisin U sanotaan sisältävän vasemmanpuoleiset singulaarivektorit, ja vastaavasti matriisin V oikeanpuoleiset singulaarivektorit.

Vastaavasti kertomalla vasemmalta matriisilla V^T saadaan

$$(2.13) \quad K = U\Lambda V^T.$$

Yhtälöä 2.13 kutsutaan mielivaltaisen matriisin K *singulaariarvohajotelmaksi*.

Seuraavissa luvuissa tullaan näkemään, että oikeanpuoleiset singulaarivektorit muodostavat ortonormaalin kannan ns. *riviavaruudessa*, ja vastaavasti vasemmanpuoleiset vektorit *sarakeavaruudessa*. Matriisi K kuvaa riviavaruuden kantavektorin v vastaavalle sarakeavaruuden kantavektorille u . Vastaavasti K^T on tämän kuvauksen käänteiskuvaus, joka kuvaa vektorin u vektorille v . Tarkemmat yksityiskohdat ja todistukset on esitetty kirjassa [8]

Luku 3

Inversio-ongelmat

Tässä tutkielmassa käsitellään tilastollista eli Bayesilaista lähestymistapaa inversio-ongelmiin. Ennen tämän metodologian esittämistä annetaan tässä luvussa lyhyt katsaus klassiseen inversio-ongelmien teoriaan sekä sen vahvuuksiin ja heikkouksiin. Tämän jälkeen esitellään Bayesin kaava ja rakennetaan sen pohjalta tilastollinen ratkaisumenetelmä, missä kaikkia ongelman muuttujia ajatellaan satunnaismuuttujina. Luvussa käsitellään lisäksi normaalijakautunutta eli gaussista satunnaismuuttujaa, todennäköisyysjakauman estimaatteja sekä inversio-ongelman ratkaisua täydentävää *a priori*-tietoa ja eri tapoja sen muotolemiseksi kvalitatiivisesta kvantitatiiviseksi. Oletamme tässä luvussa lukijalta perustiedot todennäköisyyslaskennasta, mittateoriasta ja lineaarialgebrasta kuten ne esitetään esimerkiksi Helsingin yliopiston matematiikan koulutuslinjan aineopinnoissa sekä perustiedot funktionaalianalyysistä (esimerkiksi [20]).

3.1 Klassisista inversio-ongelmista

Kuten johdannon yksinkertaistetusta esimerkistä käy ilmi, joudutaan *inversio-ongelmissa* varsin helposti ongelmiin mitatun datan sisältäessä mittausvirhettä. Tämän lisäksi ongelma voi olla *huonosti määritelty*. Monet käytännön inversio-ongelmat ovat myös epälineaarisia.

Ilmakehän koostumusta tutkittaessa päädytään tilanteeseen, jossa saadaan jonkin epäsuoran mittauksen avulla mitattua *datavektori* y , josta halutaan saada jotain tietoa ilmakehän oikeasta *tilavektorista* x hetkellä, jolla mittaus tapahtui. Vektorien sanotaan kuuluvan *data-avaruuteen* $\mathbb{Y} \in \mathbb{Y}$ ja *tila-avaruuteen* $x \in \mathbb{X}$, joiden ulottuvuus on usein eri: mitattava data ei ole fyysikaalisesti samaa dimensiota kuin itse tila. Tässä tutkielmassa rajoitumme tapaukseen $\mathbb{Y} = \mathbb{R}^m$ ja $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n$, mutta esitetyt tulokset voidaan yleistää päteviksi myös yleisimmissä Hilbertin avaruuksissa. Mittausta kuvataan *epäsuoran mit-*

tauksen inversiomallilla

$$(3.1) \quad y = F(x) + \varepsilon.$$

Mallissa epäsuoraa koetilannetta kuvaava *suora malli* eli operaattori F rakennetaan perustuen mittauksessa käytetyn mallin fysiikkaan, esimerkiksi valon absorptioon tai sirontaan väliaineessa. *Kohina* on mallissa jotain sellaista, mitä emme osaa tai pysty mallintamaan muuttujien avulla, kuten mittalaitteesta aiheutuva mittausvirhe tai satunnainen lämpöliike. Mittauksen y ajatellaan niin ikään koostuvan mittauksen *ytimeistä* $F(x)$ ja kohinasta ε , jonka oletetaan tässä tutkielmassa olevan additiivista.

3.1.1 Lineaarista inversio-ongelmista

Hadamardin mukaan *hyvin määritelty* ongelma (katso esimerkiksi [1]) täyttää seuraavat ehdot:

H1: Ongelmalla on ratkaisu (olemassaolo)

H2: Ratkaisu on yksikäsitteinen (yksikäsitteisyys)

H3: Ratkaisu riippuu jatkuvasti käytetystä datasta (vakaus)

Huonosti määritelty ongelma voidaan edellisen perusteella ajatella ongelmaksi, joka ei toteuta yhtä tai useampaa Hadamardin ehdoista. Käytännössä inversio-ongelmat ovat usein huonosti määriteltyjä.

Määritelmä 3.1. Otetaan käyttöön seuraavat merkinnät. Merkitään kuvauksen $F: A \rightarrow B$ lähtöjoukkoa $\text{Dom}(F)$, maalijoukkoa $\text{Range}(F)$, ydintä $\text{Ker}(F)$ ja joukkoa $B - \text{Ran}(F)$ merkinnällä $\text{Coker}(F)$.

Määritelmä 3.2. Olkoot H_1 ja H_2 äärellisulotteisia Hilbertin avaruuksia ja $F: H_1 \rightarrow H_2$ kompakti lineaarikuvaus. Ensimmäisen lajin *Fredholmian yhtälö* on muotoa

$$(3.2) \quad F(x) = y,$$

missä $x \in H_1$ on tuntematon ja $y \in H_2$ tunnettu. Käsittelemässämme ilmakehän kaukokartoituksen tapauksessa kyseessä on integraaliyhtälö

$$(3.3) \quad g(t) = \int_a^b K(t, s)f(s)ds,$$

missä a ja b ovat vakiot, *ydinfunktio* $K(t, s)$ on jatkuva, $g(t)$ on tunnettu ja $f(s)$ on tuntematon. Määrätty integraali on kompakti ja lineaarinen, ja merkitsemällä $f(s) = x(s)$, $g(t) = y$ ja $\int_a^b K(t, s)x(s)ds = F(x)$ päästään esitykseen 3.2.

Lause 3.1. *Fredholmin yhtälölle pätee*

I) *yhtälöllä 3.2 on ratkaisu (H1), jos ja vain jos $y \in \text{Ran}(F)$;*

II) *yhtälön 3.2 ratkaisu on yksikäsitteinen (H2), jos ja vain jos $\text{Ker}(F) = \{0\}$.*

Todistus. Kohta I) on selvä, sillä jos $y \notin \text{Ran}(F)$, niin $y \in \text{Coker}(F)$ eikä käänteiskuvausta voi muodostaa.

Kohta II): Oletetaan, että $\text{Ker}(F) = \{0\}$. Olkoon $Fa = Fb$ missä $a, b \in H_1$. Operaattorin F lineaarisuudesta seuraa, että $F(a - b) = Fa - Fb = 0$. Nyt oletuksesta seuraa, että $a - b = 0$ eli $a = b$, ratkaisu on siis yksikäsitteinen. Toinen suunta: Oletetaan, että ratkaisu on yksikäsitteinen. Tällöin $F^{-1}(0) = \text{Ker}(F)$ on lineaarisuuden nojalla $\{0\}$. \square

Palautetaan mieleen johdannossa esitelty Lambertin-Beerin laista johdettu ongelma, joka on muotoa

$$(3.4) \quad -\ln \frac{I(\lambda)}{I_0(\lambda)} = \int_0^L \mathcal{C}(\lambda, s)\rho(s)ds.$$

Vertaamalla tätä yhtälöön 3.3 saadaan vastaavuudet

$$(3.5) \quad \begin{aligned} g(t) &\leftrightarrow -\ln \frac{I(t)}{I_0(t)} \\ [a, b] &\leftrightarrow [0, L] \\ K(t, s) &\leftrightarrow \mathcal{C}(t, s) \\ f(s) &\leftrightarrow \rho(s) \\ Fx(s) &\leftrightarrow \int_0^L \mathcal{C}(t, s)x(s)ds. \end{aligned}$$

Kaukokartoitusongelmassa esiintyvä integraaliyhtälö on siis ensimmäisen lajin Fredholmin yhtälö. Koska kyseessä on integraaliyhtälö, on selvää, että 0-absorptio voidaan saada aikaan usealla eri tiheysprofiililla. Tämä tarkoittaa, että $\text{Ker}(F) \neq \{0\}$, jolloin ehto (H2) ei toteudu eikä yhtälölle ole olemassa yksikäsitteistä ratkaisua, mikä nähtiin jo johdannossa.

Määritelmä 3.3. Olkoon $F : \text{Dom}(F) \rightarrow \mathbb{R}^m$ rajoitettu lineaarikuvaus ja $\text{Dom}(F) \subset \mathbb{R}^n$. Analogisesti edeltävään käsittelyyn kuvausta F kutsutaan *suoraksi malliksi* sekä avaruuksia \mathbb{R}^n *tila-avaruuksiksi* ja \mathbb{R}^m *data-avaruuksiksi*. Epäsuoran mittauksen *inversiomalli* on näin ikään yhtälö

$$(3.6) \quad y = Fx + \varepsilon,$$

missä $x \in \text{Dom}(F)$ on tuntematon tila, $y \in \mathbb{R}^m$ on mittausta ja $\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ mittaustulosta. Mittaustulosta tulee lisäksi toteuttaa jollain positiivisella $\delta \in \mathbb{R}$ ehto $\|\varepsilon\| \leq \delta$, missä $\|\cdot\|$ on avaruuden \mathbb{R}^m euklidinen normi.

Hadamardin ehdot täyttävät inversio-ongelmat ovat hyvin määriteltyjä ja ratkeavat yksikäsitteisesti. Nämä eivät kuitenkaan ole tutkimuksen kannalta kovinkaan mielenkiintoisia, koska mittausta kuvaava malli on harvoin näin hyvin käyttäytyvä. Mielenkiinnon kohteena tutkimuksessa ovat sen sijaan ongelmat, jotka rikkovat yhtä tai useampaa hyvin määritellyn ongelman ehdoista.

Inversiomallin kohina voi helposti kaataa ehdon H1, kun $Fx + \varepsilon \notin \text{Ran}(F)$. Jos taas kahdella eri tilalla $x_1, x_2 \in \text{Dom}(F)$ saadaan sama mittaustulos $F(x_1) = F(x_2)$, ei ratkaisu ole yksikäsitteinen eikä täten ehto H2 päde. Vaikka kaikki mittauspisteet olisivat kuvajoukossa $F(\text{Dom}(F))$, ei ole yleisesti takeita sille, että F^{-1} olisi jatkuva, joten ehto H3 ei myöskään välttämättä päde.

Klassisessa inversio-ongelmien teoriassa huonosti määritelty ongelma pyritään *regularisoimaan*, eli löytämään likimääräinen ratkaisu, joka täyttää Hadamardin ehdot. Tämä johtaa usein mallin diskreetointiin ja numeeriseen ratkaisemiseen.

Määritelmä 3.4. Olkoon $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ injektiivinen lineaarikuvaus. Tarkastellaan tähän mittaukseen liittyvää inversio-ongelmaa, missä $\|Fx - y\| \leq \delta$. Tällöin lineaarikuvausten $R_\alpha : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, $0 < \alpha < \infty$ kokoelmaa sanotaan *regularisointistrategiaksi*, jos

$$(3.7) \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} R_\alpha Fx = x$$

jokaisella $x \in \mathbb{R}^n$. Kun *regularisointiparametri* α on muuttujan δ funktio, kutsutaan funktiota $\alpha(\delta)$ *hyväksi*, jos

1. $\alpha(\delta) = 0$, kun $\delta \rightarrow 0$ ja
2. Jokaisella $x \in \mathbb{R}^n$ pätee

$$(3.8) \quad \sup_{y \in \mathbb{R}^m} \{ \|R_{\alpha(\delta)} y - x\| : \|Fx - y\| \leq \delta \} \rightarrow 0, \quad \delta \rightarrow 0.$$

Inversio-ongelman ratkaisu muodostuu klassisesta näkökulmasta katsottuna regularisointistrategiasta ja hyvästä parametrin α valitsemisesta. Regularisointistrategian muodostaminen ei kuitenkaan ole aina suoraviivaista. Ongelmina voivat olla esimerkiksi suora malli, joka ei ole injektio, mittauksen kuulumattomuus kuvajoukkoon $F(\mathbb{R}^n)$, ja kohinalisen yhtälön ratkaisu riittävän vakaasti.

Esimerkkinä inversio-ongelman ratkaisusta esitellään *Tikhonovin regularisoitu ratkaisu*: yllämainittujen määritelmien voimassa ollessa vektori $T_\alpha(y)$ on tällainen ratkaisu, jos

$$(3.9) \quad T_\alpha(y) \in \arg \min_{z \in \mathbb{R}^n} t(z),$$

missä $t(z) := \|Fz - y\|_{\mathbb{R}^m}^2 + \alpha \|\nabla z\|_{\mathbb{R}^n}^2$ on nimeltään *Tikhonovin funktionaali* ja α sen regularisointiparametri sekä ∇z on tuntemattoman z diskretisoinnista johdettu vierekkäisten arvojen erotus.. Tätä menetelmää ja sen johdannaisia käyttäessään joutuu ratkaisija tasa-painottelemaan ratkaisun tarkkuuden ja vakauden välillä. Lisäksi parametrin α valinta ei yleensä ole yksikäsitteistä. Regularisointia sekä epälineaarisia klassisia inversio-ongelmia sekä niiden numeerista ratkaisua on käsitelty kattavasti lähteessä [1].

3.2 Tilastollinen inversio

Olkoon $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ todennäköisyysavaruus, missä $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ on epätyhjä joukko, \mathcal{F} on σ -algebra joukossa Ω ja $\mathbf{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ todennäköisyysmitta.

Olkoon $A, B \in \mathcal{F}$ tapahtumia ja $\mathbf{P}(B) > 0$. A :n ehdollinen todennäköisyys ehdolla B on määritelty

$$(3.10) \quad \mathbf{P}(A|B) = \frac{\mathbf{P}(A \cap B)}{\mathbf{P}(B)}.$$

Määritellään, että tapahtumat A ja B ovat riippumattomia jos ja vain jos $\mathbf{P}(A|B) = \mathbf{P}(A)$.

Lause 3.2. *Olkoon $(E_i)_{i \in I}$ äärellinen tai numeroituvasti ääretön avaruuden Ω ositus. Tällöin jos $A \in \mathcal{A}$, niin*

$$(3.11) \quad \mathbf{P}(A) = \sum_{i \in I} \mathbf{P}(A|E_i) \mathbf{P}(E_i).$$

Todistus. Huomataan, että

$$(3.12) \quad A = A \cap \Omega = A \cap \left(\bigcup_{i \in I} E_i \right) = \bigcup_{i \in I} (A \cap E_i).$$

Joukot E_i muodostavat avaruuden osituksen, joten ne ovat pareittain erillisiä. Myös joukot $(A \cap E_i)$ ovat erillisiä, ja näin ollen

$$(3.13) \quad \begin{aligned} \mathbf{P}(A) &= \mathbf{P} \left(\bigcup_{i \in I} A \cap E_i \right) = \sum_{i \in I} \mathbf{P}(A \cap E_i) \\ &= \sum_{i \in I} \mathbf{P}(A|E_i) \mathbf{P}(E_i). \quad \square \end{aligned}$$

Edellisistä yhtälöistä seuraa *Bayesin kaava*:

$$(3.14) \quad \mathbf{P}(E_i|A) = \frac{\mathbf{P}(A|E_i)\mathbf{P}(E_i)}{\sum_{j \in I} \mathbf{P}(A|E_j)\mathbf{P}(E_j)}.$$

Kutsumme Bayesin kaavassa esiintyvää todennäköisyysmittaa $\mathbf{P}(E_i|A)$ *posterioritodennäköisyydeksi* (lyhyemmin: posteriori), $\mathbf{P}(E_i)$ *prioritodennäköisyydeksi* (lyhyemmin: prior) ja $\mathbf{P}(A|E_i)$ *uskottavuudeksi* ehdolla A . Jakajassa esiintyvä summa on kaavassa normitusvakio, joka takaa posteriorin integraalille arvon 1 yli koko avaruuden. Näin ollen kyseessä on todennäköisyysmitta.

Tilastollisen eli bayesilaisen inversion filosofinen tausta on muotoilla ongelma uudelleen siten, että varsinaisen tarkan vastauksen sijaan pyritään etsimään mahdollisimman tarkat virherajat ongelman ratkaisulle. Ongelman parametreja mallinnetaan satunnaismuuttujina, joilla jokaisella on oma todennäköisyysjakaumansa. Bayesilaisessa ajattelussa satunnaisuus kuvaa epävarmuutta parametrin arvosta: mitä kapeampi todennäköisyysjakauma, sitä pienemmät virherajat. Tuntematonta x ei siis voida koskaan tuntea tarkkaan. Sen sijaan Bayesin kaavan perusteella voidaan tuntemattomalle määritellä priorijakauma, joka kuvaa käsitystä tuntemattomasta ennen mittauksen suorittamista. Tämä voi esimerkiksi tarkoittaa, että uskomme mitatun tiheysprofiilin olevan jatkuva, tai samaa suuruusluokkaa kuin aikaisempien mittausten keskiarvo. Prioritietoon yhdistetään Bayesin kaavaa seuraten mittauksesta saatu informaatio uskottavuusfunktion muodossa, jolloin saadaan inversio-ongelman ratkaisuna tuntemattoman x posteriorijakauma.

Ratkaisun muoto tekee tilastollisesta lähestymistavasta varsin erilaisen klassiseen ratkaisuun verrattuna. Regularisaatiostrategiat tuottavat tuntemattomille arvoille yksittäisiä tunnuslukuja, kun taas tilastollisesta näkökulmasta posteriorijakaumasta voidaan laskea useita estimaatteja, jotka kuvaavat jakaumaa eri tavoin. Toisin sanoen ratkaisu ei vastaa kysymykseen "Mikä on muuttujan x arvo?", vaan pikemminkin kysymykseen "Millä todennäköisyydellä muuttuja x voi saada mitäkin arvoja?".

3.2.1 Teorian muotoilu

Vaikka seuraavat tulokset pätevät yleisemmässäkin tapauksessa, oletamme seuraavassa käsittelyssä, että kaikki satunnaismuuttujat ovat *absoluuttisesti jatkuvia*, joten niiden todennäköisyysjakaumia voidaan kuvata *tiheysfunktioilla*.

Kuten klassisissakin inversio-ongelmissa, oletetaan, että mittauksesta saatua dataa $y \in \mathbb{R}^m$ käytetään tiedon saamiseen tuntemattomasta $x \in \mathbb{R}^n$. Näiden muuttujien riippuvuutta kuvataan mallilla

$$(3.15) \quad y = F(x) + \varepsilon,$$

missä $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^m$ on *mallifunktio*, ja $\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ on kohina vektori, joka pitää sisällään kaikki mittauksessa huonosti tunnetut parametrit sekä mittausvirheen.

Tilastollisessa inversiossa kaikkia parametreja tarkastellaan satunnaismuuttujina, ja usein onkin tapana kirjoittaa ne käyttäen isoja kirjaimia. Tällöin satunnaismuuttujien *realisaatiot* kirjoitetaan vastaavasti pienillä kirjaimilla. Kuitenkin tässä tutkielmassa käytetään sekä satunnaismuuttujasta että sen realisaatiosta pieniä kirjaimia ja painotetaan tarpeen mukaan, kumpaa tarkoitetaan. Näin isot kirjaimet varataan matriisien merkitsemiseen. Suoraan mitattavaa satunnaismuuttujaa kutsutaan *mittaukseksi*, ja sen realisaatiota *dataksi*. Varsinaisen mielenkiinnon kohteena olevaa parametria x , jonka priorija posterioritodennäköisyysjakaumia mallinnetaan satunnaismuuttujilla, nimitetään *tuntemattomaksi*, sekä häiritäparametria ε *kohinaksi*.

Oletetaan, että olemme löytäneet yhteistodennäköisyysjakauman muuttujille x ja y , ja merkitään sitä $\pi(x, y)$. Muuttujan x *marginaalista tiheysfunktioita*

$$(3.16) \quad \pi_{pr}(x) = \int_{\mathbb{R}^m} \pi(x, y) dy$$

kutsutaan *a priori-tiheysfunktioiksi*. Tämä kuvaa tietoa, joka meillä on muuttujasta x ennen mittausta.

Toisaalta, jos tuntemattoman arvo x tunnetaan ja $\pi_{pr}(x) \neq 0$, saadaan datan y :n ehdolliseksi todennäköisyydeksi *uskottavuusfunktio* (englanniksi *likelihood*)

$$(3.17) \quad \pi(y|x) = \frac{\pi(x, y)}{\pi_{pr}(x)}.$$

Oletetaan nyt, että tunnetaan data y . Jos $\pi(y) \neq 0$, sanotaan jakaumaa

$$(3.18) \quad \pi(x|y) = \frac{\pi(x, y)}{\pi(y)}$$

muuttujan x *posteriorijakauman tiheysfunktioiksi*.

Bayesilaisessa ajattelussa inversio-ongelma ilmaistaan seuraavasti: "Ratkaise datasta y muuttujan x ehdollinen todennäköisyysjakauma $\pi(x|y)$ ". Kootaan edelliset tulokset lauseeksi:

Lause 3.3. *Oletetaan, että satunnaismuuttujan $x \in \mathbb{R}^n$ prioritiheysfunktio $\pi_{pr}(x)$ tunnetaan, ja oletetaan, että mitattu data y koostuu satunnaismuuttujan $y \in \mathbb{R}^m$ arvosta siten, että $\pi(y) > 0$. Tällöin muuttujan x posterioritodennäköisyyden tiheysfunktio ehdolla y on*

$$(3.19) \quad \pi(x|y) = \frac{\pi_{pr}(x)\pi(y|x)}{\pi(y)},$$

missä *marginaalijakaumaa* $\pi(y) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(x, y) dy$ *voidaan ajatella normitusvakiona.*

Yhteenvedona Bayesin kaavasta 3.19 voidaan inversio-ongelman ratkaisu hajottaa kolmeen aliongelmaan:

1. Etsitään tuntemattomalle X prioritodennäköisyysjakauma π_{pr} , joka kuvaa mahdollisimman hyvin ennakkotietojamme tuntemattomasta.
2. Etsitään uskottavuusfunktio $\pi(y|x)$, joka kuvaa datan riippuvuutta tuntemattomasta.
3. Valitaan tapa tutkia posteriorijakaumaa.

3.3 Normaalijakautunut satunnaismuuttuja

Tarkastellaan inversio-ongelmaa, jossa kohina on additiivista. Tätä kuvaa yhtälö

$$(3.20) \quad y = F(x) + \varepsilon$$

missä muuttujat $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ ja $\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ ovat riippumattomia. Oletetaan, että kohinan todennäköisyysjakauma π_ε on tunnettu. Rippumattomuudesta seuraa, ettei tuntemattoman kiinnittäminen $x = x_0$ vaikuta kohinan jakauman muotoon. Täten yhtälöstä 3.20 seuraa

$$(3.21) \quad \varepsilon = y - F(x) \quad \Leftrightarrow \quad \pi(y|x) = \pi_\varepsilon(y - F(x)).$$

Näin ollen Bayesin kaavasta 3.19 saadaan

$$(3.22) \quad \pi(x|y) \propto \pi_\varepsilon(y - F(x))\pi_{pr}(x).$$

Normaalijakaumalla eli gaussisella jakaumalla on keskeinen rooli tilastollisessa inversioteoriassa. Jakauman matemaattinen käsittely on melko suoraviivaista, mutta ennen kaikkea *keskeisen raja-arvolauseen* (katso esimerkiksi [17]) ansiosta gaussinen malli on perusteltu approksimaatio ei-normaaleista jakaumista, kun mitattujen datapisteiden määrä on suuri.

Määritelmä 3.5. Olkoon $z_0 \in \mathbb{R}^n$ ja $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrinen ja positiivis-definiitti matriisi. *Gaussinen n -ulotteinen satunnaismuuttuja z odotusarvolla z_0 ja kovarianssimatriisilla Σ on satunnaismuuttuja, jonka tiheysfunktio on muotoa*

$$(3.23) \quad \pi(z) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi|\Sigma|}} \right)^n \exp \left(-\frac{1}{2}(z - z_0)^T \Sigma^{-1}(z - z_0) \right),$$

missä $|\Sigma| = \det(\Sigma)$. Gaussisesta satunnaismuuttujasta odotusarvolla z_0 ja kovarianssimatriisilla Σ käytetään notaatiota

$$(3.24) \quad z \sim \mathcal{N}(z_0, \Sigma).$$

Tässä työssä viitataan jatkossa myös hieman epätäsmällisesti muuttujan z tiheysfunktion $\pi(z)$ gaussiseen muotoon merkinnällä $\pi(z) \sim \mathcal{N}(z_0, \Sigma)$.

Lause 3.4. *Olkoon $x : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ ja $\varepsilon : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ toisistaan riippumattomia gaussisia satunnaismuuttujia,*

$$(3.25) \quad \pi_{pr}(x) \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr}), \quad \pi_\varepsilon(\varepsilon) \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{obs}),$$

missä $\Sigma_{pr} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ja $\Sigma_{obs} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ positiivis-definiittejä matriiseja. Oletetaan lisäksi, että meillä on lineaarinen malli kohinaiselle mittaukselle y , missä mittausmatriisi $F \in \mathbb{R}^{m \times n}$ on tunnettu, eli

$$(3.26) \quad y = Fx + \varepsilon.$$

Tällöin muuttujan x posterioritiheysfunktio mittauksella y on

$$(3.27) \quad \pi(x|y) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \Sigma_{post}^{-1}(x - \bar{x})\right),$$

missä

$$(3.28) \quad \bar{x} = (F^T \Sigma_{obs}^{-1} y + \Sigma_{pr}^{-1}(-x_0)) (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1})^{-1},$$

ja

$$(3.29) \quad \Sigma_{post} = (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1})^{-1}.$$

Todistus. Käyttämällä kaavaa (3.23) tiheysfunktioiden kirjoittamiseen ja ottamalla yhtälön (3.26) molemmilta puolilta logaritmi saadaan uskottavuusfunktioille

$$(3.30) \quad -2 \ln \pi(y|x) = (y - Fx)^T \Sigma_{obs}^{-1} (y - Fx) + c_1,$$

missä c_1 on eksponenttifunktion kertoimesta saatava vakio. Kyseessä on *neliömuoto*, mikä tarkoittaa 2. asteen polynomia yhden tai useamman muuttujan suhteen. Myös priorikaumalle voidaan kirjoittaa

$$(3.31) \quad -2 \ln \pi_{pr}(x) = (x - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (x - x_0) + c_2.$$

Käyttämällä Bayesin kaavaa 3.19 saadaan edelleen

$$(3.32) \quad -2 \ln \pi(x|y) = (x - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (x - x_0) + (y - Fx)^T \Sigma_{obs}^{-1} (y - Fx) + c_3.$$

Kahden neliömuodon summa on selvästi myös neliömuoto, joten on oltava tapa kirjoittaa joillekin \bar{x} ja Σ_{post} posteriorin logaritmi muodossa

$$(3.33) \quad -2 \ln \pi(x|y) = (x - \bar{x})^T \Sigma_{post}^{-1} (x - \bar{x}) + c_4.$$

Merkitsemällä yhtälöiden 3.32 ja 3.33 oikeat puolet yhtäsuuriksi, avaamalla lausekkeet ja edelleen merkitsemällä yhtäsuuriksi muuttujassa x toista astetta olevat termit saadaan

$$(3.34) \quad \begin{aligned} & (-Fx)^T \Sigma_{obs}^{-1} (-Fx) + x^T \Sigma_{pr}^{-1} x = x^T \Sigma_{post}^{-1} x \\ \Leftrightarrow & \quad x^T (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1}) x = x^T \Sigma_{post}^{-1} x \\ \Leftrightarrow & \quad \Sigma_{post}^{-1} = F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1}. \end{aligned}$$

Kun merkitään yhtäsuuriksi termit, jotka ovat lineaarisia x^T :n suhteen, saadaan vastaavasti

$$(3.35) \quad (-Fx)^T \Sigma_{obs}^{-1} y + x^T \Sigma_{pr}^{-1} (-x_0) = x^T \Sigma_{post}^{-1} (-\bar{x}).$$

Sijoittamalla Σ_{post}^{-1} yhtälöstä 3.34 saadaan

$$(3.36) \quad \begin{aligned} & x^T (-F^T) \Sigma_{obs}^{-1} y + x^T \Sigma_{pr}^{-1} (-x_0) = x^T (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1}) (-\bar{x}) \\ \Leftrightarrow & \quad F^T \Sigma_{obs}^{-1} y + \Sigma_{pr}^{-1} (-x_0) = (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1}) \bar{x} \\ \Leftrightarrow & \quad \bar{x} = (F^T \Sigma_{obs}^{-1} y + \Sigma_{pr}^{-1} (-x_0)) (F^T \Sigma_{obs}^{-1} F + \Sigma_{pr}^{-1})^{-1}. \end{aligned}$$

Vakiot c_1 , c_2 , c_3 ja c_4 vastaavat normitusvakioita. Kaavan 3.22 nojalla saadaan siis

$$(3.37) \quad \pi(x|y) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} (x - \bar{x})^T \Sigma_{post}^{-1} (x - \bar{x}) \right).$$

□

Posteriorin odotusarvo ja kovarianssi voidaan myös kirjoittaa muodossa

$$(3.38) \quad \bar{x} = x_0 + \Sigma_{pr} F^T (F \Sigma_{pr} F^T + \Sigma_{obs})^{-1} (y - Fx_0 - \varepsilon_0),$$

ja

$$(3.39) \quad \Sigma_{post} = \Sigma_{pr} - \Sigma_{pr} F^T (F \Sigma_{pr} F^T + \Sigma_{obs})^{-1} F \Sigma_{pr}.$$

Tarkemmat yksityiskohdat tästä johdosta ja vaihtoehtoinen todistus lauseelle 3.4 käyttäen *Schurin komplementteja* esitetään kirjassa [2].

Huomautus 3.1. Edellisen lauseen todistuksen kohdasta 3.30 nähdään, että Bayesin kaavan uskottavuusfunktion kovarianssimatriisi on lineaarisen inversio-ongelman 3.26 ja additiivisen kohinan tapauksessa täsmälleen sama, kuin mittausvirheen ε kovarianssimatriisi. Laskennallisissa sovelluksissa saadaan täten arvioitua gaussisen uskottavuusfunktion kovarianssia, kunhan tiedetään mittausvirheen statistiikka.

3.3.1 Estimaatit

Edellä esitetyllä tavalla saadaan inversio-ongelman ratkaisuksi posteriorijakauma. Yleensä ongelman dimensio on kuitenkin niin suuri, ettei jakauman visualisointi ole mahdollista. Tunnetusta jakaumasta voidaan kuitenkin laskea jakauman *tunnuslukuja*, kuten odotusarvo. Jos meillä on tarpeeksi suuri otos jakaumasta, voidaan näille laskea myös likiarvoja eli *estimaatteja*. Nämä antavat vastauksen esimerkiksi kysymykseen "Mikä on satunnaismuuttujan x todennäköisyysjakauman todennäköisin arvo?"

Yksi suosittu jakauman estimaattori on *maksimaalinen a posteriori estimaattori* (MAP). Tämä kertoo jakauman todennäköisimmän arvon. Satunnaismuuttujan $x \in \mathbb{R}^n$ posteriorijakaumalle $\pi(x|y)$ laskettu estimaatti x_{MAP} toteuttaa ehdon

$$(3.40) \quad x_{\text{MAP}} = \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi(x|y)$$

mikäli maksimi on olemassa. Huomioitavaa on, ettei kyseinen maksimi ole välttämättä yksikäsitteinen. MAP-estimaatin laskeminen johtaa optimointiongelmaan, joka ratkaistaan tyypillisesti iteratiivisilla gradienttiin pohjautuvilla menetelmillä. Tämä ratkaisu muistuttaa klassisten inversio-ongelmien regularisointia.

Toinen paljon käytetty estimaattori on jakauman *ehdollinen odotusarvo* (CM, englanniksi *conditional mean*):

$$(3.41) \quad x_{\text{CM}} = \mathbb{E}[x|y] = \int_{\mathbb{R}^n} x \pi(x|y) dx.$$

Toisin sanoen x_{CM} on posteriorijakauman odotusarvo. Odotusarvon löytäminen on integrointiongelma, jossa integraali tulee laskea yli tyypillisesti todella korkeaulotteisen avaruuden.

Huomautus 3.2. Normaalijakautuneen satunnaismuuttujan tapauksessa jakauman todennäköisin arvo löydetään minimoimalla eksponentissa oleva neliömuoto. Tämä minimi on yksikäsitteinen. Määritelmän mukaan jakauman odotusarvo on myös tämä sama suurimman todennäköisyyden arvo. Tästä syystä normaalijakaumalle $\pi(x)$ pätee erikoistapauksena

$$(3.42) \quad x_{\text{CM}} = \int_{\mathbb{R}^n} x \pi(x|y) dx = \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi(x|y) = x_{\text{MAP}}.$$

3.3.2 Priorista

Bayesilaisessa inversio-ongelmien käsittelyssä priorijakauman rakentaminen on usein ratkaisun järkevyyden kannalta yksi kriittisimpiä ja samalla myös vaikeimpia askeleita. Sopivan priorin löytäminen johtuu yleisesti tietomme luonteesta: ratkaisijalla on usein kvalitatiivista tietoa siitä, millainen hän uskoo ongelman ratkaisun olevan, ja tämä tulisi jollain tavalla muuttaa kvantitatiiviseksi osaksi posteriorijakaumaa. Yleinen ohjenuora on, että priorijakauman tulisi antaa mittausta edeltävän tiedon valossa odotettavissa oleville tapahtumille suuri todennäköisyys, ja vastaavasti pieni todennäköisyys tapahtumille, joita emme odota näkevämmä. Ongelmia aiheuttaa se, että liian löyhällä priorilla emme välttämättä saa lähellekään totuudenmukaista ratkaisua, kun taas liian tiukka prior ei salli mittaustuloksen poikkeamista ennako-odotuksistamme, mikä taas tekee koko mittauksen suorittamisesta epämieliekästä.

Seuraavaksi esitellään pintapuolisesti muutama esimerkki priorien rakentamisesta. Syvemmän käsittelyn ja lisää esimerkkejä löytää lukija halutessaan esimerkiksi kirjasta [2].

Esimerkki 3.1. Oletetaan, että ratkaistavana on inversio-ongelma, jossa tuntematon on kaksiulotteinen pikselikuva. Tällä voidaan kuvata diskreetisti jakautunutta suuretta, esimerkiksi pieniä kohteita röntgenkuvassa. Prioritietona on tällöin, että oletamme saavamme mustaa taustaa vasten joitakin yksittäisiä taustasta suuresti poikkeavia arvoja. Tällaisessa tilanteessa käytetään *impulssiprioria*, josta hyvänä esimerkkinä on l_1 -normi

$$(3.43) \quad \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|,$$

missä $x \in \mathbb{R}^n$ edustaa vektorisoitua versiota $n:n$ pikselin kuvasta, ja $|\cdot|$ on itseisarvo. Edellisen normin indusoima l_1 -priori on vuorostaan

$$(3.44) \quad \pi_{pr}(x) = \left(\frac{\alpha}{2}\right)^n \exp(-\alpha\|x\|_1),$$

missä α on ongelmasta riippuva skaalausparametri. Priorijakaumassa eksponenttifunktion argumentissa esiintyvä l_1 -normi antaa sitä suuremman arvon vektorille, mitä enemmän sen l_1 -normi poikkeaa nolasta. Tällöin saadaan pieni todennäköisyys suurille arvoille ja suurempi lähellä nolaa oleville arvoille. Nyt on epätodennäköisempää saada useisiin vierekkäisiin pikseleihin suuresti nolasta poikkeavia arvoja, mikä kuvaa tässä tapauksessa kvalitatiivisen tietomme harvakseltaan esiintyvistä yksittäisistä arvoista kvantitatiiviseksi.

Esimerkki 3.2. Tarkastellaan seuraavaksi, miten edellisen esimerkin priorijakaumasta voidaan poimia otos. Muunnetaan prioria ensin siten, että hyväksytään vain positiiviset arvot. Tämä on ongelman asettelun nojalla hyvin perusteltua. Saadaan

$$(3.45) \quad \pi_{pr}(x) = \alpha^n \pi_+(x) \exp(-\alpha\|x\|_1),$$

missä $\pi_+(x) = 1$ jos $x_i > 0$ kaikilla i , ja muutoin 0. Muuttujan x eri komponenttien voidaan olettaa olevan riippumattomia toisistaan, jolloin jokaiselle suunnalle saadaan 1-ulotteinen jakauma

$$(3.46) \quad \kappa(t) = \alpha \int_0^t e^{-\alpha s} ds = 1 - e^{-\alpha t}.$$

Komponentit x_i saadaan nyt kaavalla

$$(3.47) \quad x_i = \kappa^{-1}(t_i) = -\frac{1}{\alpha} \log(1 - t_i),$$

missä t_i saadaan aina tasa-jakaumasta $\mathcal{U}([0, 1])$. Tämä on standardi menetelmä laskennallisissa sovelluksissa, missä satunnaislukugeneraattorin tuottama luku väliltä $[0, 1]$ saadaan helposti kuvattua otokseksi edellä määritellystä priorijakaumasta.

Esimerkki 3.3. Geofysikaalisissa ja ilmakehän kaukokartoitukseen liittyvissä ongelmissa priorijakauman muodostamiseen voidaan käyttää aikaisemmin mitattua dataa, jota on tavallisesti hyvin suuri määrä. Oletetaan, että $\pi_{pr}(x)$ on satunnaismuuttujan $x \in \mathbb{R}^n$ prioritiheysfunktio, ja että ollaan saatu suuri määrä otoksia muuttujasta x :

$$(3.48) \quad \chi = \{x^1, x^2, \dots, x^N\},$$

missä N on suuri. Yksiulotteisessa tapauksessa voitaisiin käyttää esimerkiksi *spliniaproksimaatiota* todennäköisyysjakauman histogrammin selvittämiseksi, mutta moniulotteisessa tapauksessa näin ei enää ole mahdollista tehdä. Sen sijaan voidaan kirjoittaa arviot muuttujan odotusarvosta ja kovarianssista:

$$(3.49) \quad \begin{aligned} \mathbb{E}[x] &\approx \bar{x} := \frac{1}{N} \sum_{I=1}^N x^I \\ \text{Cov}[x] &= \mathbb{E}[xx^T] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[x]^T \\ &\approx \Gamma := \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N x_i x_i^T - \bar{x}\bar{x}^T. \end{aligned}$$

Edellä esitellyn normaalijakautuneen satunnaismuuttujan käsittelyyn vedoten on usein käytännöllistä approksimoida mittausdatasta johdettua priorijakaumaa normaalijakauksella

$$(3.50) \quad \pi_{pr}(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \Gamma^{-1}(x - \bar{x})\right).$$

Approksimaation onnistuneisuutta voidaan tutkia esimerkiksi vertaamalla normaalijakaumasta nostettuja otoksia olemassaolevaan dataan. Ongelmana tässä lähestymistavassa on se, ettei otoksista arvioitu kovarianssimatriisi Γ välttämättä ole kääntökykyinen tai numeerisesti vakaa, mikä tekee laskennallisista sovelluksista ongelmallisia.

3.4 Markovin ketju Monte Carlo -menetelmä

Tilastollisen lähestymistavan tuottama ratkaisu inversio-ongelmaan jää melko abstraktiksi, ellei posteriorijakaumaa pystytä millään tavalla tutkimaan. Tähän on ehdotettu useita menetelmiä, joista tässä tutkielmassa käytämme *Markovin ketju Monte Carlo*-menetelmää (MCMC).

Termi *Monte Carlo* viittaa alun perin Monte Carlo integrointiin, missä muutoin monimutkainen tai ratkeamaton integraali lasketaan arpomalla satunnaisesti lukuja ja tarkastamalla, jäävätkö ne integraalikäyrän alle vai eivät. Tarpeeksi suurella otoksella saadaan näin laskettua tietyn käyrän alle jäävän pinta-alan (2-ulotteisessa tapauksessa) osuus koko otosjoukosta.

Jos otos nostetaan tietystä todennäköisyysjakaumasta, voidaan edellisellä menetelmällä tutkia todennäköisyysjakauman tiheysfunktioita. Olkoon π satunnaismuuttujan $x \in \mathbb{R}^n$ tiheysfunktio, sekä olkoon $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mitallinen kuvaus. Odotusarvo $\mathbb{E}[F(x)]$ saadaan integraalilla

$$(3.51) \quad I = \int_{\mathbb{R}^n} F(x)\pi(x)dx.$$

Integraalin laskeminen on tyypillisesti monimutkaista tai mahdotonta. Likiarvon laskeminen käyttäen suurta satunnaisotosta on kuitenkin mahdollista. Jos oletetaan kyseisen odotusarvon olevan äärellinen, saadaan satunnaisotokselle $x_i \sim x, i = 1, \dots, N$

$$(3.52) \quad I_N = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N F(x_i) \right).$$

Vahvan suurten lukujen lain (katso esim. [17]) perusteella saadaan edelleen

$$(3.53) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} I_N = I$$

melkein varmasti eli todennäköisyydellä 1.

Markovin ketjulla tarkoitetaan *stokastista prosessia* eli jonoa jonkun systeemin esimerkiksi aikakehitystä kuvaavia satunnaismuuttujia, jolla on *Markov-ominaisuus*. Tällä tarkoitetaan, että otosjonon jokainen jäsen saadaan ehdollisella todennäköisyydellä, joka riippuu vain jonon edellisestä jäsenestä. Voidaan osoittaa, että äärellisen määrän jäseniä jälkeen jonon otokset ovat jakautuneita ketjun *stationaarisen jakauman* mukaan. Ketju voidaan rakentaa noudattamaan tiettyä todennäköisyysjakaumaa, ja näin saada sen mukaisesti jakautunut joukko otoksia.

Yksi yleisesti käytetty MCMC-menetelmän laskennallinen implementaatio on *Metropolis-Hastings*-algoritmi. Olkoon x ja π kuten edellä. Määritellään *ehdotusjakauma* $Q(x, \cdot)$ ja

sen tiheysfunktio $q(x, y)$, joka kuvaa todennäköisyyttä liikkua tilasta x tilaan y . Oletetaan, että ajanhetkellä t olemme tilassa x_t . Algoritmi määrittää seuraavan tilan x_{t+1} kahdessa askeleessa:

1. Arvotaan *ehdokaspiste* z jakaumasta $Q(x_t, \cdot)$.
2. Piste z joko hyväksytään tai hylätään. *Hyväksymistodennäköisyys* saadaan säännöllä

$$(3.54) \quad \alpha(x_t, z) = \begin{cases} \min\left(\frac{\pi(z)q(z, x_t)}{\pi(x_t)q(x_t, z)}, 1\right), & \text{jos } \pi(x_t)q(x_t, z) > 0 \\ 1, & \text{jos } \pi(x_t)q(x_t, z) = 0. \end{cases}$$

Mikäli piste z hyväksytään, asetetaan $x_{t+1} = z$ ja muutoin $x_{t+1} = x_t$. Symmetrisellä ehdotusjakaumalla saadaan $q(x, z) = q(z, x)$, jolloin edellinen voidaan kirjoittaa yksinkertaisemmin

$$(3.55) \quad \alpha(x, z) = \min\left(\frac{\pi(z)}{\pi(x)}, 1\right).$$

Menetelmä on erityisen toimiva tilastollisten inversio-ongelmien näkökulmasta, sillä Bayesin kaavassa nimittäjässä esiintyvä normitusvakio $\pi(y)$ supistuu pois laskettaessa osamäärää $\pi(z|y)/\pi(x|y)$. Näin säästetään huomattavasti laskenta-aikaa. Edellinen tarkastelu on tarkoituksella jätetty pintapuoliseksi, koska tässä tutkielmassa ei laajempaa MCMC:n käsittelyä vaadita. Syvemmin MCMC-menetelmää on käsitelty esimerkiksi lähteissä [14], [15].

Luku 4

Informaatio- ja data-avaruus

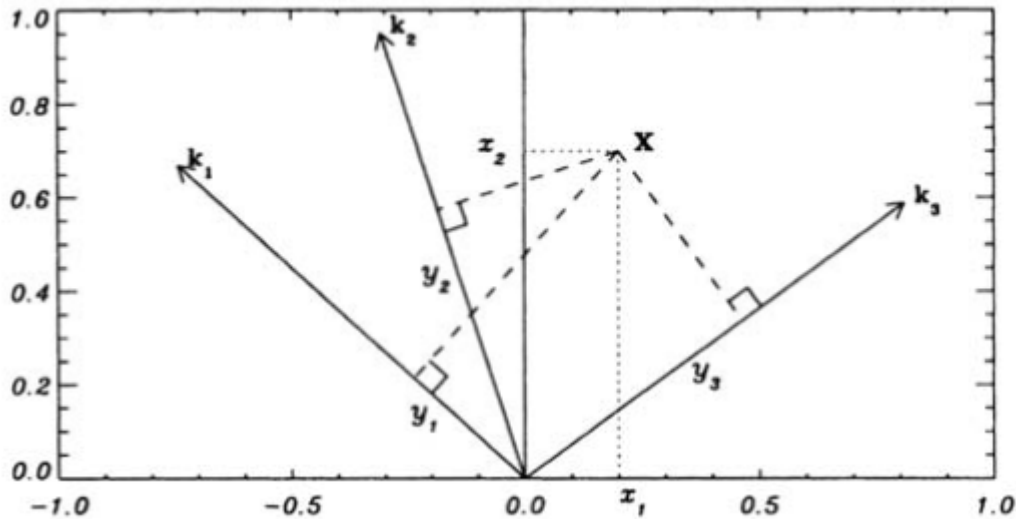
Edellisessä luvussa käsitelty tilastollinen lähestymistapa tasapainottaa inversio-ongelman ratkaisun prioritiedon ja mittauksesta saadun informaation välillä. Kohinainen mittaus sisältää kuitenkin usein informaatiota vähemmän kuin mitatun datan dimension verran. Toisin sanoen voidaan data-avaruudesta erottaa aliavaruus, joka sisältää kaiken mittauksessa esiintyvän vaihtelun. Nimitetään tämän aliavaruuden kantavektoreita *informatiivisiksi suunniksi*. Tämän avaruuden komplementtiin jäävistä suunnista ei siis saada mittauksesta juurikaan informaatiota, jolloin näiden suuntien laskennallinen käsittely on laskentatehon hukkaamista. Tässä luvussa käsitellään Rodgersin kirjaan [3] perustuen menetelmä erottaa mittauksesta informatiiviset suunnat tai *vapausasteet*, jotka sisältävät kohteesta informaatiota eivätkä ole mittausvirheen turmelemissa. Tätä käytetään myöhemmin hyväksi ulottuvuuden pudottamisessa.

4.1 Tila- ja data-avaruus

Yleensä kaukokartoituksen inversio-ongelmat ovat epälineaarisia. Seuraavaa *informaatio- ja data-avaruuden* tarkastelua varten oletetaan, että suora malli $F(x)$ on epälineaarinen, ja linearisoidaan se jonkin referenssitilan x_0 suhteen:

$$(4.1) \quad y - F(x_0) = \frac{\partial F(x)}{\partial x}(x - x_0) + \varepsilon = K(x - x_0) + \varepsilon,$$

missä $y \in \mathbb{R}^m$ on data, $x \in \mathbb{R}^n$ on tuntematon ja $\partial F(x)/\partial x$ on suoran mallin *Fréchet'n derivaatta* (katso esimerkiksi [3]). Yhtälö 4.1 määrittelee suoran mallin linearisaationa *jakobiaanin*, eli matriisin $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$, missä $J_{ij} = \partial F_i(x)/\partial x_j$. Yksinkertaistaaksemme merkintöjä kiinnitetään tila-avaruuden origo pisteeseen x_0 ja vastaavasti data-avaruuden origoksi $F(x_0)$.



Kuva 4.1: Havainnekuva 2-ulotteisesta tila-avaruudesta ja 3-ulotteisesta data-avaruudesta. Kuva lähteestä [3].

Tarkastellaan kohinatonta mittausa $y = Jx$, missä $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$ sekä $y \in \mathbb{R}^m$. Mittausmalli voidaan siis kirjoittaa auki seuraavasi:

$$(4.2) \quad \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & \cdots & J_{1n} \\ J_{21} & J_{22} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ J_{m1} & \cdots & & J_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}.$$

Matriisin J rivejä k_i voidaan ajatella tila-avaruuden n -ulotteisina vektoreina, vaikkeivat ne mitään tilaa edustakaan. Näin jokainen vektorin y alkio y_i voidaan esittää projektiona

$$(4.3) \quad y_i = k_i x = x^T k_i^T.$$

Tässä K ei välttämättä ole neliömatriisi. Jos $m < n$, yhtälöryhmän kuvaamaa ongelmaa sanotaan huonosti määritellyksi tai *alimääritellyksi*. Vastaavasti jos $m > n$, ongelma *ylimääritetty*. Tilanne ei kuitenkaan aina ole näin yksinkertainen: ongelman rakenteesta riippuen voidaan esimerkiksi ylimäärittelystä tapauksesta silti päätyä tilanteeseen, missä yhtälöitä on vähemmän kuin muuttujia ja ongelma onkin pohjimmiltaan alimääritetty. Tapauksista on esitelty esimerkkejä kirjassa [3].

Kuvassa 4.1 on havainnollistettu tilannetta, missä $x \in \mathbb{R}^2$, $y \in \mathbb{R}^3$ ja matriisin $J \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ rivejä kuvaavat vektorit k_1, k_2, k_3 on valittu yksikkövektoreiksi. Mittauksen $y = Jx$ kom-

ponentit y_1, y_2, y_3 vastaavat tilan x ortogonaalisia projektioita vektoreita k_i vasten. Kyseessä on ylimääritelty mittausta, ja mittaustavirheen läsnäollessa normaalit eivät välttämättä leikkaakaan toisiaan samassa pisteessä.

Matriisin J rivit k_i virittävät tila-avaruuden enintään m -ulotteisen aliavaruuden. Aliavaruuden ulottuvuus voi kuitenkin olla alle m , mikäli vektorit k_i ovat lineaarisesti riippuvia. Merkitään tämän aliavaruuden ulottuvuutta eli matriisin J astetta kirjaimella p . Tilanteessa, jossa $m > n$, matriisin J aste on kuitenkin enintään n . J :n rivit virittävät näin *riviavaruuden*, kun ne mielletään vektoreiksi. Vastaavasti J :n sarakkeet virittävät p -ulotteisen *sarakeavaruuden*, joka on data-avaruuden aliavaruus.

Riviavaruudelle voidaan löytää p kantavektoria ja näiden kanssa $n - p$ kohtisuoraa vektoria, jotka virittävät matriisin J nolla-avaruuden eli lineaarikuvauksen J ytimen $\text{Ker}(J)$. Nolla-avaruus on epätyhjä, mikäli $p < n$, ja täten kuvaus on alimääritelty. Vastaavasti kuvaus on hyvinmääritelty vain, jos $m = p = n$.

Esitetään seuraavaksi tapa tunnistaa kuvauksen J ydin etsimällä riviavaruudelle kanta. Yksinkertaisimmillaan tähän voisi käyttää *Gram-Schmidt -menetelmää* (katso esim. [16]), mutta matriisin singulaariarvohajoitelmalla on useita tässä työssä myöhemmin hyödyllisiä ominaisuuksia. Voimme esittää matriisin J muodossa

$$(4.4) \quad J = U\Lambda V^T$$

missä $U \in \mathbb{R}^{m \times p}$ ja $V \in \mathbb{R}^{n \times p}$ sisältävät oikean- ja vasemmanpuoleiset singulaarivektorit sekä $\Lambda \in \mathbb{R}^{p \times p}$ on diagonaalimatriisi, joka sisältää kaikki matriisin J nolasta poikkeavat singulaariarvot.

Lause 4.1. *Olkoon $J = U\Lambda V^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$ kuten edellä, ja oletetaan diagonaalien singulaariarvoista, että $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq \lambda_{p+1} = \dots = \lambda_{\min(m,n)} = 0$. Merkitään*

$$(4.5) \quad U = [u_1, \dots, u_m], \quad V = [v_1, \dots, v_n].$$

Tällöin pätee

$$(4.6) \quad \begin{aligned} \text{Ker}(J) &= \text{span}\{v_{p+1}, \dots, v_n\} = \text{Ran}(J^T)^\perp, \\ \text{Ker}(J^T) &= \text{span}\{u_{p+1}, \dots, u_m\} = \text{Ran}(J)^\perp, \end{aligned}$$

missä $\text{span}\{v_{p+1}, \dots, v_n\}$ on vektoreiden v_{p+1}, \dots, v_n virittämä aliavaruus.

Todistus. Matriisin U ortogonaalisuudesta seuraa, että $Jx = 0$ pätee jos ja vain jos

$$(4.7) \quad \Lambda V^T x = \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1^T x \\ \vdots \\ \lambda_p v_p^T x \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = 0,$$

mistä seuraa suoraan, että $\text{Ker}(J) = \text{span}\{v_{p+1}, \dots, v_n\}$. Sama päättely voidaan toistaa matriisille V , kun huomataan, että $J^T = V\Lambda U^T$.

Toisaalta nähdään, että $x \in \text{Ker}(J)$ on yhtäpitävää sen kanssa, että

$$(4.8) \quad (Jx)^T y = x^T J^T y = 0$$

kaikille $y \in \mathbb{R}^m$, joten $x \perp \text{Ran}(J^T)$ □

Eryteisesti, jos U ja V kirjoitetaan

$$(4.9) \quad \begin{aligned} U &= [[u_1, \dots, u_p][u_{p+1}, \dots, u_m]] = [U_1, U_2], \\ V &= [[v_1, \dots, v_p][v_{p+1}, \dots, v_n]] = [V_1, V_2], \end{aligned}$$

voidaan määrittellä ortogonaaliset projektiot $P : \mathbb{R}^n \rightarrow \text{Ker}(J)$ ja $\tilde{P} : \mathbb{R}^n \rightarrow \text{Ker}(J^T)$ asettamalla

$$(4.10) \quad P = V_2 V_2^T, \quad \tilde{P} = U_2 U_2^T$$

Asettamalla singulaariarvohajotelma linearisoituun suoraan malliin $y = Jx$ ja kertomalla oikealta U^T :llä saadaan

$$(4.11) \quad U^T y = \Lambda V^T x$$

ja merkitsemällä edelleen $y' = U^T y$ ja $x' = V^T x$ saadaan

$$(4.12) \quad y' = \Lambda x'$$

mistä nähdään p -ulotteisen mittauksen y' vastaavan p -ulotteista tilaa x' .

Esimerkki 4.1 (Singulaariarvohajotelman määrittelemä koordinaattimuunnos). Tarkastellaan normaalijakautunutta satunnaismuuttujaa $y \sim \mathcal{N}(y_0, \Sigma)$. Positiivis-definiitti kovarianssimatriisi voidaan kirjoittaa ominaisarvohajotelmana $\Sigma = L\Lambda L^T$ ja jakaumaksi saadaan

$$(4.13) \quad \begin{aligned} \pi(y) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |L\Lambda L^T|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y - y_0)^T L\Lambda^{-1} L^T (y - y_0)\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Lambda|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(z)^T \Lambda^{-1} (z)\right), \end{aligned}$$

missä $z = L^T(y - y_0)$. Näin tiheysfunktio voidaan kirjoittaa vektorin z elementtien tiheysfunktioiden tulona

$$(4.14) \quad \pi(z) = \prod_i \left(\frac{1}{2\pi\lambda_i}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{z_i^2}{2\lambda_i}\right),$$

missä ominaisarvo λ_i vastaa komponentin z_i varianssia.

Esimerkki 4.2 (Pääkomponenttianalyysi (principal component analysis, PCA)). Pinnat, joilla todennäköisyys on vakio $c \in \mathbb{R}$ voidaan kirjoittaa muodossa

$$(4.15) \quad (x - x_0)^T \Sigma^{-1} (x - x_0) = \sum_i z_i^2 / \lambda_i = c.$$

Vertaamalla yhtälöä 4.15 luvun 2 tarkasteluun nähdään, että kyseiset pinnat ovat data-avaruuden ellipsoideja, joiden pääakselit vastaavat kovarianssimatriisin Σ ominaisarvoja. Näiden pääakselien pituudet ovat näin verrannollisia vastaavien ominaisarvojen neliöjuuriin $\lambda_i^{-1/2}$.

Jos normaalijakautuneella satunnaismuuttujalla x on odotusarvo x_0 , niin muuttuja $x - x_0$ on jakautunut odotusarvolla 0. Näin ollen voidaan olettaa $x \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$. Kuten edellä näytettiin, normaalijakautuneen satunnaismuuttujan todennäköisyyden tasa-arvokäyrät $x^T \Sigma^{-1} x = c$ ovat ellipsoideja, joiden pääkomponentit z_i sekä niiden pituudet $\lambda_i^{-1/2}$ ovat matriisin Σ ominaisvektoreita ja -arvoja. Pienet ominaisarvojen vastaavat siis luvussa aiemmin käsiteltyjä epäinformatiivisia dimensioita.

4.2 Kuinka monta riippumatonta komponenttia voidaan mitata?

Kohinattomasta mittauksesta saadaan periaatteessa edellisen käsittelyn perusteella p riippumatonta komponenttia *informaatiota*. Todellisuudessa mittausvirhe voi kuitenkin olla niin suuri, että osa näistä suunnista jää turmeltuneina täysin käyttökelvottomiksi. Käyttökelpoisten dimensioiden määrää kutsutaan ongelman *efektiiviseksi asteeksi*, ja näitä vastaavaa aliavaruutta vuorostaan *efektiiviseksi riviavaruudeksi*.

4.2.1 Mittauksen informaation sisältö verrattuna kohinaan

Verrataan seuraavaksi mittausvirheen kovarianssia Σ_{obs} tuntemattoman *x priorijakauman* vastaavan *datan y jakauman* kovarianssiin. Näin tehtäessä dimensiot, joiden luontainen vaihtelevuus on pienempää kuin kohinalla eivät käytännössä ole mitattavissa eivätkä näin kuulu efektiiviseen riviavaruuteen. Kovarianssimatriisit eivät myöskään aina ole diagonaalisia, jolloin niiden vertailu ei ole yksiselitteistä. Tämän vuoksi onkin hyödyllistä tehdä muunnos, jolla ei-diagonaaliset alkiot muutetaan nolliksi. Suoraviivainen tapa tehdä tämä on muuntaa linearisoitu suora malli $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $y = Jx + \varepsilon$, $x \in \mathbb{R}^n$, $y, \varepsilon \in \mathbb{R}^m$, asettamalla

$$(4.16) \quad \tilde{x} = \Sigma_{pr}^{-\frac{1}{2}} (x - x_0), \quad \tilde{\varepsilon} = \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon,$$

missä $\Sigma_{pr}^{-\frac{1}{2}}$ ja $\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}$ ovat priorin ja kohinan kovarianssimatriisien neliöjuuria, eli $\Sigma_{pr}^{-\frac{1}{2}}\Sigma_{pr}^{-\frac{1}{2}} = \Sigma_{pr}$ ja $\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}} = \Sigma_{obs}$. Tällöin saadaan skaalattu datavektori

$$(4.17) \quad \tilde{y} = \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}J\Sigma_{pr}^{\frac{1}{2}}\tilde{x} + \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}\varepsilon = \tilde{J}\tilde{x} + \tilde{\varepsilon}.$$

missä $\tilde{J} = \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}J\Sigma_{pr}^{\frac{1}{2}}$. Nyt \tilde{x} ja $\tilde{\varepsilon}$ ovat molemmat jakautuneet kovarianssilla $\mathbf{1}$, esimerkiksi

$$(4.18) \quad \tilde{\Sigma}_{obs} = \mathbb{E}[\tilde{\varepsilon}\tilde{\varepsilon}^T] = \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}\mathbb{E}[\varepsilon\varepsilon^T]\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}} = \Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}\Sigma_{obs}\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{1}.$$

Muunnos tekee kohinasta *valkoista kohinaa* $\tilde{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1})$, minkä vuoksi siitä käytetään nimitystä *valkaisu* (eng. prewhitening).

Määritelmä 4.1. Symmetrisen, positiivis-definiitin matriisin A yksikäsitteinen *Choleskyn hajotelma* on

$$(4.19) \quad A = \mathcal{L}\mathcal{L}^T$$

missä \mathcal{L} on alakolmiomatriisi, jonka diagonaalien alkioit ovat positiivisia.

Kovarianssimatriisin Cholesky-hajotelma vastaa yhtä matriisin neliöjuurta. Näiden avulla voidaan kirjoittaa

$$(4.20) \quad \tilde{x} = \mathcal{L}_{pr}^{-T}(x - x_0), \quad \tilde{y} = \mathcal{L}_{obs}^{-T}y, \quad \tilde{J} = \mathcal{L}_{obs}^{-T}J\mathcal{L}_{pr}^T$$

Määritelmä 4.2. Olkoon normaalijakautuneet x :n priori $\pi_{pr} \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr})$ ja mittausvirhe $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{obs})$ sekä linearisoitu suora malli $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tunnetut. Oletetaan lisäksi, että x ja ε ovat riippumattomia. Mitatun datan $y = Jx + \varepsilon$ *tuntemattoman x priorijakauma* *vastaava jakauma* on tällöin

$$(4.21) \quad \hat{\pi}(y) = \mathcal{N}(Jx_0, J\Sigma_{pr}J^T + \Sigma_{obs}).$$

Nyt pystytään informatiivisten suuntien löytämiseksi vertaamaan kohinan kovarianssia skaalatun datan \tilde{y} tuntemattoman x priorikovarianssia vastaavaan kovarianssiin:

$$(4.22) \quad \tilde{\Sigma}_y = \mathbb{E}[\tilde{y}\tilde{y}^T] = \mathbb{E}[(\tilde{J}\tilde{x} + \tilde{\varepsilon})(\tilde{J}\tilde{x} + \tilde{\varepsilon})^T] = \tilde{J}\tilde{J}^T + \mathbf{1}.$$

Mitatun datan luonnollinen vaihtelu, joka ei riipu kohinasta, on siis $\tilde{J}\tilde{J}^T$. Koska kyseinen matriisi ei normaalisti ole diagonaalinen eikä siten verrattavissa kohinaan, tehdään vielä singulaariarvohajotelma valkaistulle suoralle mallille $\tilde{J} = U\Lambda V^T$, minkä jälkeen saadaan

$$(4.23) \quad y' = U^T\tilde{y} = U^T\tilde{J}\tilde{x} + U^T\tilde{\varepsilon} = \Lambda V^T\tilde{x} + \tilde{\varepsilon}' = \Lambda\tilde{x}' + \tilde{\varepsilon}'.$$

Nyt muunnokset ε' ja x' säilyttävät kovarianssimatriisina ykkösmatriisin. Tällöin y' on jakautunut kovarianssilla $\Lambda^2 + \mathbf{1}$. Tämä on diagonaalimatriisi, ja y' :n komponentit, jotka eivät joudu mittausvirheen tarvelemiksi ovat ne, joille $\lambda_i^2 \geq 1$. Ongelman efektiivinen dimensio siis vastaa matriisin \tilde{J} ykköstä suurempien singulaariarvojen lukumäärää.

4.2.2 Vapausasteet

Matemaattisessa kuvailussa systeemin *vapausasteiden* lukumäärällä tarkoitetaan niiden muuttujien lukumäärää, jotka voivat vaihdella. Tästä voidaan esimerkkinä mainita ne suunnat, joihin dynaaminen systeemi voi liikkua asetettujen rajoitusehtojen vallitessa. Toisin sanoen puhutaan minimimäärästä riippumattomia koordinaatteja, joilla voidaan määritellä systeemin tila täysin. Linearisessa tai linearisoidussa ongelmassa voidaan siis puhua vapausasteiden lukumäärästä kyseessä olevan aliavaruuden dimensiona.

Edellisen käsittelyn tuloksia mitattavan datan informatiivisista suunnista voidaan vielä formalisoida liittämällä ne vapausasteiden määritelmään ja tutkimalla, mitä vapausasteista vastaavat mittauksessa signaalia ja mitkä kohinaa. Tarkastellaan yksinkertaisena yhden vapausasteen tapauksena yksiulotteista mittausta

$$(4.24) \quad y = x + \varepsilon,$$

missä muuttujat $x \in \mathbb{R}$ ja $\varepsilon \in \mathbb{R}$ ovat normaalijakautuneita, eli $x \sim \mathcal{N}(x_0, \sigma_{pr}^2)$ ja $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{obs}^2)$. Tällöin datan y varianssi on $\sigma_{pr}^2 + \sigma_{obs}^2$. Lauseen (3.4) nojalla saadaan

$$(4.25) \quad \bar{x} = \frac{\sigma_{pr}^{-2}x_0 + \sigma_{obs}^{-2}x}{\sigma_{pr}^{-2} + \sigma_{obs}^{-2}} = \frac{\sigma_{pr}^2x + \sigma_{obs}^2x_0}{\sigma_{pr}^2 + \sigma_{obs}^2}.$$

Yhtälöstä (4.25) nähdään, että jos $\sigma_{pr}^2 \gg \sigma_{obs}^2$, antaa mittaus tietoa muuttujasta x eli saadaan vapausaste signaalille, ja vastaavasti jos $\sigma_{pr}^2 \ll \sigma_{obs}^2$, saadaan tietoa mittausvirheestä ε eli vapausaste kohinalle.

Tarkastellaan sitten mittausta, jolla on yhteensä m vapausastetta. Toisin sanoen tarkoittaa, että $y \in \mathbb{R}^m$. Linearisessa gaussisessa tapauksessa $x \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr})$, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{obs})$ todennäköisin tila \bar{x} minimoi normaalijakauman eksponentissa esiintyvän *sakkofunktion*

$$(4.26) \quad \eta(x) = (x - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (x - x_0) + \varepsilon^T \Sigma_{obs}^{-1} \varepsilon,$$

missä $\varepsilon = y - Jx$. Jälleen lauseen (3.4) nojalla saadaan minimiksi

$$(4.27) \quad \bar{x} - x_0 = G(y - Jx_0) = G[J(x - x_0) + \varepsilon],$$

missä matriisia $G = \Sigma_{pr} J^T (J \Sigma_{pr} J^T + \Sigma_{obs})^{-1}$ kutsutaan *kontribuutiomatriisiksi*.

Edellämainitussa minimissä voidaan sakkofunktion η odotusarvon näyttää yhtenevän mittauksen vapausasteiden lukumäärän m kanssa (katso esimerkiksi [3]). Analogisesti yksiulotteisen tapauksen kanssa tämä on myös mitatun datan dimensio. Lausekkeen (5.3) odotusarvo d voidaan muuttujien x ja ε riippumattomuuden nojalla jakaa kahteen osaan $d = d_{signal} + d_{obs}$, missä

$$(4.28) \quad \begin{aligned} d_{signal} &= \mathbb{E}[(\bar{x} - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (\bar{x} - x_0)] \\ d_{obs} &= \mathbb{E}[\bar{\varepsilon}^T \Sigma_{obs}^{-1} \bar{\varepsilon}]. \end{aligned}$$

Näistä ensimmäinen liittyy siis signaaliin ja toinen kohinaan. Täten d_{signal} kertoo toisistaan riippumattomien mittauksesta saatavien informaatioyksiköiden määrän, eli kuinka monesta tilavektorin dimensiosta voidaan mittauksessa saada tietoa.

Etsitään seuraavaksi signaalin ja kohinan vapausasteille eksplisiittinen esitystapa. Käyttämällä matriisin jäljen ominaisuuksia $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ sekä neliömuodolle $\mathbb{E}[\text{tr}(x^T Ax)] = \text{tr}(\mathbb{E}[x^T Ax])$ saadaan

$$\begin{aligned}
d_{signal} &= \mathbb{E}[(\bar{x} - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (\bar{x} - x_0)] \\
&= \mathbb{E}[\text{tr}((\bar{x} - x_0)(\bar{x} - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1})] \\
&= \text{tr}(\mathbb{E}[(\bar{x} - x_0)(\bar{x} - x_0)^T] \Sigma_{pr}^{-1}) \\
(4.29) \quad &= \text{tr}(\mathbb{E}[G(y - Jx_0)(y - Jx_0)^T G^T] \Sigma_{pr}^{-1}) \\
&= \text{tr}(\mathbb{E}[\Sigma_{pr} J^T (J \Sigma_{pr} J^T + \Sigma_{obs})^{-1} J \Sigma_{pr}] \Sigma_{pr}^{-1}) \\
&= \text{tr}(J \Sigma_{pr} J^T [J \Sigma_{pr} J^T + \Sigma_{obs}]^{-1}) \\
&= \text{tr}(JG).
\end{aligned}$$

Samalla päättelyllä saadaan kohinan vapausasteelle johdettua

$$(4.30) \quad d_{obs} = \text{tr}([J^T \Sigma_{obs}^{-1} J + \Sigma_{pr}^{-1}]^{-1} \Sigma_{pr}^{-1}).$$

Tästä saadaan odotetusti yhteenlaskemalla $d_{signal} + d_{obs} = \text{tr}(\mathbf{1}_m) = m$. Johdosta saadaan signaalin vapausasteelle myös muoto $\text{tr}(GJ)$. Tästä saatavaa matriisia $\mathbb{A} = GJ$ kutsutaan *keskiarvoistavaksi ytimeksi* (eng. averaging kernel). Matriisille saadaan seuraava kytkös normaalijakauman odotusarvon kanssa:

$$(4.31) \quad \bar{x} - x_0 = Gy = G[J(x - x_0) + \varepsilon] = \mathbb{A}(x - x_0) + G\varepsilon.$$

Matriisin jäljen ominaisuuksista seuraa, että vapausasteet ovat invariantteja lineaaristen muunnosten suhteen. Näin ollen voidaan signaalin vapausastetta tarkastella myös aikaisemmin määrittelyjen \tilde{x}, \tilde{y} ja x', y' muunnosten suhteen:

$$\begin{aligned}
(4.32) \quad d_{signal}(y) &= d_{signal}(\tilde{y}) = \text{tr}(\tilde{J}\tilde{J}^T [\tilde{J}\tilde{J}^T + \mathbf{1}_m]^{-1}) \\
&= d_{signal}(y') = \text{tr}(\Lambda^2 (\Lambda^2 + \mathbf{1}_m)^{-1}).
\end{aligned}$$

Näin saadaan oikeutus aikaisemmalle käsittelylle, jossa riippumattomien mitattavien komponenttien eli vapausasteiden lukumäärä saatiin skaalatusta datasta \tilde{y} eikä suoraan mittauksesta y .

Luku 5

Posteriorijakauman informatiiviset suunnat

Tähänastisen käsittelyn perusteella huomaamme, että tilastollisen inversio-ongelman ratkaisu vastaa normaalijakautuneiden satunnaismuuttujien lineaarisessa tapauksissa priorijakauman odotusarvon sekä kovarianssimatriisin päivitystä mittauksesta saadulla informaatiolla. Luvun 4 nojalla kohinainen mittaus sisältää usein vain pienen määrän vapausasteita itse signaalin suhteen, eli päivitys rajoittuu tila-avaruuden pieniulotteiseen aliavaruuteen. Kyseisen aliavaruuden tunnistaminen ja käyttö posteriorijakauman approksimoimiseen tarjoaa laskennallisesti raskaissa ongelmissa mahdollisuuden ratkaista ongelma huomattavasti pienemmillä laskentaresursseilla.

Tässä luvussa esittelemme tuloksia julkaisuista [5] ja [6], joista ensimmäisessä esitellään tapa tarkastella lineaarista mittausta priorin kovarianssin ja odotusarvon päivityksenä sekä tunnistaa tila-avaruuden *informatiivinen aliavaruus* ja pienentää ongelman ulottuvuutta huomattavasti approksimoimalla posterioria tässä aliavaruudessa. Jälkimmäisessä julkaisussa menetelmää on pyritty yleistämään epälineaarisiin ongelmiin. Käsittelyssä keskitytään tämän tutkielman kannalta oleellisempiin epälineaarisiin tapauksiin sekä niistä johdettuun laskennalliseen sovellutukseen johdannossa esitetyn ongelman 1.1 ratkaisemiseksi, joten julkaisuissa esitettyjen lauseiden todistuksia ei käydä läpi. Lisäksi pyritään näyttämään yhteys näiden julkaisujen formalismin sekä aikaisemmin käsitellyn Rodgersin kirjan [3] merkintätapojen välillä.

5.1 Määritelmiä

Esitellään seuraavaksi joitain myöhemmin tutkielmassa käytettäviä tärkeitä määritelmiä.

Määritelmä 5.1. *Hellingerin etäisyys* kahdelle avaruuden Ω todennäköisyysjakaumalle P ja Q on

$$(5.1) \quad d_{\mathcal{H}}(P, Q) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\sqrt{p(x)} - \sqrt{q(x)} \right)^2 dx = 1 - \int_{\Omega} \sqrt{p(x)q(x)} dx,$$

missä $p(x)$ ja $q(x)$ ovat P :n ja Q :n tiheysfunktiot sekä integraali lasketaan Lebesquen mielessä.

Hellingerin etäisyys on todennäköisyysteoriassa yleisesti käytetty metriikka, jolla mitataan kahden todennäköisyysjakauman etäisyyttä toisistaan. Suurimmillaan etäisyys on 1 silloin, kun P antaa nollasta poikkeavan todennäköisyyden kaikille niille tapahtumille, joiden todennäköisyys mitalla Q on 0, ja päinvastoin. Vastaavasti jos $p(x) = q(x)$ melkein kaikilla $x \in \Omega$, saadaan $H^2(P, Q) = 0$.

Lemma 5.1. Woodburyn identiteetti: *olkoon $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ja $C \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ei-singulaarisia matriiseja sekä $U \in \mathbb{R}^{n \times k}$ ja $V \in \mathbb{R}^{k \times n}$ mielivaltaisia matriiseja. Tällöin*

$$(5.2) \quad (A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}.$$

Määritelmä 5.2. Olkoon $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, Tällöin *yleistetyn ominaisarvo-ongelman*

$$(5.3) \quad (A, B): Ax = \lambda Bx$$

ratkaisuja $\lambda \in \mathbb{R}$ sekä $x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$ kutsutaan *yleistetyn ominaisarvo-ongelman ominaisarvoiksi ja -vektoreiksi*.

Määritelmä 5.3. Tarkastellaan luvussa 3 määriteltyä tilastollista inversio-ongelmaa, missä $x \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr})$ ja $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{obs})$ on additiivista kohinaa. Nyt voidaan määritellä *sakkofunktio* (data misfit function)

$$(5.4) \quad \eta(x) = \frac{1}{2} \|\Sigma_{obs}^{-\frac{1}{2}}(y - F(x))\|^2,$$

jolloin uskottavuusfunktiolle pätee $\pi(y|x) \propto \exp(-\eta(x))$.

Määritelmä 5.4. Olkoon $\eta(x)$ kuten määritelmässä 5.3. Matriisia $H = J^T \Sigma_{obs}^{-1} J$ kutsutaan sakkofunktion $\eta(x)$ *Hessen matriisiksi*, ja kovarianssimatriisiin Σ käänteismatriisia Σ^{-1} *tarkkuusmatriisiksi*.

5.2 Lineaariset ongelmat

Syvennyttään seuraavaksi dimensioreduktion kannalta tämän tutkielman tärkeimpiin tuloksiin. Seurataan julkaisun [6] esitystä ja näytetään, että tilastolliselle ja lineaariselle inversio-ongelmalle on olemassa yksikäsitteinen optimaalinen r -ulotteinen approksimaatio. Määritellään myös, mitä tarkoitamme optimaalisuudella tässä yhteydessä sekä identifioidaan tila-avaruuden aliavaruus, joka sisältää suurimman osan mittauksessa saadusta informaatiosta

Oletetaan, että tarkasteltava inversio-ongelma on gaussinen ja lineaarinen tai linearisoitu kuten luvussa 4. Kirjoitetaan posteriorijakauman kovarianssimatriisin yhtälö (3.29) käyttäen Hessen matriisia muodossa

$$(5.5) \quad \begin{aligned} \Sigma_{post} &= (J^T \Sigma_{obs}^{-1} J + \Sigma_{pr}^{-1})^{-1} \\ &= (H + \Sigma_{pr}^{-1})^{-1}. \end{aligned}$$

Tarkastellaan posteriorijakauman approksimaatioita, jotka ovat muotoa

$$(5.6) \quad \tilde{\pi}(x|y) \propto \pi(y|P_r x) \pi_{pr}(x),$$

missä $P_r = P_r^2$ on asteen r projektio, eli kuvauksen P maaliavaruus on r -ulotteinen, ja $\pi(y|P_r x)$ on alkuperäisen posteriorijakauman $\pi(x|y)$ approksimaatio. Koska posteriori on normaalijakaumien tulona myös normaalijakautunut, pyritään löytämään approksimaatiolle kovarianssi $\hat{\Sigma}_{post}$. Posteriorin tarkkuusmatriisi Σ_{post}^{-1} on kaavan (5.5) nojalla ei-negatiivinen päivitys priorin tarkkuusmatriisiin Σ_{pr}^{-1} :

$$(5.7) \quad \Sigma_{post}^{-1} = \Sigma_{pr}^{-1} + Z Z^T,$$

missä $Z Z^T = H$. Käyttämällä Woodbury'n identiteettiä 5.1 voidaan posteriorin kovarianssimatriisi kirjoittaa priorin kovarianssimatriisi ei-negatiivisena päivityksenä:

$$(5.8) \quad \Sigma_{post} = \Sigma_{pr} - K K^T,$$

missä $K K^T = \Sigma_{pr} J^T \Sigma_y^{-1} J \Sigma_{pr}$ ja $\Sigma_y = \Sigma_{obs} + J \Sigma_{pr} J^T$. Päivitys on negatiivis-semidefiniitti, koska uuden datan mittaaminen lisää aina informaatiota. Tämä tarkoittaa, että posteriorin varianssi on mihin tahansa suuntaan korkeintaan yhtä suuri kuin priorivarianssi. Päivityksen aste on myös pieni: tila-avaruudessa on, kuten edellisissä luvuissa ollaan nähty, suuntia, joille mitattu data ei ole prioriin nähden informatiivista. Huomattavaa on, että tämä pätee normaalijakautuneiden satunnaismuuttujien tapauksessa eikä välttämättä yleisesti mielivaltaisten todennäköisyysjakaumien käsittelyssä.

Määritellään kiinnitetylle asteelle r luokka negatiivis-semidefiniittejä matriiseja, jotka saadaan approksimoimalla posterikovarianssin päivityksiä:

$$(5.9) \quad \mathcal{M}_r = \{ \Sigma_{pr} - KK^T : 0 < \text{rank}(K) \leq r \},$$

Symmetrisille, positiivis-definiiteille matriiseille A ja B määritellään julkaisussa [9] Förstnerin etäisyys

$$(5.10) \quad d_{\mathcal{F}}^2(A, B) = \text{tr}[\ln^2(A^{-\frac{1}{2}}BA^{-\frac{1}{2}})] = \sum_i \ln^2(\lambda_i),$$

missä λ_i on jono yleistetyn ominaisarvo-ongelman (A, B) ominaisarvoja ja $\ln^2(x) = (\ln(x))^2$. Erityisesti Förstnerin metriikalla on seuraavat invarianssiominaisuudet:

$$(5.11) \quad d_{\mathcal{F}}(A, B) = d_{\mathcal{F}}(A^{-1}, B^{-1}), \quad d_{\mathcal{F}}(A, B) = d_{\mathcal{F}}(MAM^T, MBM^T),$$

missä M on mielivaltainen ei-singulaarinen matriisi. Förstnerin metriikka kohtelee myös yli- ja ali-approksimaatioita samalla tavalla, eli posteriorin kovarianssimatriisin approksimaatiolle $\widehat{\Sigma}_{post}$ pätee $d_{\mathcal{F}}(\Sigma_{post}, \alpha \widehat{\Sigma}_{post}) \rightarrow \infty$ kun $\alpha \rightarrow 0$ sekä kun $\alpha \rightarrow \infty$.

Lemma 5.2. *Matriisi $\widehat{\Sigma}_{post} \in \mathcal{M}_r$ minimoi jakaumien $\mathcal{N}(\bar{x}, \Sigma_{post})$ ja $\mathcal{N}(\bar{x}, \widehat{\Sigma}_{post})$ Hellingerin etäisyyden jos ja vain jos se minimoi Förstnerin etäisyyden $d_{\mathcal{F}}^2(\Sigma_{post}, \widehat{\Sigma}_{post})$.*

Todistus. Katso [6]. □

Lause 5.1 (Optimaalinen posteriorikovarianssiapproksimaatio). *Olkoon (λ_i^2, w_i) yleistetyn ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) ominaisarvo-ominaisvektori -pareja siten, että $\lambda_i^2 \geq \lambda_{i+1}^2$ kaikille i , ja $H = J^T \Sigma_{obs}^{-1} J$. Tällöin*

(i) *Joukon \mathcal{M}_r ja kovarianssin Σ_{post} Förstnerin etäisyyden minimoiva alkio $\widehat{\Sigma}_{post}$ on*

$$(5.12) \quad \widehat{\Sigma}_{post} = \Sigma_{pr} - KK^T, \quad KK^T = \sum_{i=1}^r \lambda_i^2 (1 + \lambda_i^2)^{-1} w_i w_i^T.$$

Vastaava Förstnerin etäisyyden minimi on tällöin

$$(5.13) \quad d_{\mathcal{F}}^2(\widehat{\Sigma}_{post}, \Sigma_{post}) = \sum_{i>r} \ln^2(1/(1 + \lambda_i^2)).$$

(ii) *Kohdan (i) minimi on yksikäsitteinen jos yleistetyn ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) ensimmäiset r ominaisarvoa ovat erisuuret.*

Todistus. Katso [6]. □

Lauseesta 5.1 saadaan suoraviivainen tapa etsiä optimaalinen approksimaatio $\widehat{\Sigma}_{post}$ laskemalla yleistetyin ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) ominaisarvo ja -vektoriparit lopetusehtoon asti. Sopiva ehto saadaan esimerkiksi vastaavasta Förstnerin etäisyyden minimistä. Myöhempanä käytetään kuitenkin *Rayleigh'n suhdelukua* sopivana lopetusehtona ja näytetään sen yhtenevyys luvun 4 vapausasteiden tarkastelun kanssa.

Förstnerin metriikan ominaisuuksista seuraa, että optimaalisen approksimaation löytäminen matriisille Σ_{post} on ekvivalenttia matriisin Σ_{post}^{-1} approksimoinnin kanssa. On kuitenkin huomattava, että jälkimmäisen approksimaation eksplisiittisen muodon tunteminen auttaa suoraan kertomaan, missä suunnissa posteriori eroaa eniten priorista.

Korollaari 5.1 (Optimaalinen posteriorin tarkkuusmatriisin approksimaatio). *Olkoon $d_{\mathcal{F}}$ ja (λ_i^2, w_i) kuten edellä. Silloin*

(i) *Etäisyyden $d_{\mathcal{F}}(B, \Sigma_{post}^{-1})$ minimi $\widehat{\Sigma}_{post}^{-1}$, missä*

$$(5.14) \quad B \in \mathcal{M}_r^{-1} := \{ \Sigma_{pr}^{-1} + K K^T : 0 < \text{rank}(K) \leq r \}$$

saadaan laskettua kaavalla

$$(5.15) \quad \widehat{\Sigma}_{post}^{-1} = \Sigma_{pr}^{-1} + U U^T, \quad U U^T = \sum_{i=1}^r \lambda_i^2 \tilde{w}_i \tilde{w}_i^T, \quad \tilde{w}_i = \Sigma_{pr}^{-1} w_i.$$

Kyseinen minimi on yksikäsitteinen jos (H, Σ_{pr}^{-1}) :n ensimmäiset r ominaisarvoa ovat erit.

(ii) *Optimaalinen posteriorin tarkkuusmatriisin approksimaatio on täsmälleen optimaalisen kovarianssimatriisin approksimaation käänteismatriisi.*

(iii) *Vektorit \tilde{w}_i ovat $(\Sigma_{post}, \Sigma_{pr})$:n ominaisvektoreita:*

$$(5.16) \quad \Sigma_{post} \tilde{w}_i = \frac{1}{1 + \lambda_i^2} \Sigma_{pr} \tilde{w}_i.$$

Korollaari 5.2 (Optimaalinen projektiio). *Olkoon $\widehat{\Sigma}_{post}$ ja vektorit w_i, \tilde{w}_i kuten edellä. Tarkastellaan redusoitua suoraa mallia $\widehat{J}_r = J P_r$, missä $P_r^2 = P_r$ ja $P_r^T \neq P_r$, tarkemmin*

$$(5.17) \quad P_r = \sum_{i=1}^r w_i \tilde{w}_i^T.$$

Silloin $\widehat{\Sigma}_{post}$ on täsmälleen posteriorin kovarianssimatriisi, joka vastaa bayesilaista lineaarista mallia

$$(5.18) \quad y|x \sim \mathcal{N}(\widehat{J}_r x, \Sigma_{obs}), \quad x \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{pr}).$$

Esitellään seuraavaksi julkaisussa [6] kuvatulla tavalla posteriorin odotusarvolle lineaarinen approksimaatio $\hat{A}y \approx Ay$. Tätä varten käytetään posteriorin tarkkuusmatriisin indusoimaa keskivirheen neliötä

$$(5.19) \quad M_{post}(\delta(y)) = \mathbb{E} [(\delta(y) - x)^T \Sigma_{post}^{-1} (\delta(y) - x)] .$$

Keskivirheen neliön minimointia sanotaan myös *Bayes-riskin* minimoimiseksi. Approksimaatio tulee löytää luokasta

$$(5.20) \quad \mathcal{A}_r := \{A : \text{rank}(A) \leq r\} ,$$

missä r on kuten edellä. Saadaan siis minimointiongelma, jossa haluttu approksimaatio $\hat{A} \in \mathcal{A}_r$ toteuttaa ehdon

$$(5.21) \quad M_{post}(\hat{A}y) = \min_{A \in \mathcal{A}_r} \mathbb{E} [\|Ay - x\|_{\Sigma_{post}^{-1}}^2] .$$

Lause 5.2. *Olkoon (λ_i^2, w_i) kuten aikaisemmin sekä olkoon (\hat{v}_i) yleistetyn ominaisarvo-ongelman $(J, \Sigma_{pr} J^T, \Sigma_{obs})$ ominaisvektorit joihin liittyy ei-nouseva jono ominaisarvoja, sekä $\hat{v}_i^T \Sigma_{obs} \hat{v}_i = 1$. Silloin yhtälön 5.21 ratkaisu $\hat{A} \in \mathcal{A}$ on*

$$(5.22) \quad \hat{A} = \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i}{1 + \lambda_i^2} w_i \hat{v}_i^T .$$

Todistus. Katso [6]. □

Edeltävän käsittelyn yleistetyn ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) yleistetyille ominaisarvoille ja -vektoreille pätee

$$(5.23) \quad \begin{aligned} H w_i &= \lambda_i \Sigma_{pr}^{-1} w_i & ||\text{Merkitään } w_i &:= \mathcal{L}_{pr} \xi_i \\ H \mathcal{L}_{pr} \xi_i &= \lambda_i (\mathcal{L}_{pr} \mathcal{L}_{pr}^T)^{-1} \mathcal{L}_{pr} \xi_i & ||\text{Kerrotaan puolittain vasemmalta matriisilla } \mathcal{L}_{pr}^T \\ \Rightarrow \mathcal{L}_{pr}^T H \mathcal{L}_{pr} \xi_i &= \lambda_i \xi_i . \end{aligned}$$

Optimaalinen projektiio voidaan myös kirjoittaa muodossa

$$(5.24) \quad \begin{aligned} P_r &= \sum_i w_i \tilde{w}_i^T \\ &= \sum_i w_i (\Sigma_{pr}^{-1} w_i)^T & ||w_i &:= \mathcal{L}_{pr} \xi_i \\ &= \sum_i (\mathcal{L}_{pr} \xi_i) (\mathcal{L}_{pr} \xi_i)^T (\mathcal{L}_{pr} \mathcal{L}_{pr}^T)^{-1} \\ &= \sum_i (\mathcal{L}_{pr} \xi_i) (\mathcal{L}_{pr}^{-T} \xi_i)^T . \end{aligned}$$

Tämän huomion jälkeen kootaan vielä selkeyden vuoksi edeltävät tulokset lauseeksi:

Lause 5.3. Olkoon $\Sigma_{pr} = \mathcal{L}_{pr}\mathcal{L}_{pr}^T$ priorikovarianssin symmetrinen hajotelma (esimerkiksi Cholesky) ja olkoon (λ_i, ξ_i) valkaistun Hessen matriisin $(\mathcal{L}_{pr}^T H \mathcal{L}_{pr})$ ominaisarvo-ominaisvektoriparit siten, että $\lambda_i \geq \lambda_{i+1} \forall i$. Määritellään suunnat $u_i = \mathcal{L}_{pr}\xi_i$ ja $v_i = \mathcal{L}_{pr}^{-T}\xi_i$ sekä matriisit $U_r = [u_1, \dots, u_r]$ ja $V_r = [v_1 \dots v_r]$. Silloin projektio

$$(5.25) \quad P_r = U_r V_r^T$$

antaa posteriorijakaumalle approksimaation $\tilde{\pi}(P_r x|y) = \mathcal{N}(\hat{A}y, \hat{\Sigma}_{post})$ joka on optimaalinen seuraavassa mielessä:

(i) $\hat{\Sigma}_{post}$ minimoi Förstnerin etäisyyden alkuperäiseen posteriorikovarianssiin yli luokan positiivis-definiittejä symmetrisiä matriiseja, jotka voidaan kirjoittaa r -asteisina negatiivisesti semidefiniittejä priorikovarianssin päivityksiä.

(ii) $\hat{A}y$ minimoi Bayes-riskin $\mathbb{E}[\|Ay - x\|_{\Sigma_{post}^{-1}}^2]$ yli luokan lineaarikuvauksia Ay , joille $\text{rank}(A) \leq r$.

Vektorit (u_1, \dots, u_r) virittävät optimaalisen projektion maalijoukon. Tästä saadaan määriteltyä tila-avaruuden suurin mahdollinen määrä informaatiota sisältävä r -ulotteinen aliavaruus seuraavasti:

Määritelmä 5.5 (LIS). Olkoon matriisit $P_r = U_r V_r^T$, U_r ja V_r määritelty kuten lauseessa (5.3). Projektion $P_r : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{X}_r$ maalijoukko \mathbb{X}_r on matriisin $U_r = [u_1, \dots, u_r]$ sarakevektoreiden virittämä tila-avaruuden \mathbb{R}^n aliavaruus. Kutsutaan aliavaruutta \mathbb{X}_r lineaarisen inversio-ongelman *informatiiviseksi aliavaruudeksi* (eng. likelihood-informed subspace, LIS).

Kuten olemme jo huomanneet, vektorit (u_i) ovat yleistetyn ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) ominaisvektoreita. Näin ollen j :s kantavektori u_j maksimoi *Rayleigh-suhdeluvun*

$$(5.26) \quad \mathcal{R}(u) = \frac{u^T H u}{u^T \Sigma_{pr}^{-1} u}$$

yli tila-avaruuden aliavaruuden $\mathbb{R}^n \setminus \text{span}\{u_1, \dots, u_{j-1}\}$. Rayleigh-suhdelukua voidaan käyttää tulkitsemaan vektorit u_i suunniksi, joissa on eniten informaatiota suhteessa a priori -tietoon. Tarkastellaan esimerkiksi suuntaa $w \in \mathbb{R}^n$. Jos priorin on ns. *silottava* (eng. smoothing) eli se rankaisee posteriorijakaumassa ratkaisun perättäisten komponenttien suuria poikkeamia, niin yhtälön 5.26 nimittäjä on suuri. Myöskin jos suora malli ei ole herkkä suunnassa w tapahtuvalle variaatiolle, jää osoittaja pieneksi. Näin ollen Rayleigh-suhde on pieni ja w ei ole datan puolesta informatiivinen suunta prioritietoon nähden. Kääntäen, kun uskottavuusfunktion ja priorin roolit vaihdetaan, saadaan suunnat, jotka sisältävät eniten informaatiota prioriin nähden. Välimaastossa olevia tapauksia on luonnollisesti lukemattomia, mutta yleisesti suunnat, joissa Rayleigh'n suhdeluku (5.26) on suuri, löytyvät U_r :n sarakeista.

Huomionarvoista on, että U_r diagonalisoi sekä matriisin H että matriisin Σ_{pr}^{-1} . Kantavektorit (u_i) ovat ortogonaalisia ja voidaan valita myös ortonormaaleiksi priorin tarkkuusmatriisin indusoiman sisätulon suhteen.

Esimerkki 5.1. Tarkastellaan Rayleigh'n suhdeluvun maksimia, jonka löytämiseksi on laskettava derivaatan nollakohdat. Saadaan

$$\begin{aligned}
 (5.27) \quad \frac{\partial}{\partial v} \mathcal{R}(v) &= \frac{\partial}{\partial v} \frac{v^T H v}{v^T \Sigma_{pr}^{-1} v} \\
 &= \frac{v^T \Sigma_{pr}^{-1} v \frac{\partial}{\partial v} (v^T H v) - v^T H v \frac{\partial}{\partial v} (v^T \Sigma_{pr}^{-1} v)}{(v^T \Sigma_{pr}^{-1} v)^2} \\
 &= \frac{v^T \Sigma_{pr}^{-1} v (v^T (H + H^T)) - v^T H v (v^T (\Sigma_{pr}^{-1} + \Sigma_{pr}^{-T}))}{(v^T \Sigma_{pr}^{-1} v)^2}.
 \end{aligned}$$

Sijoitetaan edelliseen sellainen $v = u$, joka toteuttaa yleistetyn ominaisarvo-ongelman (H, Σ_{pr}^{-1}) ominaisvektorina yhtälön $\Sigma_{pr}^{-1} u = \lambda H u$ sekä $u^T \Sigma_{pr}^{-T} = \lambda u^T H^T$. Käyttämällä vielä määritelmistä seuraavaa matriisien symmetrisyyttä $\Sigma_{pr}^{-1} = \Sigma_{pr}^{-T}$, $H = H^T$ saadaan osoittajalle

$$\begin{aligned}
 (5.28) \quad &u^T \Sigma_{pr}^{-1} u (u^T H + u^T H^T) - u^T H u (u^T \Sigma_{pr}^{-1} + u^T \Sigma_{pr}^{-T}) \\
 &= u^T \lambda H u (u^T H^T + u^T H^T) - u^T H u (\lambda (u^T H^T + u^T H^T)) = 0.
 \end{aligned}$$

Näin löydetään osoittajan nollakohta, mikä näyttää suhdeluvun maksimin löytyvän jollain ominaisvektorilla u .

5.3 Epälineaariset ongelmat

Edellä esitelty lineaarisen ongelman dimensioreduktio ei sinällään sovi tämän tutkielman kiinnostuksen kohteena olevan epälineaarisen operaattorin käsittelyyn. Kun suora malli ei ole lineaarinen, sakkofunktion Hessen matriisi muuttuu tila-avaruuden evaluointipisteen mukana. Seuraavassa esitellään keinoja rakentaa globaali lineaarinen aliavaruus, joka on mahdollisimman hyvä epälineaarisen tapauksen approksimaatio.

Olkoon suora malli $F(x)$ kertaalleen differentioituva. Kiinnitettyllä $x_a \in \mathbb{R}^n$ saadaan linearisaatio $J(x_a) \equiv \nabla F(x_a)$ missä $J \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Käytetään tätä linearisaatiota rakentamaan sakkofunktion $\eta(x)$ Hessen matriisin lokaali Gaussin-Newtonin approksimaatio $H(x_a) = J(x_a)^T \Sigma_{obs}^{-1} J(x_a)$ pisteessä x_a . Nyt saadaan Rayleigh'n suhdeluvun lokaali muoto

$$(5.29) \quad \mathcal{R}(u; x_a) := \frac{u^T H(x_a) u}{u^T \Sigma_{pr}^{-1} u}.$$

Käytetään vielä muuttujanvaihtoa $\xi = \mathcal{L}_{pr}^{-1}u$, missä \mathcal{L}_{pr} on saatu priorin kovarianssimatriisin Choleskyn hajotelmasta, ja saadaan

$$(5.30) \quad \tilde{\mathcal{R}}(\xi; x_a) = \frac{\xi^T \mathcal{L}_{pr}^T H(x_a) \mathcal{L}_{pr} \xi}{\xi^T \xi} = \mathcal{R}(\mathcal{L}_{pr} u; x_a).$$

Tätä voidaan käyttää kvantifioimaan uskottavuusfunktion lokaali vaikutus prioriin nähdessä.

Ongelma 1 (Lokaalin LIS-avaruuden rakentaminen). *Oletetaan annetuksi sakkofunktion $\eta(x)$ Hessen matriisi $H(x_a)$ jollain kiinnitetyllä $x_a \in \mathbb{R}^n$. Etsi valkaistun Gaussin-Newtonin Hessen matriisin (prior-preconditioned Gauss-Newton Hessian, $\tilde{H}(x_a) = \mathcal{L}_{pr}^T H(x_a) \mathcal{L}_{pr}$) ominaisarvohajotelma*

$$(5.31) \quad \tilde{H}(x_a) \xi_i = \lambda_i \xi_i.$$

Typistysparametrillä $\tau_{loc} > 0$ lokaali LIS saadaan viritettyä vektoreilla $U_l = [u_1, \dots, u_l]$, missä $u_i = \mathcal{L}_{pr} \xi_i$ vastaa ensimmäistä l matriisin $\tilde{H}(x_a)$ ominaisarvoa, joille pätee $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_l \geq \tau_{loc}$.

Suuntaan u , jolle $\mathcal{R}(u; x_a) = 1$, uskottavuusfunktion ja priorin vaikutukset ovat tasapainossa. Tästä syystä typistysparametri τ_{loc} on syytä valita pienemmäksi kuin 1. Näin laskuihin saadaan varmemmin mukaan tarpeeksi laaja joukko uskottavuusfunktion informatiivisia suuntia.

Huomautus 5.1. Valkaistulle Hessen matriisille $\mathcal{L}_{pr}^T H(x) \mathcal{L}_{pr}$ pätee

$$(5.32) \quad \begin{aligned} \mathcal{L}_{pr}^T H(x) \mathcal{L}_{pr} &= \mathcal{L}_{pr}^T J(x)^T \Sigma_{obs}^{-1} J(x) \mathcal{L}_{pr}^T \\ &= (\mathcal{L}_{obs}^{-T} J(x) \mathcal{L}_{pr})^T (\mathcal{L}_{obs}^{-T} J(x) \mathcal{L}_{pr}) \\ &= \tilde{J}^T(x) \tilde{J}(x). \end{aligned}$$

Tässä matriisin $\tilde{H}(x)$ ykköstä pienemmät ominaisarvot vastaavat siis luvussa 4 käsitellyjä linearisoidun operaattorin $\tilde{J}(x)$ ykköstä pienempiä singulaariarvoja eli täsmälleen mittauksen informatiivisia suuntia.

Jotta pisteittäisestä ehdosta 5.30 saataisiin globaali ehto uskottavuusfunktion dominiinien suuntien karakterisointiin, tarkastellaan Rayleigh-suhdeluvun odotusarvoa posteriorin yli:

$$(5.33) \quad \mathbb{E}[\mathcal{R}(u; x)] = \mathbb{E}[\tilde{\mathcal{R}}(\xi; x)] = \frac{\xi^T S \xi}{\xi^T \xi},$$

missä S on matriisin \tilde{H} odotusarvo posteriorin yli:

$$(5.34) \quad S = \int_{\mathbb{X}} \mathcal{L}_{pr}^T H(x) \mathcal{L}_{pr} \pi(x|y) dx.$$

Analogisesti lineaarisen tapauksen kanssa saadaan globaali LIS rakennettua, kun tiedetään S :n ominaisarvohajotelma. Laskennallisia sovelluksia varten määritellään S :n Monte Carlo estimaattori

$$(5.35) \quad \tilde{S}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathcal{L}_{pr}^T H(x^{(k)}) \mathcal{L}_{pr},$$

missä $x^{(k)} \sim \pi(x|y)$, $k = 1, \dots, n$ ovat posteriorista saatuja satunnaismuuttujan x otoksia. Käytetään ongelmassa 1 ratkaistua matalaulotteista Hessen matriisin approksimaatiota. Näin globaali LIS saadaan rakennettua seuraavasti:

Ongelma 2 (Globaalin LIS-avaruuden rakentaminen). *Oletetaan annetuksi joukko posteriorin otoksia $\chi = \{x^{(k)}\}$, $k = 1, \dots, m$, missä jokaiselle reaalisatiolle $x^{(k)}$ matriisi \tilde{H} on approksimoitu ongelman 1 ratkaisuna saatavalla typistetyllä matalan asteen ominaisarvohajotelmalla*

$$(5.36) \quad \mathcal{L}_{pr}^T H(x^{(k)}) \mathcal{L}_{pr} \approx \sum_{i=1}^{l(k)} \lambda_i^{(k)} \xi_i^{(k)} \xi_i^{(k)T}.$$

Nyt pätee $\lambda_i^{(k)} \geq \tau_{loc} > 0$ kaikille $k = 1, \dots, m$ ja $i = 1, \dots, l(k)$. Globaalin LISin rakentamiseksi tarkastellaan Hessen matriisin odotusarvon Monte Carlo -estimaattoria, joka saa muodon

$$(5.37) \quad \left(\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^{l(k)} \lambda_i^{(k)} \xi_i^{(k)} \xi_i^{(k)T} \right) \psi_j = \gamma_j \psi_j.$$

Globaalilla LIS-avaruudella on näin ei-ortogonaalinen kanta $\Phi_r = \mathcal{L}_{pr} \Psi_r$, missä ominaisvektorit $\Psi_r = [\psi_1, \dots, \psi_r]$ vastaavat ensimmäisiä yhtälön 5.37 ominaisarvoja $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_r \geq \tau_g$ jollekin typistysparametrille $\tau_g > 0$. Tässä tapauksessa valitaan $\tau_g = \tau_{loc}$.

5.4 Posteriorin approksimointi

Optimaalinen r -ulotteisen projektion sekä sitä vastaava informatiivinen aliavaruus \mathbb{X}_r mahdollistavat inversio-ongelman vastauksena saadun posteriorijakauman r -ulotteisen approksimaation. LISin voidaan ajatella olevan upotettuna tila-avaruuteen \mathbb{R}^n , tai sitä voidaan käsitellä kantavektorien u_i virittämänä r -ulotteisena aliavaruutena, jonka kannalle

saadaan luonnollisesti r reaalitylukua kannan kerroinvektoriksi $x_r \in \mathbb{R}^r$. Kutsumme tätä vektoria jatkossa *LIS-parametriksi* ja määrittelemme projektion, jolla se saadaan kuvattua tila-avaruuteen \mathbb{R}^n . Näin pääsemme tila-avaruuden jakoon mittauksen kannalta informatiiviseen ja epäinformatiiviseen osaan, mikä taas toimii pohjana numeeriselle dimensioreduktioalgoritmille johdannon esimerkin inversio-ongelman ratkaisemiseksi.

Projisoimalla uskottavuusfunktio LIS-avaruuteen saadaan posteriorin approksimaatio

$$(5.38) \quad \tilde{\pi}_{post}(x|y) \propto \pi_{obs}(y|P_r x) \pi_{pr}(x),$$

missä P_r on lauseessa (5.3) määritelty muuttujan $x \in \mathbb{R}^n$ optimaalinen projektio globaaliin LIS-avaruuteen. Tämä projisointi johtaa tila-avaruuden luonnolliseen jakoon $\mathbb{R}^n = \mathbb{X}_r \times \mathbb{X}_\perp$, missä kuvauksen P_r maalijoukko \mathbb{X}_r on LIS, ja kuvauksen $(\mathbf{1} - P_r)$ maalijoukko \mathbb{X}_\perp on *komplementtialiavaruus* (complement subspace, CS). Tästä saadaan edelleen priorijakauman faktorointi kahden todennäköisyysjakauman tuloksi: toinen määriteltynä pienuotteisessa LIS-avaruudessa ja toinen tämän komplementtiavaruudessa. Tämän jaon johdattelemalla kehitetään seuraavaksi dimensioreduktiostrategia.

Määritelmä 5.6. Määritellään projektiot Π_r ja $\mathbf{1} - \Pi_r$ sekä niitä vastaava parametrihajotelma seuraavasti:

(i) Oletetaan, että ongelman 2 ratkaisuna saatu LIS-avaruuden kanta on $\Phi_r = \mathcal{L}_{pr} \Psi_r$, missä Ψ_r on lisäksi ortonormaali. Määritellään matriisi $\Theta_r = \mathcal{L}_{pr}^{-T} \Psi_r$ jolle pätee $\Theta_r^T \Phi_r = \Psi_r^T \mathcal{L}_{pr}^{-1} \mathcal{L}_{pr} \Psi_r = \mathbf{1}_r$. Tällöin projektiot Π_r on muotoa

$$(5.39) \quad \Pi_r = \Phi_r \Theta_r^T.$$

Valitaan Ψ_\perp siten, että $[\Psi_r \ \Psi_\perp]$ muodostaa täydellisen ortonormaalien systeemin \mathbb{R}^n :ssä. Nyt projektiot $\mathbf{1} - \Pi_r$ voidaan kirjoittaa

$$(5.40) \quad \mathbf{1} - \Pi_r = \Phi_\perp \Theta_\perp^T,$$

missä $\Phi_\perp = \mathcal{L}_{pr} \Psi_\perp$ ja $\Theta_\perp = \mathcal{L}_{pr}^{-T} \Psi_\perp$.

(ii) Parametri x voidaan nyt luonnollisesti hajottaa

$$(5.41) \quad x = \Pi_r x + (\mathbf{1} - \Pi_r)x,$$

missä jokainen projektiot voidaan esittää vastaavien kantavektorien lineaarikombinaationa.

Määritelmä 5.7 (LIS- ja CS-parametrit.). Tarkastellaan n -ulotteisen tila-avaruuden \mathbb{X} ortonormaalina kantaa $\Psi = [\Psi_r \ \Psi_\perp]$. Määritellään tämän kannan ja priorikovarianssin Cholesky-hajotelman $\mathcal{L}_{pr} \mathcal{L}_{pr}^T$ avulla tuntemattoman $x \in \mathbb{R}^n$ esitys

$$(5.42) \quad \begin{aligned} x &= \mathcal{L}_{pr} \Psi \check{x} = \Phi \check{x} = [\Phi_r \ \Phi_\perp] \begin{bmatrix} x_r \\ x_\perp \end{bmatrix} \\ \check{x} &= \Psi^T \mathcal{L}_{pr}^{-1} x = \Theta^T x = [\Theta_r \ \Theta_\perp]^T x, \end{aligned}$$

missä $\check{x} = \begin{bmatrix} x_r \\ x_\perp \end{bmatrix}$, LIS-parametri $x_r \in \mathbb{R}^r$, CS-parametri $x_\perp \in \mathbb{R}^{n-r}$, $\Phi = [\Phi_r \ \Phi_\perp]$, $\Phi_r: \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^n$ kuvaa LIS-parametrin tila-avaruuteen, $\Phi_\perp: \mathbb{R}^{n-r} \rightarrow \mathbb{R}^n$ kuvaa CS-parametrin tila-avaruuteen ja $\Theta^T: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^{n-r}$, $\Theta^T x \rightarrow \check{x}$ antaa tuntemattoman x esityksen LIS- ja CS-parametreina.

Lemma 5.3. *Merkitään edellisten määritelmien perusteella $x = \Phi_r x_r + \Phi_\perp x_\perp$. Nyt gaussinen priorijakauma voidaan hajottaa tuloksi*

$$(5.43) \quad \pi_{pr}(x) = \tilde{\pi}_r(x_r) \tilde{\pi}_\perp(x_\perp),$$

missä $\tilde{\pi}_r = \mathcal{N}(x_{0r}, \mathbf{1}_r)$ ja $\tilde{\pi}_\perp = \mathcal{N}(x_{0\perp}, \mathbf{1}_\perp)$.

Todistus. Katso liite (6.4). □

Seuraamalla lemmaa 5.3 voidaan myös uskottavuusfunktio kirjoittaa muodossa

$$(5.44) \quad \begin{aligned} \pi(y|x) &= \pi(y|\Phi_r x_r + \Phi_\perp x_\perp) \\ &= \pi(y|\Phi_r x_r) \pi(y|\Phi_\perp x_\perp). \end{aligned}$$

Optimaalisen projektion määritelmästä (5.6) saadaan, että CS-parametri x_\perp ja mitattu data y ovat lähes riippumattomia toisistaan, minkä johdosta voidaankin tehdä perusteltu approksimaatio

$$(5.45) \quad \pi(y|\Phi_r x_r) \pi(y|\Phi_\perp x_\perp) \approx \pi(y|\Phi_r x_r).$$

Näin saadaan eksplisiittinen kaava optimaalisen projektion määrittämälle posteriorin approksimaatiolle:

$$(5.46) \quad \begin{aligned} \pi(x|y) &= \pi(y|x) \pi_{pr}(x) \\ &= \pi(y|\Phi_r x_r) \pi(y|\Phi_\perp x_\perp) \tilde{\pi}_r(x_r) \tilde{\pi}_\perp(x_\perp) \\ &\approx \tilde{\pi}_r(x_r|y) \tilde{\pi}_\perp(x_\perp), \end{aligned}$$

missä $\tilde{\pi}_r(x_r|y) = \pi(y|\Phi_r x_r) \tilde{\pi}_r(x_r)$. Näin ollen Monte Carlo-estimoinnissa täytyy poimia otoksia vain pieniulotteisesta jakaumasta $\tilde{\pi}(x_r)$, sillä gaussisen komplementtipriorin jakauman $\pi_\perp(x_\perp)$ ominaisuudet tiedetään analyttisesti. Näin ollen yhdistämällä otokset redusoidusta posteriorista sekä redusoidusta priorista saadaan approksimoidusti täydestä posteriorista nostettu otos. Redusoidulle posteriorille saadan redusoidut odotusarvo ja kovarianssi

$$(5.47) \quad \mathbb{E}_{\tilde{\pi}}[x] = \Phi_r \tilde{x}_{0r} + (\mathbf{1} - \Pi_r) x_0$$

$$\begin{aligned}
(5.48) \quad \text{Cov}_{\tilde{\pi}}[\mathbf{x}] &= \Phi_r \tilde{\Sigma}_r \Phi_r^T + \Pi_{\perp} \Sigma_{pr} \Pi_{\perp}^T \\
&= \Sigma_{pr} + \Phi_r \left(\tilde{\Sigma}_r - \mathbf{1}_r \right) \Phi_r^T,
\end{aligned}$$

missä \tilde{x}_{0r} ja $\tilde{\Sigma}_r$ ovat kokeellisesti esim. MCMC:llä saadut odotusarvo ja varianssi LIS-parametrille x_r .

Käytettäessä MCMC-menetelmiä posterioritodennäköisyyden kartoittamiseen poimitaan otokset ongelman alkuperäiseen dimensioon nähden pieniulotteisesta LIS-avaruudesta. Koska CS-avaruudessa oleva osa jakaumasta evaluoidaan analyttisesti, saadaan LIS-menetelmää käyttäen MCMC-poimijalle pienempi Monte Carlo -virhe, kuin täydestä jakaumasta poimittaessa. Aihetta on käsitelty tarkemmin artikkelissa [5] käyttäen Rao-Blackwell -periaatetta. Pienemmän varianssin lisäksi aliavaruudessa toteutettu MCMC tarjoaa huomattavia laskennallisia etuja. Pienempiulotteisesta LISistä poimittaessa on otosten tallentamiseen vaadittu tila paljon pienempi kuin täysiulotteisen posteriorin tapauksessa. Lisäksi esimerkiksi priorin kovarianssimatriisin neliöjuurta käyttävät menetelmät saadaan huomattavasti nopeammiksi alempiulotteisella redusoidulla priorilla $\pi_r(x_r)$.

Luku 6

Laskennalliset sovellukset

6.1 Johdannon esimerkki

Palautetaan mieleen johdannossa esitelty Lambert-Beer -lain diskreetointi

$$(6.1) \quad I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp \left(- \sum_i^N C_i(\lambda) \rho_i l \right)$$

sekä siitä johdettu laskennallinen malli

$$(6.2) \quad I(\lambda) = \exp(-Ax).$$

Tämän tutkielman esimerkkitapauksessa käytämme, kuten johdannossa, simuloitua pysyprofiilia. Teemme sen yksinkertaisesti evaluoimalla funktion $z(x) := 3 + x + x \sin(x)$ n :ssä tasaisin välein sijaitsevassa pisteessä välillä $[0, 3\pi]$. Kohinainen mittausta saadaan simuloitua asettamalla

$$(6.3) \quad y = \exp(-Az) + \varepsilon,$$

missä $y \in \mathbb{R}^m$, $\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ on gaussisesti kovarianssilla $\text{diag}(\sigma_{obs})$ jakautunutta 0-keskeistä additiivista kohinaa sekä $m = 4400$.

Käytetään tilan x priorina gaussista siloittavaa eli *smoothing*-prioria, jonka kovarianssimatriisi määritellään

$$(6.4) \quad \Sigma_{pr}(i, j) = \theta \exp \left(- \frac{(x_i - x_j)^2}{2l} \right), \quad i, j \in \{1, \dots, n\},$$

missä θ on varianssiparametri ja l korrelaatiopituus. Priorin odotusarvona käytetään profiilia $x_0 = 3 + x + \frac{\pi}{5} \sin(x)$, mikä kuvastaa tilannetta, jossa profiilin muoto eri ilmakehän kerroksissa tiedetään periaatteessa, mutta skaalaus saadaan mittauksista.

Koska sekä priori että kohina ovat normaalijakautuneita, voidaan edellisten lukujen teoriaa käyttäen kohdan (3.42) perusteella ratkaista posteriorijakauman odotusarvo selvittämällä MAP-estimaatti. Tähän voidaan käyttää johdannon LevMar-algoritmia, mutta regularisoidaan tällä kertaa ongelma lisäämällä residuaaliin ja jacobiaaniin prioritietoa. Tämä käy asettamalla

$$\begin{aligned}
R_{obs}(x) &= (y - \exp(-Ax))/\sigma_{obs}, \\
R_{pr}(x) &= \mathcal{L}_{pr}^{-1}(x - x_0), \\
J_{obs}(x) &= -A \exp(-Ax)/\sigma_{obs}, \\
J_{pr}(x) &= \mathcal{L}_{pr}^{-1}
\end{aligned}
\tag{6.5}$$

ja minimoimalla johdannossa esitelty neliösumman lauseke 1.6 käyttämällä residuaalina R ja jacobiaanina J matriiseja

$$\begin{aligned}
R(x) &= [R_{obs} R_{pr}]^T \\
J(x) &= [J_{obs} J_{pr}]^T.
\end{aligned}
\tag{6.6}$$

Marko Laineen Matlab-toolbox [4] sisältää LevMar -algoritmin implementaation, joka palauttaa edellisillä alkuarvoilla posteriorille arvioidut MAP-estimaatin $\mathbb{E}_{LM}[x]$ sekä kovarianssin $\text{Cov}_{LM}(x)$. Ohjelman avulla voidaan myös vaivattomasti tutkia posteriorijakautumaa MCMC-algoritmilla antamalla sille parametrina gaussisesti jakautuneiden posteriorin sakkofunktion uskottavuusfunktion ja priorin osat. Edellisten lukujen perusteella voidaan nämä kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned}
f_{obs}(x) &= (y - \exp(-Ax))^T \Sigma_{obs}^{-1} (y - \exp(-Ax)) \\
g_{pr}(x) &= (x - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (x - x_0).
\end{aligned}
\tag{6.7}$$

Metropolis-Hastings -algoritmiin perustuva työkalu voidaan myös alustaa aloittamaan poiminta käyttämällä alkuarvauksena LevMar-algoritmilla saatua odotusarvoa $x_1 = \mathbb{E}_{LM}[x]$ sekä ehdotuskovarianssilla $q(x) = \text{Cov}_{LM}(x)$, jolloin ketjun suppeneminen nopeutuu huomattavasti.

6.2 LISin rakentaminen

Kuten aikaisemmin olemme nähneet, vastaa ongelman valkaistu Hessen matriisi \tilde{H} operaattoria $\tilde{J}^T \tilde{J}$, missä \tilde{J} on saatu valkaisemalla suoran mallin linearisaatio J (katso (4.1)). Tässä tapauksessa \tilde{J} saadaan kertomalla edellä määriteltäjä jacobiaania priorin ja uskottavuusfunktion kovarianssien Cholesky-matriiseilla

$$\tilde{J} = \mathcal{L}_{obs}^{-T} J_{obs} \mathcal{L}_{pr}.
\tag{6.8}$$

Tällöin ongelman 1 LIS-kanta Φ_r saadaan muodostettua ominaisarvohajoittelman $\tilde{J}^T \tilde{J} = U^T \Lambda U$ diagonaalimatriisin Λ ykköstä suurempia ominaisarvoja vastaavista sarakkeista $U_{[1\dots r]}$. Edelleen voidaan ongelma 2 ratkaista approksimaatiolla arpomalla otoksia jakaumasta $\mathcal{N}(\mathbb{E}_{\text{LM}}[x], \text{Cov}_{\text{LM}}(x))$ ja käyttämällä tätä Monte-Carlo estimaattorin \tilde{S}_n ratkaisemiseksi.

Vaikka näin saadaan LevMar- ja MCMC -algoritmeille pienempiuloitteinen muuttuja, mallit 6.5 ja 6.7 evaluoitava täydessä avaruudessa. LIS-parametri x_r täytyy siis jokaisella iteraatiolla projisoida takaisin täyteen avaruuteen, jolloin esimerkiksi malli 6.7 evaluoidaan muodossa

$$(6.9) \quad \begin{aligned} f_{\text{LIS}} &= (y - \exp(-A\Phi_r x_r))^T \Sigma_{\text{obs}}^{-1} (y - \exp(-A\Phi_r x_r)) \\ g_{\text{LIS}} &= (x_r - \Theta_r^T x_0)^T \mathbf{1}_r (x_r - \Theta_r^T x_0), \end{aligned}$$

missä redusoitu prior g_{LIS} on muodostettu lemmän 5.3 nojalla. MCMC -poimijalla saadaan näin LIS-avaruudesta otos parametrilla x_r , josta kaavojen 5.47 ja 5.48 avulla saadaan laskettua täydessä avaruudessa validi posterioirin approksimaatio $\tilde{\pi}(x|y) \sim \mathcal{N}(\mathbb{E}_{\tilde{\pi}}[x], \text{Cov}_{\tilde{\pi}}[x])$.

6.3 Tulokset

Täydessä avaruudessa lasketut $\mathbb{E}_{\text{LM}}[x]$ sekä MCMC:llä saadut ratkaisut näkyvät kuvassa 6.3. Ongelma on tässä ratkaistu parametreilla $\sigma_{\text{obs}} = 0,01$, $\theta = 0,01$, $n = 50$, $l = 1$ sekä $N_{\text{M}} = 200000$ MCMC-ketjun pituutena.

Ongelmien 1 ja 2 ratkaisuun vaadittava jakobiaani laskettiin edellisessä osuudessa kuvatulla Laplace-approksimaatiolla käyttäen 10000 otosta. Ratkaisuna saadun LIS-kannan dimensioksi saatiin 9, kun mukaan otettiin vielä yksi ominaisarvo ykköstä suurempien lisäksi. Algoritmien nopeuden vertailuksi käytetään seuraavaa suuretta:

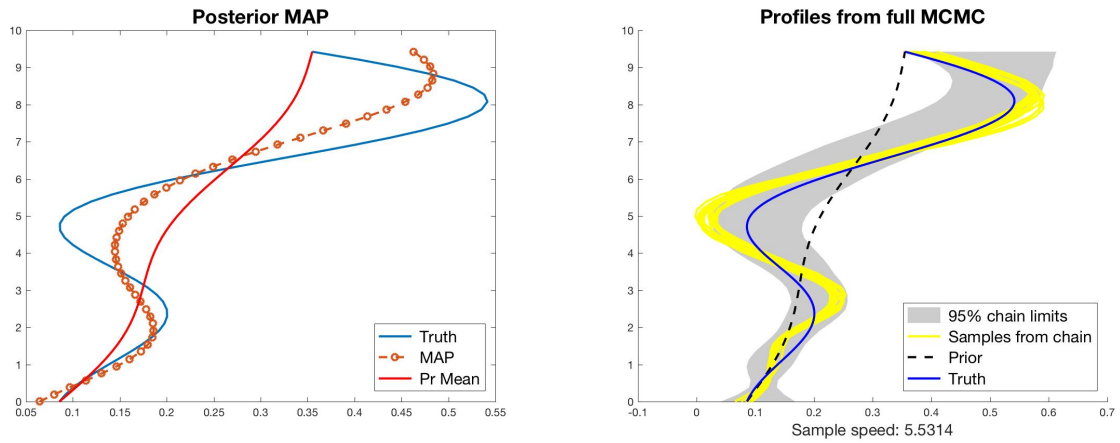
Määritelmä 6.1. MCMC-ketjun *efektiivinen otoksen koko* N_{eff} saadaan laskettua

$$(6.10) \quad N_{\text{eff}} = \frac{N_{\text{M}}}{\frac{1}{N_{\text{M}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{M}}} \tilde{\tau}_i},$$

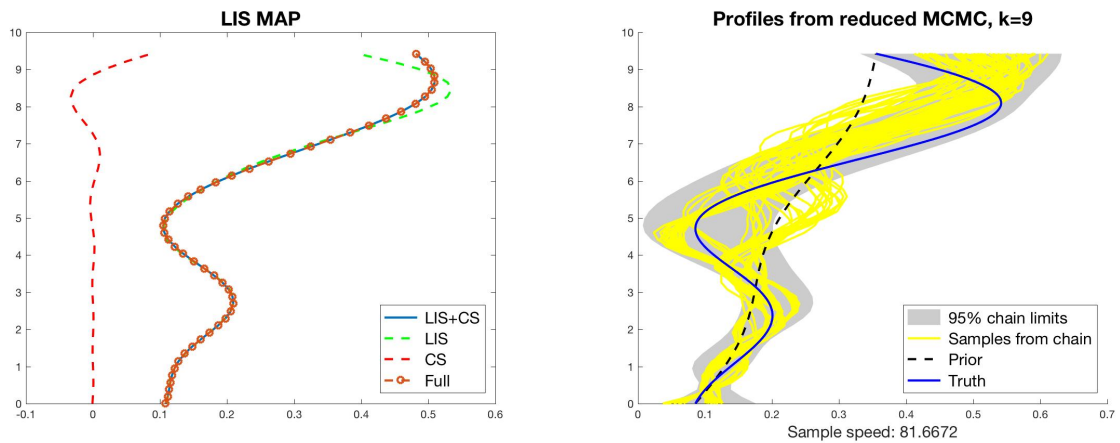
missä N_{M} on MCMC-ketjun pituus ja $\tilde{\tau}_i$ on *Sokalin adaptiivinen typistetty periodogrammiestimaattori* (katso esim. [10]). Määritellään MCMC-ketjun *otosnopeus*:

$$(6.11) \quad \mathbb{V} = \frac{N_{\text{eff}}}{t_{\text{M}}},$$

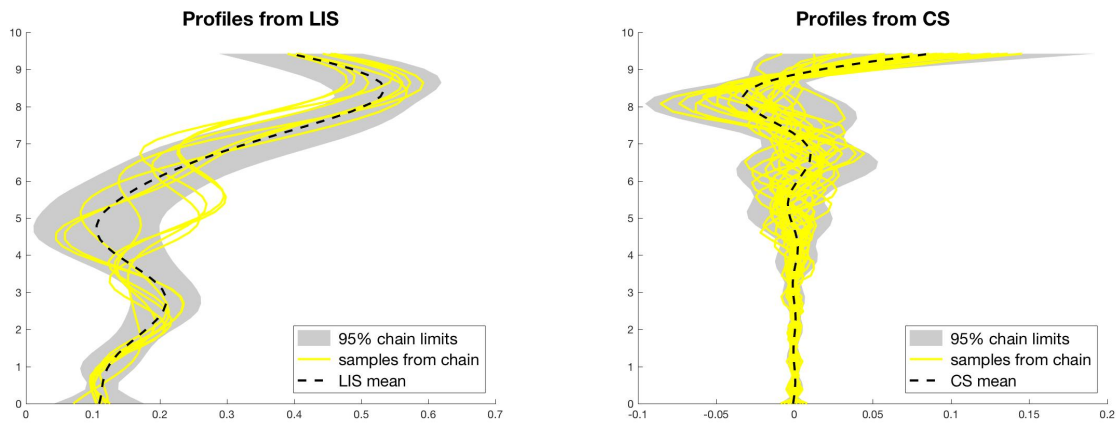
missä t_{M} on MCMC-ketjun laskemiseen käytetty aika.



Kuva 6.1: Vasemmalla: simuloitu profiili, priorin keskiarvo sekä LevMar-algoritmilla ratkaistu x_{MAP} . Oikealla: MCMC:llä saatu 95% luottamusväli sekä joukko posteriorin otoksia.



Kuva 6.2: Vasemmalla: LIS:stä sekä CS:stä poimitut ja lähtöavaruuteen takaisin projisoidut MAP-estimaatit sekä niiden summa täyteen avaruuteen verrattuna. Oikealla: MCMC:llä LIS:stä saatu 95% luottamusväli sekä joukko redusoidun posteriorin otoksia.



Kuva 6.3: Vasemmalla: redusoidusta posteriorista MCMC:llä poimittu otos projisoituna takaisin lähtöavaruuteen. Oikealla: CS:stä poimittu otos.

Taulukko 6.1: Otosnopeuksia käyttäen täyttää avaruutta sekä LISiä ilmakehän diskretoinneilla 50, 75, ja 100 kerrokseen.

	$n = 50$		$n = 75$		$n = 100$	
	\mathbb{V}	\mathbb{V}_{LIS}	\mathbb{V}	\mathbb{V}_{LIS}	\mathbb{V}	\mathbb{V}_{LIS}
Ajo 1	5,2	79,4	7,7	49,9	4,1	36,5
Ajo 2	5,5	91,0	7,8	45,9	6,6	34,3
Ajo 3	4,8	69,0	6,2	44,1	6,7	34,8

Kuvista 6.3 ja 6.3 nähdään täydessä avaruudessa sekä LIS:ssä lasketut MAP-estimaatit ja MCMC-ketjulla poimitut odotusarvo sekä 95% virherajat. Vastaavasti täydelle avaruudelle saadaan $\mathbb{V} = 5,2$ sekä LIS:lle $\mathbb{V} = 79,4$.

6.4 Yhteenveto ja jatkokehitysideoita

Taulukosta 6.3 nähdään LIS-dimensioreduktion nopeuttavan MCMC:n laskentaa ongelman dimensiosta riippuen jopa yli 10-kertaiseksi. Tässä tutkielmassa ratkaistu yksinkertainen versio FTIR -mittauksen inversiosta on helppo ja erittäin nopea ratkaista tilastollisen inversion periaatteella käyttäen LevMar -algoritmia tai jotain vaihtoehtoisia optimointimenetelmää, joten vaikka MCMC:tä ei tässä välttämättä tarvittaisi ongelman ratkaisuuon, toimii tämä tapaus erittäin lupaavana esimerkkinä dimensioreduktiostrategian varmentamiseksi. Tulosten pohjalta saavutettu nopeushyöty näyttäisi pienentyvän ilmakehän diskretisoinnin tihentyessä, mutta tämän huomion varmentaminen vaatisi jatkotutkimusta.

Tämän tutkielman tuloksia on tarkoitus käyttää oikean FTIR-mittauksen kääntämiseen käyttäen Simo Tukiaisen kehittämää SWIRLAB-työkalua Matlabille [13] ja ohjelmalla siihen vaihtoehto käyttää LIS-menetelmää datan kääntämiseen. SWIRLABissa käytettävä suora malli vaatii funktion parametrin muodossa, joka on lähellä priorin keskiarvoa. Tässä työssä käytetty sakkofunktion muoto $(y - f(\Phi_r x_r))$ antaa alustavien testien perusteella virheellisiä tuloksia. Laskennallisten kokeilujen perusteella nähtiin, että jos MCMC:n käyttämät funktiot 6.9 kirjoitetaan LIS-avaruudesta poimittaessa muodossa

$$(6.12) \quad \pi(y|\Phi_r x_r) = \pi(y - f(\Phi_r x_r + x_0)), \quad x_r \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1}_r),$$

päädytään poiminnan jälkeen samaan tulokseen posteriorin odotusarvon ja kovarianssin suhteen ja samalla otosnopeudella kuin mitä aiemmin kuvatulla muotoilulla. Kaavojen yhtenevyyttä on tarkasteltu liitteissä.

LIS-aliavaruuden löytäminen ja rakentaminen perustuvat suoran mallin jakobiaanin evaluointiin. Artikkelissa [5] on tuloksien käsittelyn yhteydessä huomattu, ettei esitetty tapa LISin löytämiseksi välttämättä ole tarpeeksi hyvä lineaarinen approksimaatio kaikissa ongelmissa. Approksimaation tekemistä epälineaarisisessa tapauksessa kaavoilla 5.34 ja 5.35 tulisi tutkia tarkemmin sekä kehittää ja verrata vaihtoehtoisia tapoja sen tekemiseen. Monte Carlo -estimaattorin 5.35 laskeminen Laplace-approksimaatiolla on edelleen vain yksi vaihtoehto numeerisen arvon laskemiseksi. Julkaisussa [5] on esitetty yksi mahdollinen tapa nostaa tarvittu määrä posteriorin otoksia ongelman 2 ratkaisemiseksi adaptiivisella algoritmilla evaluoimatta koskaan täyttä posterioria. Kyseessä on ns. aliavaruus-MCMC -menetelmä, ja se on esitelty tarkemmin tutkielman liitteissä.

Algoritmin 1 implementaatio ja testaus olisi mahdollinen jatkotutkimuksen aihe. Toisaalta laskennallisesti kokeilemalla huomattiin myös, että tämän työn Jakobiaanin evaluointi ainoastaan pisteessä x_0 ja sen käyttäminen LISin rakentamiseen tuotti lähes saman tuloksen kuin Monte Carlo -estimaattorin 5.35 Laplace-approksimaatio. Tämä motivoisi algoritmin 1 testaamista ratkaisemalla ensimmäisessä askeleessa ongelma 2 MAP-estimaatin sijaan pisteessä x_0 . Näin säästyttäisiin kokonaan MAP-estimaatin laskemiselta.

Loppupuhe

Pro gradu -tutkielman tekeminen Ilmatieteen laitoksen IKA-ryhmässä oli antoisa ja opettavainen kokemus, ja haluankin kiittää kaikkia ryhmän jäseniä erinomaisesta työilmapiiristä. Erityiskiitos ohjaajilleni Samuli Siltaselle, jonka Bayesian Inversion -kurssi herätti mielenkiintoni ja innostukseni tilastollista inversiota kohtaan, Johanna Tammiselle erittäin rakentavasta palautteesta tutkielman kirjoitusvaiheessa, sekä Marko Laineelle suunnattomasta määrästä apua sekä ohjelmoinnin että tutkielman matematiikan ymmärtämisen kanssa. Suurkiitos myös Niklas Itäselle tutkielmani oikolukemisesta sekä perheelleni ja ystäväilleni, jotka ovat kestäneet käsittämättömiä höpinöitäni gradun kirjoitusprosessin aikana.

Liitteet

Lemman 5.3 todistus

Todistus. Gaussinen priorijakauma $\pi_{pr}(x) \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr})$, $x \in \mathbb{R}^n$, $\Sigma_{pr} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ voidaan oletusten perusteella kirjoittaa olevan muotoa $\exp(-\frac{1}{2}E)$, missä

$$(6.13) \quad \begin{aligned} E &= (x - x_0)^T \Sigma_{pr}^{-1} (x - x_0) \\ &= (\Phi_r(x_r - x_{0r}) + \Phi_{\perp}(x_{\perp} - x_{0\perp}))^T \Sigma_{pr}^{-1} (\Phi_r(x_r - x_{0r}) + \Phi_{\perp}(x_{\perp} - x_{0\perp})). \end{aligned}$$

Merkitään $\Phi_r(x_r - x_{0r}) = b^r$ ja $\Phi_{\perp}(x_{\perp} - x_{0\perp}) = b^{\perp}$. Nyt edellinen kohta voidaan kirjoittaa muodossa

$$(6.14) \quad \begin{aligned} E &= (b^r + b^{\perp})^T \Sigma_{pr}^{-1} (b^r + b^{\perp}) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ij}^{-1} (b^r + b^{\perp})_i (b^r + b^{\perp})_j \\ &= \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^r b_j^r + \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^r b_j^{\perp} + \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^{\perp} b_j^r + \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^{\perp} b_j^{\perp}, \end{aligned}$$

missä σ_{ij}^{-1} vastaavat matriisin Σ_{pr}^{-1} alkioita sekä $\sum_{ij} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n$. LIS:n ja CS:n ortogonaalisuudesta seuraa, että $b^r b^{\perp} = b^{\perp} b^r = 0$. Täten

$$(6.15) \quad \begin{aligned} E &= \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^r b_j^r + \sum_{ij} \sigma_{ij}^{-1} b_i^{\perp} b_j^{\perp} \\ &= (\Phi_r(x_r - x_{0r}))^T \Sigma_{pr}^{-1} (\Phi_r(x_r - x_{0r})) + (\Phi_{\perp}(x_{\perp} - x_{0\perp}))^T \Sigma_{pr}^{-1} (\Phi_{\perp}(x_{\perp} - x_{0\perp})). \end{aligned}$$

Tästä saadaan esitys $\pi_{pr}(x) = \pi_r(\Phi_r x_r) \pi_{\perp}(\Phi_{\perp} x_{\perp})$, missä $\pi_r \sim \mathcal{N}(\Phi_r x_{0r}, \Sigma_{pr})$ ja $\pi_{\perp} \sim \mathcal{N}(\Phi_{\perp} x_{0\perp}, \Sigma_{pr})$. Normaalijakauman ominaisuuksista (katso esim. [11]) seuraa edelleen, että

$$(6.16) \quad \pi_r(\Theta_r^T \Phi_r x_r) = \pi_r(x_r) \sim \mathcal{N}(\Theta_r^T \Phi_r x_{0r}, \Theta_r^T \Sigma_{pr} \Theta_r) = \mathcal{N}(x_{0r}, \mathbf{1}_r).$$

□

Kaavojen 6.9 ja 6.12 yhtenevyys

Merkitään julkaisussa [12] esitetyn priorireduktistrategian ja SWIRLAB-mallin [13] mukaisesti

$$(6.17) \quad x = x_0 + P_k \alpha,$$

missä $X \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{pr})$, $\Sigma_{pr} = PP^T$, $\alpha \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1})$ ja $P_k = [\sqrt{\lambda_1}u_1, \dots, \sqrt{\lambda_k}u_k]$, missä ensimmäiset k ominaisarvoa ja -vektoria on saatu singulaariarvohajotelmasta $\Sigma_{pr} = U\Lambda U^T$.

Merkitään $P_k \alpha := z$ ja hajotetaan $x = x_0 + z$ LIS- ja CS -osiksi:

$$(6.18) \quad \begin{aligned} x &= \Pi x + (\mathbf{1} - \Pi)x \\ &= \Pi(x_0 + z) + (\mathbf{1} - \Pi)(x_0 + z) \\ &= \Pi z + (\mathbf{1} - \Pi)z + \Pi x_0 + (\mathbf{1} - \Pi)x_0 \\ &= \Phi_r z_r + \Phi_\perp z_\perp + x_0. \end{aligned}$$

Parametrit z_r, z_\perp ja x_0 ovat satunnaismuuttujina määritelmän mukaan riippumattomia. Näin posteriorin tiheysfunktiolle saadaan

$$(6.19) \quad \begin{aligned} \pi(x|y) &\propto \pi(y|x)\pi_{pr}(x) \\ &= \pi(y|\Phi_r z_r + \Phi_\perp z_\perp + x_0)\pi_{pr}(\Phi_r z_r + \Phi_\perp z_\perp + x_0) \\ &= \pi(y|\Phi_r z_r + x_0)\pi(y|\Phi_\perp z_\perp)\pi_{pr}(\Phi_r z_r)\pi_{pr}(\Phi_\perp z_\perp + x_0) \\ &\approx \pi(y|\Phi_r z_r + x_0)\pi_{pr}(\Phi_r z_r)\pi_{pr}(\Phi_\perp z_\perp + x_0) \end{aligned}$$

Artikkelin [12] käsittelyn mukaan $z \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{pr})$, mistä seuraa suoraan, että $z_r \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1}_r)$, $z_\perp \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{1}_\perp)$. Näin ollen kaavat 6.9 ja 6.12 ovat yhteneviä, kunhan MCMC-poimijassa käytetään z_r :n priorijakaumana valkoista kohinaa. Ketjuun tulee täyteen avaruuteen projisoinnin jälkeen myös lisätä priorin keskiarvo x_0 sekä otos CS:n jakaumasta $\mathcal{N}(0, \mathbf{1}_\perp)$.

Vaihtoehtoinen LIS-algoritmi

Merkitään seuraavassa algoritmissa LISin dimensiota iteraatiolla k symbolilla $r(k)$.

Algoritmi 1 (Globaalin LISin rakentaminen aliavaruus-MCMC -menetelmällä). *Laske- taan ensin posteriorijakauman MAP-estimaatti $x_{MAP} \in \mathbb{X}$ Asetetaan alustava otosjoukko ongelmalle 2: $\chi = \{x_{MAP}\}$. Ratkaistaan ongelma 2 ja saadaan $\Psi_{r(1)}^{(1)}$, alustava LIS-kanta $\Phi_{r(1)}^{(1)}$ ja tämän vasen käänteismatriisi $\Theta_{r(1)}^{(1)}$. Alustetaan Markov-ketju aloitustilana LIS:iin*

projisoitu posteriorijakauman odotusarvo $\Theta_{r(1)}^{(1)T} x_{MAP}$. Jokaisella askeleella $k \geq 1$ toistetaan seuraavat toiminnot:

(i) **Aliketjun simulointi.** Simuloidaan $r(k)$ -uloitteista aliavaruus-MCMC -ketjua niin monta iteraatiota, ettei lopetustila θ korreloi enää aloitustilan kanssa. Projisoidaan θ takaisin tila-avaruuteen pisteeksi $\Phi_{r(k)}^{(k)}\theta$ ja liitetään se otosjoukkoon:

$$\chi^{(k+1)} = \chi^{(k)} \cup \left\{ \Phi_{r(k)}^{(k)}\theta \right\}.$$

(ii) **LISin rakentaminen.** Ratkaistaan ongelma 2 otosjoukolla $\chi^{(k+1)}$. Päivitetään LIS-kannaksi $\Phi_{r(k+1)}^{(k+1)}$ ja $\Theta_{r(k+1)}^{(k+1)}$. Asetetaan seuraavan aliketjun aloitustilaksi $\Theta_{r(k+1)}^{(k+1)T} \Phi_{r(k)}^{(k)}\theta$.

(iii) **Suppenemisen tarkastaminen.** Lopetetaan algoritmi jos Hessin matriisin maksimievaluatiomäärä saavutetaan, tai kun painotettu aliavaruusetäisyys saavuttaa tietyn alarajan. Muutoin asetetaan $k \leftarrow k+1$ ja palataan kohtaan (i).

Askeleessa (iii) käytetty suppenemisehto perustuu LIS-avaruuksien väliseen etäisyyteen. Tämä voidaan määritellä tavalla, joka rankaisee muutoksia dominoivissa suunnissa (suuret ominaisarvot γ) raskaammin kuin vähemmän informatiivisia suuntia (pienet γ). Määritellään kriteeri seuraavasti:

Määritelmä 6.2 (Painotettu aliavaruusetäisyys). Määritellään iteraatiolle k kanta-painokerroin-pari $\mathcal{Y}^{(k)} = \left\{ \Psi_{r(k)}^{(k)}, D^{(k)} \right\}$, missä $\Psi_{r(k)}^{(k)}$ on ongelman 2 vastauksena saatu ortonormaali LIS-kanta ja $D_{ij}^{(k)} = \delta_{ij}(\widehat{\gamma}_i^{(k)})^{\frac{1}{4}}$ on diagonaalimatriisi, joka koostuu normalisoiduista painokertoimista

$$(6.20) \quad \widehat{\gamma}_i^{(k)} = \frac{\gamma_i^{(k)}}{\sum_{j=1}^{r(k)} \gamma_j^{(k)}}, \quad j = 1, \dots, r(k)$$

jotka on laskettu ongelman 2 ominaisarvoista $\left\{ \gamma_1^{(k)}, \dots, \gamma_{r(k)}^{(k)} \right\}$ sekä δ_{ij} on *Kroeneckerin delta-funktionaali*. Kahdelle peräkkäiselle askeleelle k ja $k+1$ lasketaan *painotettu aliavaruusetäisyys*

$$(6.21) \quad \mathcal{D}(\mathcal{Y}^{(k)}, \mathcal{Y}^{(k+1)}) = \sqrt{1 - \left\| \left(\Psi_{r(k)}^{(k)} D^{(k)} \right)^T \left(\Psi_{r(k+1)}^{(k+1)}, D^{(k+1)} \right) \right\|^2}$$

Painotettu aliavaruusetäisyys ja sen sovellukset esimerkiksi kuvankäsittelyssä on esitelty laajemmin julkaisussa [7].

Tutkielmassa käytetyt merkinnät

$I(\lambda_i)$ Valon intensiteetti

λ_i	Aallonpituus
m	Tarkasteltavien aallonpituuksien lukumäärä
\mathcal{C}_j	Absorptiokerroin
ρ_j	Kaasun tiheys
l	Ilmakehän kerroksen korkeus
R	Residuaali
B	Absorptiokerroinmatriisi
C	Liukuva keskiarvomatriisi
n	Ilmakehän diskretisoinnin kerrosten lukumäärä
\mathcal{S}	Neliösummafunktionaali
J	Jakobiaani
γ_i	LevMar -algoritmin lopetusehto
$\mathbf{1}_r$	r -uloitteinen yksikkömatriisi
λ	Ominais- tai singulaariarvo
Λ	Diagonaalinen ominaisarvomatriisi
Σ	Kovarianssimatriisi
\mathbb{Y}	Data-avaruus
\mathbb{X}	Tila-avaruus
$\text{Dom}(F)$	Kuvauksen F lähtöjoukko
$\text{Ran}(F)$	Kuvauksen F maalijoukko
$\text{Ker}(F)$	Kuvauksen F ydin
$\text{Coker}(F)$	Kuvaukselle $F: A \rightarrow B$ joukko $B - \text{Ran}(F)$
ε	Kohina
$\ \cdot\ _{\mathbb{R}}$	Normi avaruudessa \mathbb{R}
R_α	Regularisointistrategia
T_α	Tikhonov-funktionaali
Δ	Gradientti
\mathcal{F}	σ -algebra
\mathbf{P}	Todennäköisyysmitta
$\pi(x)$	Todennäköisyyden tiheysfunktio
x_{MAP}	MAP-estimaatti
x_{CM}	Ehdollinen odotusarvo
$\mathbb{E}[x]$	Odotusarvo
$\text{Cov}[x]$	Kovarianssi
$\mathcal{N}(x_0, \Sigma)$	Normaalijakauma
\bar{x}	Posteriorin odotusarvo
x_0	Priorin odotusarvo
$Q(x, \cdot)$	MCMC:n ehdotusjakauma
q	Q :n tiheysfunktio

$\text{Rank}(A)$	Matriisin A aste
P	Projektio
$\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}$	Valkaisu
$\mathcal{L}\mathcal{L}^T$	Cholesky-hajotelma
σ	Keskihajonta
G	Kontribuutiomatriisi
\mathbb{A}	Keskiarvoistava ydin
d_{signal}	Vapausaste
$d_{\mathcal{H}}^2(P, Q)$	Todennäköisyysjakaumien P ja Q Hellinger-etäisyys
$d_{\mathcal{F}}^2(P, Q)$	Todennäköisyysjakaumien P ja Q Förstner-etäisyys
(A, B)	Yleistetty ominaisarvo-ongelma
$\eta(x)$	Sakkofunktio
\mathcal{M}_r	Joukko asteen r päivityksiä
\mathcal{R}	Rayleigh-suhdeluku
χ	Otosjono
S, \hat{S}	Hessen matriisin odotusarvo posteriorin yli
Π_r	Projektio LIS:iin
Ψ_r	LIS-kanta

Matlab-koodi

```

%% Likelihood-informed subspace (LIS) based dimension reduction
%
% Otto Lamminpaa Jan 2016

close all;clear all;
%%

% Paths for Marko Laine's MCMC toolbox and Methane cross sections
addpath /Users/lamminpa/Documents/MATLAB/otto/special_assignment
addpath /Users/lamminpa/Documents/MATLAB/otto/matlabtools/mcmcstat

% Options and parameters
m_len = 50; % number of atmospheric layers
d = 1; % figure number;
altind = 0; % 1 for using f(Px + x0) -approach
nsimu = 100000; % size of MCMC chain
meth = 'am'; % MCMC method; 'mh', 'am', or 'dram'
obs_sigma = 0.01; % error sigma, std: .01
th = 0.01; % prior covariance multiplier, std: .01
l = 1; % prior correlation length, std: 1

plotlims = [0 20 0.1 1];

vec = @(x) x(:);

% Create data
n_simu = 400;
x = linspace(0,3*pi,n_simu);
z = (3+x+x.*sin(x))./35; % scaling
z=z(:);

% Downsampling operator
m_points = floor(linspace(1,n_simu, m_len));
H = zeros(length(m_points),n_simu);
for ii = 1:length(m_points)

```

```

        H(ii,m_points(ii)) = 1;
    end

R = obs_sigma^2*eye(m_len);
Rinv = inv(R);

% Prior covariance matrix
C = NaN(n_simu);
for ii=1:n_simu
    for jj=ii:n_simu
        C(ii,jj)=th*exp(-(x(ii)-x(jj))^2/2/l);
        C(jj,ii)=C(ii,jj);
    end
end
C = C +eye(size(C))*1e-6; % add nugget
smallC = H*C*H';
Cinv = inv(smallC);
L = chol(smallC, 'lower'); % Cholesky factorization

% Prior mean
z_prior = (3+x+0.2*pi*sin(x))./35;

% More parameters
xmu = H*z_prior(:);
hx = H*x(:);
splt = floor(n_simu/m_len);

% Build the averaging operator
obs = zeros(m_len,n_simu);
for iii = 1:m_len
    if iii == 1
        obs(iii, 1:splt+1) = 1;
    elseif iii == m_len
        obs(iii, end-(splt+1):end) = 1;
    else
        obs(iii, splt*(iii-1)+1-splt:splt*(iii-1)+splt+1) = 1;
    end
end
A = 1/(splt*2+1)*obs;

% Load cross-sections
B=load('abs_coef.dat');

% Interpolate cross-sections
Bi = zeros(length(B(:,1)), n_simu);
for iii = 1:length(B(:,1))
    Bi(iii,:) = exp(interp1(log(1:50),log(B(iii,2:end)),log(linspace(1,50,n_simu))));
end
badgrid= floor(linspace(1,floor(n_simu/m_len)*m_len,m_len));
badcross = Bi(:,badgrid);
lambda = length(B(:,1));
R = obs_sigma^2*eye(lambda);
Rinv = inv(R);
K = A;
A=badcross*(A.*5e18); % 5e18 is a scaling factor

At=badcross*K;
%% Simulate measurement

m0 = exp(-A*z(:));
m1 = m0 + 0.01*obs_sigma*randn(size(m0));
m = m0 + obs_sigma*randn(size(m0));

figure(99)
plot(m);
%% Posterior MAP

% Build the scaled-down averaging operator
obs1 = zeros(m_len,m_len);
splt2 = floor(m_len/m_len);
for iii = 1:m_len
    if iii == 1
        obs1(iii, 1:splt2+1) = 1;
    elseif iii == m_len
        obs1(iii, end-(splt2+1):end) = 1;
    else
        obs1(iii, splt2*(iii-1)+1-splt2:splt2*(iii-1)+splt2+1) = 1;
    end
end
A1 = (1/(splt2*2+1))*obs1;

```

```

A1=badcross*(A1.*5e18); % Scaling for visuals

% Compute posterior MAP using Lev-Mar
prijaco = @(x) -inv(L);
prifun = @(x) (vec(x)-xmu);
prires = @(x) L\vec(prifun(x));

fun = @(x) exp(-A1*x(:)); % exp operator
jaco = @(x) bsxfun(@times,-A1,...
    exp(-A1*x(:)))/obs_sigma; % jacobian of exp

res = @(x) (m - fun(x))/(obs_sigma);

fullres = @(x) [res(x); prires(x)];
fulljaco = @(x) [jaco(x); prijaco(x)];

[MAP, cmat] = lsqlevmar(fullres, fulljaco, xmu);

% Plot MAP
figure(d);
clf;
plot(H*z(:),hx);
hold on;
plot(MAP,hx, 'o--');
plot(xmu(:),hx, 'r-');
title('Posterior MAP');
legend('Truth', 'MAP', 'Pr Mean');

%% MCMC for full posterior
clear 'model';
clear 'params';

% Data-misfit function
f = @(x) exp(-A1*x(:));

% Initialize MCMC
model.ssfun = @(x,data) (norm(data.m-f(x))^2)/data.obs_sigma^2;
model.priorfun = @(x,a,b) (x(:)-xmu)'*Cinv*(x(:)-xmu);
model.N = 1;
data = struct('m', m, 'obs_sigma', obs_sigma);
for iii=1:m_len
    params{iii} = {sprintf('f_%d',iii),MAP(iii), -inf, inf};
end
options.nsimu = nsimu;
options.method = meth;
options.qcov = cmat;

%% Launch MCMC
[results, chain] = mcmcrun(model, data, params, options);
save('chain.mat', 'results', 'chain');

%% Plot MCMC results
chain2 = chain(end/2:end,:);
pchain = plims(chain2,[0.025,0.975]);

a = mean(chain2);
a = a(:);
b = cmat;
bb = sqrt(diag(b));
c = x(m_points);

% size(eff) = n_simu/mean(tau) :: use iact(chain) to get tau
% def samplespeed = samples/sec; size(eff)/results.simutime
samplespeed = (results.nsimu/mean(iact(chain)))/results.simutime

figure(d+1);
clf;
plot(z,x,'g-',a,c,'b-',...
    z_prior,x,'c--',MAP,c,'m-',...
    a+2*bb,c,'r-',a-2*bb,c,'r-')
xlabel(['Chain length: ', num2str(options.nsimu), ', Rejected: ', num2str(results.rejected)])
title('Full Space MCMC');
legend('Truth', 'Full space CM', 'Prior mean');

figure(d+2); clf
hold on
hf = fillxx(hx,pchain(:,1),pchain(:,2),[0.8,0.8,0.8]);
hc = plot(chain2(end-50:end,:),hx,'-y');
for i=2:length(hc),hc(i).Annotation.LegendInformation.IconDisplayStyle='off';end

```



```

errorbar(MAP,hx,2*bb,'horizontal'); % get rid off legends
plot(xmu,hx,'k--') % prior
plot(z,x,'b-');
hold off
%ylim([-0.02,1.02])
title(sprintf('Profiles from full MCMC'))
xlabel(['Sample speed: ', num2str(samplespeed)]);
hl = legend('95% chain limits','Samples from chain',sprintf('Opt'),'Prior', 'Truth');

%% LIS construction

% Sample some points from prior with mu = MAP
kk = 10000;
jack = zeros(size(jaco(MAP)));
LL = chol(cmat, 'lower');
sample = LL*randn(length(MAP), kk)+repmat(MAP, 1, kk);

% Build Jacobian
for iii = 1:kk
    jack = jack+jaco(sample(:, iii));
end
jack = jack./kk;

LR = chol(R, 'lower');
whitejack = LR\jack*L;
[U,W] = eig(whitejack'*whitejack);
U = flip1r(U);
V = flip(diag(W));
trunc = find(sqrt(V)>1);
trunc = [trunc; trunc(end)+1];
lisdim = length(trunc);
lisbasis = L*U(:,trunc);
csbasis = L*U(:,trunc(end)+1:end);
theta = inv(L)*U(:,trunc);
cstheta = inv(L)*U(:,trunc(end)+1:end);
PI = lisbasis*theta';
I_PI = csbasis*cstheta';

%% LIS MAP

% Compute LIS MAP using Lev-Mar
fun_l = @(x) exp(-A1*x(:));
jaco_l = @(x) bsxfun(@times,-A1*lisbasis,...
    exp(-A1*lisbasis*x(:))/obs_sigma);

res_l = @(x) (m - fun_l(x))/(obs_sigma);
prires_l = @(x) L\vec(x)-xmu;
fullres_l = @(x) [res_l(lisbasis*x(:)); prires_l(lisbasis*x(:))];

prijaco_l = @(x) -L\lisbasis;
fulljaco_l = @(x) [jaco_l(x(:)); prijaco_l(lisbasis*x(:))];

[MAP_l, cmat_l] = lsqlevmar(fullres_l, fulljaco_l, theta'*xmu);

redMAP = lisbasis*MAP_l+csbasis*cstheta'*xmu;
redCOV = lisbasis*cmat_l*lisbasis'+I_PI*smallC*I_PI';

%% Plot LIS MAP
figure(d+3);
clf;
plot(redMAP,hx);
hold on;
plot(lisbasis*MAP_l, hx, 'g--');
plot(csbasis*cstheta'*xmu, hx, 'r--');
plot(MAP,hx, 'o--');
title('LIS MAP');
legend('LIS+CS','LIS','CS','Full');

%% LIS MCMC
clear 'model';
clear 'params';

% Data-misfit function
f = @(x) exp(-A1*x(:));

% Initialize MCMC
model.N = 1;
data = struct('m', m, 'obs_sigma', obs_sigma, 'P', lisbasis);
if altind == 1
    model.ssfun = @(x, data) (norm(data.m-f(data.P*x(:)+xmu))^2)/data.obs_sigma^2;

```

```

    for iii=1:lisdim
        params{iii} = {sprintf('f_%d',iii), 0, -inf, inf, 0, 1};
    end
else
    model.ssfun = @(x,data) (norm(data.m-f(data.P*x(:))^2)/data.obs_sigma^2;
    prmu = theta'*xmu;
    for iii=1:lisdim
        params{iii} = {sprintf('f_%d',iii), MAP_l(iii), -inf, inf, prmu(iii), 1};
    end
end
options.nsimu = nsimu;
options.method = meth;
options.qcov = cmat_1;

%% Launch MCMC
[results, chain] = memcrun(model, data, params, options);
save('lischain.mat', 'results', 'chain');

%% Transform back to full space

if altind == 1
    XX1 = chain*lisbasis';
    fullchain0 = chain*lisbasis' + xmu';
    fullchain = fullchain0 + randn(size(fullchain0,1),m_len-lisdim)*csbasis';
    XX2 = zeros(size(fullchain0)) + xmu'+randn(size(fullchain0,1),m_len-lisdim)*csbasis';
    XXX = fullchain;
    summean = mean(fullchain);
    lismean= mean(XX1);
    lismean = lismean(:);
    csmean= mean(XX2);
    csmean = csmean(:);
else
    % CS sample
    cssample = repmat((cstheta'*(xmu))',options.nsimu,1);
    cssample = cssample+randn(size(cssample));

    % Transform back to original space
    XX1 = chain*lisbasis';
    XX2 = cssample*csbasis';

    % Compute means
    lismean= mean(XX1);
    lismean = lismean(:);
    csmean= mean(XX2);
    csmean = csmean(:);

    % Full chain
    XXX = XX1+XX2;
    summean = lismean+csmean;
end

%% Plot it!
chain2 = chain(end/2:end,:);

bb = cov(chain2);
b = lisbasis*bb*lisbasis' + I_PI*smallC*I_PI';
b = redCOV;
xoptsdred = sqrt(diag(b));
c = x(m_points);
samplespeed = (results.nsimu/mean(iact(chain)))/results.simutime
pchain = plims(XXX,[0.025,0.975]);

figure(d+4);
clf;
plot(z,x,'g-',summean,c,'b-',...
     z_prior,x,'c-',...
     lisbasis*MAP_l+csbasis*cstheta'*xmu,c,'m-',...
     summean+2*xoptsdred,c,'r-',summean-2*xoptsdred,c,'r-')
xlabel(['Chain length: ', num2str(options.nsimu), ' Rejected: ', num2str(results.rejected)])
title('LIS MCMC');
legend('Truth','LIS CM','Prior Mean')

figure(d+5); clf
hold on
hf = fillxx(hx,pchain(:,1),pchain(:,2),[0.8,0.8,0.8]);
hc = plot(XXX(end-50:end,:),hx,'-y');
for i=2:length(hc),hc(i).Annotation.LegendInformation.IconDisplayStyle='off';end
errorbar(summean,hx,2*xoptsdred,'horizontal'); % get rid off legends
plot(xmu,hx,'k-') % prior
plot(z,x,'b-');

```

```

hold off
%ylim([-0.02,1.02])
title(sprintf('Profiles from reduced MCMC, k=%g',lisdim))
xlabel(['Sample speed: ', num2str(samplespeed)]);
hl = legend('95% chain limits ', 'samples from chain ', sprintf('opt, dim(LIS)=%g',lisdim), 'prior', 'truth');

%%
pchain = plims(XX1,[0.025,0.975]);
figure(d+6); clf
hold on
hf = fillxx(hx,pchain(:,1),pchain(:,2),[0.8,0.8,0.8]);
hc = plot(XX1(end-40:end,:),hx,'-y');
for i=2:length(hc),hc(i).Annotation.LegendInformation.IconDisplayStyle='off';end
plot(lismean,hx,'k--') % prior
hold off
title(sprintf('Profiles from LIS'))
hl = legend('95% chain limits ', 'samples from chain ', 'LIS mean');

pchain = plims(XX2,[0.025,0.975]);
figure(d+7); clf
hold on
hf = fillxx(hx,pchain(:,1),pchain(:,2),[0.8,0.8,0.8]);
hc = plot(XX2(end-25:end,:),hx,'-y');
for i=2:length(hc),hc(i).Annotation.LegendInformation.IconDisplayStyle='off';end
plot(csmean,hx,'k--') % prior
hold off
title(sprintf('Profiles from CS'))
hl = legend('95% chain limits ', 'samples from chain ', 'CS mean');

```

Kirjallisuutta

- [1] Mueller J. M., Siltanen S., *Linear and Non-Linear Inverse Problems with Practical Applications*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2012.
- [2] Kaipio J., Somersalo E., *Statistical and Computational Inverse Problems*, Springer Science+Business Media, Inc., 2005.
- [3] Rodgers C.D., *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000.
- [4] Laine M., *MCMC toolbox for Matlab*, Verkkosivusto/Matlab-toolbox, Ilmatieteen Laitos, 27.8.2013. Saatavilla: <http://helios.fmi.fi/lainema/mcmc/> .
- [5] Cui T., Martin J., Marzouk Y., Solonen A., Spantini A., *Likelihood-informed dimension reduction for nonlinear inverse problems*, *Inverse Problems*, 30 (2014), p 114015.
- [6] Spantini A., Solonen A., Cui T., Martin J., Tenorio L., Marzouk Y., *Optimal low-rank approximation of linear Bayesian inverse problems*, arXiv preprint arXiv:1407.3463, 2014.
- [7] Li F., Dai Q., Xu W., Er. G., *Weighted subspace distance and its applications to object recognition and retrieval with image sets*, *IEEE Signal Processing Letters*, 16(3):227-230, 2009.
- [8] Golub G., Van Loan C., *Matrix Computations*, The John Hopkins University Press, 1996.
- [9] Förstner W., Moonen B., *A metric for covariance matrices*, *Geodesy - The challenge of the 3rd Millenium*, Springer, 2003, pp. 299-309
- [10] Dey D. K., Rao C.R., *Handbook of Statistics: Bayesian Thinking, Modeling and Computation*, Gulf Professional Publishing, 2005
- [11] Huttunen J., *Random fields and spatial priors*, luentomoniste, UEF 2015

- [12] Tukiainen, S., Railo, J., Laine, M., Hakkarainen, J., Kivi, R., Heikkinen, P., Chen, H., Tamminen, J., *Retrieval of atmospheric CH₄ profiles from Fourier transform infrared data using dimension reduction and MCMC*, J. Geophys. Res. Atmos., 121, doi:10.1002/2015JD024657, 2016
- [13] Tukiainen, S., *Swirlab toolbox for Matlab*, Verkkosivusto/Matlab-toolbox, Ilmatieteen Laitos, 2017. Saatavilla: <https://github.com/tukiains/swirlab>
- [14] Gilks W. R., Richardson S., Spiegelhalter D. J., *Markov Chain Monte Carlo in Practice*, 1st edition. London: Chapman et Hall, 1996.
- [15] Tamminen J., *Adaptive Markov Chain Monte Carlo Algorithms with Geophysical Applications* Väitöskirja, Helsingin yliopisto, 2004. Saatavilla: <http://ethesis.helsinki.fi/julkaisut/mat/matem/vk/tamminen/>
- [16] Abadir K. M., Magnus J. R., *Matrix Algebra, vol. 1*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [17] Kallenberg O., *Foundations of modern probability*. New York: Springer, cop., 1997.
- [18] Kyrölä E., Sihvola E., Kotivuori Y., Tikka M., Tuomi T., *Inverse Theory for Occultation Measurements 1. Spectral Inversion*, Journal of Geophysical Research, Vol 98, 1993.
- [19] Press W., Teukolsky S., Vetterlig V., Flannery B., *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*, 3rd edition, Cambridge University Press, 2007.
- [20] Tylli H.-O., Astala K., Piironen P., *Funktionaalianalyysin peruskurssi*, luentomoniste, Helsingin Yliopisto, Matematiikan ja tilastotieteen laitos, 2010.