
TAMPEREEN YLIOPISTO
Pro gradu -tutkielma

Jesse Railo

**Laskennallisista inversio-ongelmista –
erityisesti tilastollinen lähestymistapa ja sen
soveltaminen ilmakehän kaukokartoituksessa**

Informaatiotieteiden yksikkö
Matematiikka
Toukokuu 2014

Tampereen yliopisto

Informaatiotieteiden yksikkö

RAILO, JESSE: Laskennallisista inversio-ongelmista – erityisesti tilastollinen lähestymistapa ja sen soveltaminen ilmakehän kaukokartoituksessa

Pro gradu -tutkielma, 80 s., 2 liites.

Matematiikka

Toukokuu 2014

Tiivistelmä

Tutkielmassa tutustutaan laskennallisten inversio-ongelmien teoriaan kirjallisuuden ja tieteellisten artikkelien perusteella. Laskennallisessa inversio-ongelmassa pyritään ratkaisemaan yhtälö

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

missä $F : A \rightarrow B$ on suora malli inversio-ongelmaan liittyvien avaruuksien A ja B välillä, $y \in B$ kohinallinen mittausta, $\varepsilon \in B$ epämääräinen virhe ja $x \in A$ tuntematon tila.

Ratkaisuun liittyvää epävarmuutta voidaan arvioida luonnollisella tavalla käyttäen todennäköisyysteoriaa, jolloin kaikki muuttujat esitetään Lebesguen mitan suhteen absoluuttisesti jatkuvina satunnaismuuttujina. Tällöin kirjoitamme

$$Y = F(X) + E, \quad \pi_{X,Y}(x, y),$$

missä $Y, E : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ ja $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ ovat satunnaisvektoreita. Kun on saatu mittausta $y \sim Y$, niin inversio-ongelman tilastollinen ratkaisu on tilan X posteriorijakauma

$$\pi(x|y) = \frac{\pi(y|x)\pi_X(x)}{\pi_Y(y)}, \quad \pi_Y(y) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(y|x)\pi_X(x)dx.$$

Tutkielmassa keskitytään erityisesti inversio-ongelman tilastolliseen ratkaisemiseen, kun suora malli F tunnetaan.

Tutkielman puhtaan matematiikan aiheet johdattelevat lukijan funktionaalianalyysiin sekä mitta- ja todennäköisyysteorioihin, mitkä luovat teoreettisen viitekehyksen inversio-ongelmien esittämiseen. Käytännön sovelluksissa rajoittuminen reaalianalyysiin ja matriisilaskentaan on kuitenkin usein riittävää. Yhtenä keskeisenä esimerkkinä käsittelemmekin lineaarisia inversio-ongelmia euklidisessa avaruudessa.

Epälineaaristen inversio-ongelmien ratkaisumenetelminä esittelemme differentiaalilaskentaan perustuvan Levenbergin-Marquardt- ja Markovin ketju Monte Carlo (MCMC) -menetelmiä, kuten Metropolisin-Hastingsin (MH) ja adaptiivisen Metropolisin (AM) algoritmit. Näytämme tutkielmassa lisäksi, miten dimension redusointimenetelmiä, kuten pääkomponenttianalyysia (PCA), voidaan soveltaa inversio-ongelman ratkaisemisessa.

Tutkielmassa esitellään kasvihuonekaasujen kaukokartoitusta laskennallisten inversio-ongelmien sovelluksena. Sovellukseen liittyviä simulaatioita ja kehitystyötä voidaan pitää tieteellisesti uutena tutkimuksena. Tutkielmaan liittyvä soveltava osuus on tehty Ilmatieteen laitoksella, Uudet havaintomentelmät -yksikön Ilmakehän kaukokartoitus -ryhmässä, vuosina 2013–2014.

Sisältö

Johdanto	1
1 Johdattelua inversio-ongelmiin	2
1.1 Esitietoja funktionaalianalyysistä	2
1.2 Lineaarista inversio-ongelmista	8
1.3 Regularisointimenetelmistä	10
1.4 Epälineaarista inversio-ongelmista ja numeerisesta optimoinnista	15
2 Mittateoreettisia esitietoja	20
2.1 Mittateorian perusteita	20
2.2 Dynkinin ja Carathéodoryn laajennuslauseet	25
2.3 Lebesguen-Stieltjesin mitta	28
2.4 Lebesguen osituslause ja Radonin-Nikodymin lause	31
3 Todennäköisyysteoriaa	36
3.1 Todennäköisyysjakaumat	36
3.2 Ehdollinen todennäköisyys	40
4 Tilastollinen inversio-ongelma	43
4.1 Bayesiläinen ratkaisu inversio-ongelmaan	43
4.2 Markovin ketju Monte Carlo -menetelmistä	50
4.3 Redusoidun priorin menetelmä	56
5 Sovellus: Kasvihuonekaasujen kaukokartoitus	60
5.1 Ilmakehän kaukokartoituksesta	60
5.2 Säteilyn kulkumallista ja inversio-ongelmasta	62
5.3 Laskennallisista ratkaisumenetelmistä	65
5.4 Simulointeja ja FTIR-datan inversioita	68
Loppupuhe	77
Viitteet	78
Liite A: Käytettyjä merkintöjä	81

Johdanto

Tutkielma johdattelee laskennallisten inversio-ongelmien teoriaan lähtien liikkeelle perusteista. Inversio-ongelmat ovat mielenkiintoinen ja tärkeä aihe, sillä käytetyille menetelmille on usein monia sovelluskohteita. Näin ollen inversio-ongelmat jatkavat matematiikan ja sovellusten hedelmällistä vuorovaikutusta, joka on ollut tärkeä osa matematiikan kehitystä aina läpi sen historian. Sovelluksena esittelemme ilmakehän kaukokartoitusta. Ilmakehän kaukokartoitus on yhteiskunnallisesti ja globaalisti merkittävä tutkimuskohde, sillä ilmakehästä saatava tarkka tieto luo tieteellistä pohjaa ilmastopäätöksille sekä vaikuttaa ihmisten mielipiteisiin.

Ratkaistava inversio-ongelma tulee usein fysiikasta tai jostakin teknisestä sovelluksesta, mutta niitä voidaan tutkia myös puhtaasta matemaattisesta mielenkiinnosta. Nimensä mukaisesti inversio-ongelmalla eli käänteisongelmalla tarkoitetaan suoran ongelman ratkaisemista käänteiseen suuntaan. ”*Kun derivaattafunktio tunnetaan, ratkaise alkupe-
räinen funktio*” on esimerkki yksinkertaisesta inversio-ongelmasta. Käytännössä inversio-ongelmiin päädytään silloin, kun tehdään epäsuoria mittauksia tai mittaukset ovat jollakin muulla tavalla rajallisia. Epäsuorassa mittauksessa saamme tietoa kiinnostuksen kohteesta jonkin välittäjän avulla, josta pyrimme päättelemään kohteen ominaisuuksia mittaushetkellä.

Tutkielman pääpaino on inversio-ongelmien tilastollisessa ratkaisemisessa, mutta esitämme kattavasti myös optimointiin ja regularisointiin perustuvia ratkaisumenetelmiä. Olemme käsitelleet esimerkkeissä johdonmukaisesti lineaarisia inversio-ongelmia euklidisessa avaruudessa, jolloin matriisilaskenta on keskeinen työkalu. Epälineaaristen inversio-ongelmien ratkaisumenetelminä olemme esitelleet Levenbergin-Marquardtin (LMA), Metropolisin-Hastingsin (MH) ja adaptiivisen Metropolisin (AM) algoritmit. Näistä ensimmäinen perustuu derivaattoihin ja lokaaliin optimointiin, kun taas jälkimmäiset hyödyntävät tilastollista lähestymistapaa.

Vaikka tutkielma on poikkitieteellinen, niin se on myös matemaattisesti laaja-alainen. Lukijan taustasta riippuen tutkielmasta voivat hyötyä ainakin matemaatikot, tilastotieteilijät ja fyysikot. Olemme esittäneet teorian matematiikalle uskollisesti, jolloin kaikki väitteet pyritään todistamaan tai antamaan todistukselle tarkka lähdeviittaus. Tärkeimmät algoritmit ja menetelmät esitellään luvuissa 1.4, 4.2 ja 4.3. Todennäköisyyslaskentaa ja tilastotiedettä käsitellään ainoastaan luvuissa 3 ja 4. Kaikki ilmakehän kaukokartoitukseen ja fysiikkaan liittyvä sisältö on luvussa 5.

Luvussa 5 sovellamme teoriaa kasvihuonekaasujen kaukokartoitukseen. Esittelemme lyhyesti fysikaalisen mallin, jonka jälkeen käymme läpi yleisimpiä tapoja ratkaista ilmenevä inversio-ongelma. Lopuksi vertailemme käyttämämme uuden menetelmän tuloksia standardimenetelmään. Tutkielmassa esitettäviä menetelmiä ei ole aiemmin sovellettu vastaavasti kasvihuonekaasujen kaukokartoituksessa. Lisäksi käytetty fysikaalinen malli ja siihen liittyvät inversio-algoritmit on ohjelmoitu Ilmatieteen laitoksella.

Lukijan oletetaan tuntevan ennalta topologiaa, matriisilaskentaa, vektorianalyysiä ja todennäköisyyslaskentaa. Mitään fysiikkaan tai laskennallisiin menetelmiin liittyviä esitietoja ei aseteta. Täydentävinä esitietoina tutkielma käsittelee funktionaalianalyysin perusteita, kuten metrisiä vektoriarvaruuksia. Tilastollisia inversio-ongelmia varten esittelemme kattavasti mitta- ja todennäköisyysteorioita. Keskeisimpiä matemaattisia tuloksia ovat Rieszin-Fréchet'n esityslause, Fubinin-Tonellin lause, Carathéodoryn laajennuslause, Lebesguen mitta, Lebesguen osituslause ja Radonin-Nikodymin lause. Esittelemme lähteitä varsinaisten lukujen ja tekstin yhteydessä.

1 Johdattelua inversio-ongelmiin

Tässä luvussa tarkoituksenamme on luoda kuva siitä, mitä inversio-ongelmalla yleisesti ottaen tarkoitetaan. Pyrimme esittämään teorian abstraktissa muodossa, jolloin erityisesti normi-, Banachin ja Hilbertin avaruuksien käsitteet ovat keskeisiä. Kuitenkin useissa käytännön sovelluksissa rajoittuminen reaalianalyysiin on täysin riittävää. Tarvittaessa esitietoja voi kerrata kirjasta *Real and Complex Analysis* [24, Rudin].

Aloitamme esityksen funktioanalyttisillä esivalmisteluilla, joiden jälkeen siirrymme inversio-ongelmien käsittelyyn. Useita inversio-ongelmien sovelluksia on käsitelty esimerkiksi kirjoissa *Statistical and Computational Inverse Problems* [11, Kaipio ja Somersalo] ja *Linear and Nonlinear Inverse Problems with Practical Applications* [18, Mueller ja Siltanen], joka paneutuu erityisesti impedanssitomografiaan.

1.1 Esitietoja funktionaalianalyysistä

Käsitlemme tässä alaluvussa lineaariavaruuksiin liittyviä funktionaalianalyttisiä käsitteitä ja tuloksia. Lukijan tulee tuntea ennalta joitakin funktionaalianalyysin perusteita, kuten käytettyjen struktuurien aksioomat ja perusominaisuudet. Sisätuloavaruuksien voivat olla joko kompleksisia tai reaalisia, vaikka esitämme todistukset vain kompleksisille tapauksille. Lukijan on kuitenkin syytä huomata, miten kauniisti kompleksiset määritelmät yleistävät reaalisia.

Määritelmä 1.1. Olkoot V ja U R -moduleita, missä R kerroinrenkas. Sanomme tällöin, että kuvaus $L : V \rightarrow U$ on *lineaarikuvaus*, jos kaikilla $x, y \in V$, $a, b \in R$ pätee

$$(1.1) \quad L(ax + by) = aL(x) + bL(y).$$

Määrittelemme, että $\text{Rank}(L) := \dim(\text{Im}(L))$ on lineaarikuvauksen L aste.

Kirjoitamme lineaarikuvauksien yhteydessä lyhyesti $Lx = L(x)$ (vrt. matriisilaskenta). Toisinaan lineaarikuvauksia kutsutaan *lineaarioperaattoreiksi*. Tässä tutkielmassa valitsemme käytännössä aina joko $R = \mathbb{C}$ tai $R = \mathbb{R}$, jolloin R -moduli on R -vektoriavaruus. Lisäksi pyrimme käyttämään vain termiä lineaarikuvaus, sillä useissa lähteissä puhutaan funktioista, operaattoreista ja funktionaaleista vaihtelevasti.

Määritelmä 1.2. Olkoon X metrisen avaruus, jonka metriikka on d . Sanomme, että $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ on *Cauchyn¹ jono*, jos on voimassa, että

$$(1.2) \quad \forall \varepsilon > 0 (\exists N \in \mathbb{Z}_+ : n, m > N \Rightarrow d(f_n, f_m) < \varepsilon).$$

Jos metrisen avaruuden X jokainen Cauchyn jono suppenee, niin kutsumme avaruutta X *täydelliseksi*.

Määritelmä 1.3. Olkoon V kompleksikertoiminen vektoriavaruus ja $\langle \cdot, \cdot \rangle : V^2 \rightarrow \mathbb{C}$ kuvaus. Tällöin pari $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ on *sisätuloavaruus*, jos jokaisella $x, y, z \in V$ ja mielivaltaisella skalaarilla $a \in \mathbb{C}$ pätee

$$S1) \quad \langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}, \text{ missä yläviiva viittaa kompleksikonjugaattiin,}$$

$$S2) \quad \langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle,$$

¹Augustin Cauchy (1789–1857) oli ranskalainen matemaatikko, joka oli yksi matemaattisen analyysin ensimmäisistä tutkijoista. Useat määritelmät ja tulokset kantavat hänen nimeään.

S3) $\langle ax, y \rangle = a\langle x, y \rangle,$

S4) $\langle x, x \rangle \geq 0,$ ja $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$

Lisäksi sanomme, että $\langle \cdot, \cdot \rangle$ on avaruuden H sisätulo.

Sisätuloavaruudessa X vektorin $x \in X$ normi määritellään asettamalla

$$(1.3) \quad \|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

Edelleen jokaiseen sisätuloavaruuteen X voidaan induoida metriikka asettamalla $d(x, y) := \|x - y\|$. Kun tämä metriikka on täydellinen, niin avaruutta X kutsutaan *Hilbertin² avaruudeksi*.

Sisätulo sisältää tietoa vektorien keskinäisestä kohtisuoruudesta. Kun vektoriavaruuteen liitetään pelkkä etäisyyden käsite eli normi, niin saamme *normiavaruuden*. Jokainen normiavaruus on myös metrinen avaruus. Jos tämä metriikka on täydellinen, niin kyseessä on *Banachin³ avaruus*.

Määritelmä 1.4. Olkoot N_1 ja N_2 normiavaruuksia sekä $L : N_1 \rightarrow N_2$ lineaarikuvaus. Tällöin kuvauksen L normi

$$(1.4) \quad \|L\| := \sup\{\|Lx\| \mid x \in N_1, \|x\| \leq 1\}.$$

Jos $\|L\| < \infty$, niin sanomme, että L on *rajoitettu lineaarikuvaus*.

Esimerkki 1.5. Olkoon edellisen määritelmän oletukset voimassa. Kun $x \in N_1$ ja $a \in \mathbb{C}$, niin pätee

$$(1.5) \quad \|L(ax)\| = \|aLx\| = |a|\|Lx\|, \quad \|Lx\| \leq \|L\| \|x\|.$$

Lisäksi jälkimmäisessä epäyhtälössä $\|L\|$ on pienin luku, jolla epäyhtälö on tosi. Näistä saadaan vielä seuraavat esitykset lineaarikuvauksen normille

$$(1.6) \quad \begin{aligned} \|L\| &= \sup\{\|Lx\| \mid x \in N_1, \|x\| = 1\} \\ &= \sup\left\{\frac{\|Lx\|}{\|x\|} \mid x \in N_1, x \neq 0\right\}. \end{aligned}$$

Todistus. Todistetaan vain kaavoista (1.5) epäyhtälöä $\|Lx\| \leq \|L\| \|x\|$ koskevat väitteet, sillä ensimmäinen yhtälö on triviaali. Väite pätee selvästi erikoistapaukselle $x = 0$. Olkoon $x \in N_1, x \neq 0$. Nyt pätee $\|x\|^{-1} \|Lx\| = \|\|x\|^{-1} Lx\| = \|L(\|x\|^{-1} x)\| \leq \|L\|$. Siis yhtäpitävästi $\|Lx\| \leq \|L\| \|x\|$.

Oletetaan nyt vastoin väitettä, että on olemassa $0 < M < \|L\|$, jolle on voimassa arvio $\|Lx\| \leq M \|x\|$. Kirjoitetaan $M = \|L\| - \varepsilon$, missä $\varepsilon > 0$. Koska $(\|L\| - \varepsilon) \|x\| = \|L\| \|x\| - \varepsilon \|x\|$, niin pätee $\|Lx\| \leq \|L\| \|x\| - \varepsilon \|x\|$. Kun $\|x\| = 1$, niin on voimassa

$$\|Lx\| \leq \|L\| - \varepsilon.$$

Ensimmäisen kaavan (1.5) perusteella näemme, että

$$\|L\| = \sup\{\|Lx\| \mid x \in N_1, \|x\| = 1\}.$$

Siis $\|L\|$ ei olisikaan edellisen kaavan mukainen supremum, joten olemme päätyneet ristiriitaan. Nyt kaavat (1.6) ovat kaavojen (1.5) suoria seurauksia. \square

²David Hilbert (1862–1943) oli saksalainen matemaatikko, jota pidetään yhtenä aikansa tärkeimmistä matemaatikoista. Hän esitti vuonna 1900 kuuluisat "*Hilbertin ongelmat*", jotka ovat osaltaan ohjanneet matematiikan kehitystä viimeisen sadan vuoden aikana.

³Stefan Banach (1892–1945) oli puolalainen matemaatikko, joka on kehittänyt erityisesti vektoriavaruuksien teoriaa.

Määritelmä 1.6. Olkoon N normiavaruus. Tällöin $M \subseteq N$ on sen *suljettu aliavaruus*, jos

- 1) se on vektoriavaruuden N aliavaruus ja
- 2) se on suljettu avaruuden N metrisen topologian suhteen.

Lause 1.7. *Olkoon N normiavaruus. Jos M on avaruuden N aliavaruus, niin tällöin myös sen sulkeuma \overline{M} on aliavaruus.*

Todistus. Olkoot $x, y \in \overline{M}$ ja $a \in \mathbb{C}$ skalaari. Nyt sulkeuman määritelmän mukaan on olemassa jonot $(x_n), (y_n) \in M$ siten, että ne suppenevat kohti lukuja x ja y . Tällöin $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n + y_n = x + y$ ja $\lim_{n \rightarrow \infty} ax_n = ax$. Siis $x + y, ax \in \overline{M}$. \square

Selvästi jos $\langle x, y \rangle \in \mathbb{R}$, niin tällöin $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$. Voimme näin ollen tehdä seuraavan määritelmän.

Määritelmä 1.8. Olkoot H Hilbertin avaruus ja $x, y \in H$. Jos $\langle x, y \rangle = 0$, niin sanomme, että x ja y ovat *kohtisuorassa*. Merkitsemme tällöin, että $x \perp y$. Merkitään edelleen vektorin x ortokomplementtia

$$(1.7) \quad x^\perp := \{y \in H : x \perp y\},$$

ja kun $M \subseteq H$, niin merkitsemme joukon M ortokomplementtia

$$(1.8) \quad M^\perp := \bigcap_{x \in M} x^\perp.$$

Helposti huomataan, että x^\perp on avaruuden H suljettu aliavaruus (ks. esim. [24, s. 83]). Näin ollen myöskin suljettujen aliavaruuksien leikkauksena M^\perp on suljettu aliavaruus.

Esimerkki 1.9. Vrt. [24, s. 97, Exercise 1]. Olkoon H Hilbertin avaruus ja $M \subseteq H$ sen suljettu aliavaruus. Tällöin $(M^\perp)^\perp = M$.

Todistus. Olkoon $x \in M$. Nyt määritelmän mukaan $y \in M^\perp \Rightarrow \langle x, y \rangle = 0$ eli $x \in (M^\perp)^\perp$. Siis $M \subseteq (M^\perp)^\perp$.

Todistetaan sitten väitteen toinen suunta. Olkoon $x \in (M^\perp)^\perp$ ja $P : H \rightarrow M$ ortogonaaliprojektio⁴, ts. $P(u + v) = u$, kun $u \in M$ ja $v \in M^\perp$. Tiedetään, että $x = Px + Qx$, missä $Q : H \rightarrow M^\perp$ on ortogonaaliprojektio joukkoon M^\perp . Nyt ortogonaaliprojektion konstruktion perusteella on siis voimassa, että $x - Px \in M^\perp$. Toisaalta pätee $Px \in M \subseteq (M^\perp)^\perp$, joten oletuksen perusteella $x - Px \in (M^\perp)^\perp$. Näin ollen $\|x - Px\| = 0$, joten $x = Px \in M$. Siis $(M^\perp)^\perp \subseteq M$. Näin olemme todistaneet, että $(M^\perp)^\perp = M$. \square

Esimerkki 1.10. Olkoon H Hilbertin avaruus ja $M \subseteq H$ sen aliavaruus. Tällöin $\overline{M}^\perp = M^\perp$.

Todistus. Koska $M \subseteq \overline{M}$, niin $\overline{M}^\perp \subseteq M^\perp$. Todistetaan sitten väite toiseen suuntaan. Olkoon $x \in M^\perp$. Tällöin kaikilla $y \in M$ pätee $\langle x, y \rangle = 0$. Lisäksi koska M on *tiheä*⁵ sulkeumassaan \overline{M} , niin sisätulon jatkuvuuden perusteella $\langle x, y \rangle = 0$ kaikilla $y \in \overline{M}$. Näin ollen $M^\perp \subseteq \overline{M}^\perp$. Näin olemme todistaneet, että $\overline{M}^\perp = M^\perp$. \square

⁴Olemassaolo- ja yksikäsitteisyystulokset todistetaan lähteessä [24, s. 84–85]. Käytämme tässä vaiheessa oletusta, että M on suljettu.

⁵Sanomme, että joukko $A \subseteq B$ on *tiheä* joukossa B , jos $B \subseteq \overline{A}$ (so. jokainen piste $x \in B$ on jonkin pisteen $y \in A$ ympäristössä). Käytämme tässä sisätulon jatkuvuutta, joka on todistettu lähteessä [24, s. 81–82].

Lemma 1.11 (Cauchyn-Schwarzin⁶ epäyhtälö). *Olkoot H Hilbertin avaruus ja $x, y \in H$. Tällöin*

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|.$$

Todistus. Todistus perustuu helpohkoon laskutoimitukseen. Yksityiskohtia varten ks. [24, s. 80]. \square

Lemma 1.12. *Olkoon $L : V \rightarrow U$ lineaarikuvaus, missä V ja U ovat R -moduleita. Jos $V' \subseteq V$ ja $U' \subseteq U$ ovat alimoduleita, niin $L(V') \subseteq U$ ja $L^{-1}(U') \subseteq V$ ovat alimoduleita. Erityisesti $\text{Ker}(L) \subseteq V$ ja $\text{Im}(L) \subseteq U$ ovat alimoduleita.*

Todistus. Voidaan todistaa suoralla laskulla käyttäen kuvauksen L lineaarisuutta. \square

Lause 1.13 (Rieszin⁷-Fréchet'n⁸ esityslause). *Olkoon H Hilbertin avaruus ja $L : H \rightarrow H$ jatkuva lineaarikuvaus. Tällöin on olemassa yksikäsitteinen $y \in H$, jolle $Lx = \langle x, y \rangle$.*

Todistus. Vrt. [24, s. 85]. Jos $\text{Ran}(L) = \{0\}$, niin ainoa mahdollinen valinta on $y = 0$. Oletetaan sitten, että $\text{Ran}(L) \neq \{0\}$.

Todistetaan olemassaolo ensiksi. Oletuksemme mukaan on olemassa $x \in H$, jolle $Lx \neq 0$. Koska L on jatkuva kuvaus, niin edellisen lemmän perusteella $\text{Ker}(L)$ on suljettu aliavaruus. Edellä olleen esimerkin 1.9 perusteella $(\text{Ker}(L)^\perp)^\perp = \text{Ker}(L)$, joten $\text{Ker}(L)^\perp \setminus \{0\} \neq \emptyset$. Voidaan siis valita sellainen $z \in \text{Ker}(L)^\perp$, että $\|z\| = 1$. Määritellään, että

$$u := (Lx)z - (Lz)x.$$

Nyt $L(u) = 0$, joten $u \in \text{Ker}(L)$. Näin ollen $\langle u, z \rangle = 0$. Nyt siis

$$0 = \langle u, z \rangle = \langle (Lx)z - (Lz)x, z \rangle = Lx\langle z, z \rangle - Lz\langle x, z \rangle$$

eli

$$Lx = Lx\langle z, z \rangle = Lz\langle x, z \rangle.$$

Määritellään sitten, että $y := \overline{(Lz)}z$, jolloin

$$\langle x, y \rangle = \langle x, \overline{(Lz)}z \rangle = \overline{Lz\langle z, x \rangle} = (Lz)\langle x, z \rangle = Lx.$$

Näin olemme saaneet todistettu olemassaolon.

Osoitetaan lopuksi yksikäsitteisyys. Oletetaan, että jokaisella $x \in H$ pätee $\langle x, y \rangle = \langle x, y' \rangle$. Kirjoitetaan nyt $z := y - y'$, jolloin $\langle x, z \rangle = 0$ jokaisella $x \in H$. Erityisesti jos valitsemme $x = z$, niin saamme $\|z\| = 0$ eli $z = 0$. \square

Lause 1.14. *Olkoot N_1 ja N_2 normiavaruuksia sekä $L : N_1 \rightarrow N_2$ lineaarikuvaus. Tällöin seuraavat ovat yhtäpitäviä*

1) L on rajoitettu;

2) L on jatkuva;

⁶Hermann Schwarz (1843–1921) oli saksalainen matemaatikko, joka työskenteli erityisesti kompleksianalyysin parissa. Ei tule sekoittaa ranskalaiseen, myöskin menestykselliseen, matemaatikkoon Laurent Schwartziin (1915–2002).

⁷Frigyes Riesz (1880–1956) oli unkarilainen matemaatikko, joka teki perustavanlaatuisia työtä funktionaalianalyysin parissa.

⁸Maurice Fréchet (1878–1973) oli ranskalainen matemaatikko, joka kehitti metristen avaruuksien käsitteen ja tutki topologiaa.

3) L on jatkuva jossakin pisteessä $x \in N_1$.

Todistus. Vrt. [24, s. 102]. Todistetaan aluksi tapaus ”1) \Rightarrow 2)”. Edellä todistettiin, että $\|L(x_1 - x_2)\| \leq \|L\| \|x_1 - x_2\|$. Näin ollen $\|L(x_1 - x_2)\| \rightarrow 0$, kun $x_2 \rightarrow x_1$ eli L on jatkuva. Tapaus ”2) \Rightarrow 3)” on triviaali.

Todistetaan lopuksi tapaus ”3) \Rightarrow 1)”. Oletetaan, että L on jatkuva pisteessä $x_0 \in N_1$. Valitaan jokin $\varepsilon > 0$. Tällöin jatkuvuuden perusteella on olemassa $\delta > 0$, jolle $\|x - x_0\| < \delta \Rightarrow \|Lx - Lx_0\| < \varepsilon$. Tehdään tähän sijoitus $t = x - x_0$, jolloin siis

$$\|t\| < \delta \Rightarrow \|L(t + x_0) - Lx_0\| = \|L(t + x_0 - x_0)\| = \|Lt\| < \varepsilon.$$

Siis $\|Lt\| / \|t\| = \|L(t / \|t\|)\| \leq \varepsilon / \delta$, joten $\|L\| \leq \varepsilon / \delta$. \square

Kun edellisen lauseen 1.14 oletukset ovat voimassa, niin merkitään rajoitettujen lineaarikuvausten joukkoa merkinnällä $\mathcal{L}(N_1, N_2)$.

Lause 1.15. *Olkoot B_1 ja B_2 Banachin avaruuksia sekä $L : B_1 \rightarrow B_2$ rajoitettu lineaarikuvaus. Tällöin jos L on bijektio, niin on olemassa sellainen $\delta \in \mathbb{R}_+$, että jokaisella $x \in X$ pätee*

$$(1.9) \quad \|Lx\| \geq \delta \|x\|.$$

Siis myös L^{-1} on rajoitettu lineaarikuvaus.

Todistus. Ks. [24, s. 106]. Varsinainen väite (1.9) saadaan todistettua *avoimen kuvauslauseen*⁹ (eng. *open mapping theorem*) seurauksena.

Todistetaan jälkimmäinen osa. Bijektiivisyydestä seuraa, että L^{-1} on olemassa. Määritelmän mukaan $L^{-1}y = x$, jos ja vain jos $Lx = y$. Suoraviivainen lasku osoittaa käänteiskuvauksen olevan myöskin lineaarikuvaus. Nyt asettamalla $x = L^{-1}y$ kaavasta (1.9) seuraa, että $\|L^{-1}\| \leq 1/\delta$. \square

Määritelmä 1.16. *Olkoot B_1 ja B_2 Banachin avaruuksia sekä $L : \text{Dom}(L) \rightarrow B_2$ lineaarikuvaus ja $\text{Dom}(L) \subseteq B_1$. Sanomme lineaarikuvausta L *kompaktiksi*, jos jonolla $(Lx_n)_{n \in \mathbb{N}}$ on joukossa B_2 suppeneva osajono aina, kun jono $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \text{Dom}(L)$ on rajoitettu.*

Huomautus 1.17. *Lineaarikuvauksen kompaktiudelle on useita erilaisia, mutta tietyin oletuksin yhtäpitäviä, määritelmiä (ks. esim. [23, s. 97–98], [18, s. 294] ja [6, s. 180]). Se mitä määritelmää kannattaa käyttää riippuu, missä kontekstissa työskennellään. Olemme valinneet jonoihin perustuvan määritelmän, jotta seuraavan lauseen todistaminen onnistuu sulavasti.*

Lause 1.18. *Olkoot B_1 ja B_2 Banachin avaruuksia sekä $L : B_1 \rightarrow B_2$ kompakti lineaarikuvaus. Tällöin lineaarikuvaus L on rajoitettu.*

Todistus. Vrt. [18, s. 294]. Olkoon L rajoittamaton lineaarikuvaus. Nyt on olemassa jono $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$, jolle $\|x_n\| = 1$ jokaisella $n \in \mathbb{N}$, ja $\lim_{n \rightarrow \infty} \|Lx_n\| = \infty$. Voimme valita jonon $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sellaisen osajonon $(x_{i_k})_{k \in \mathbb{N}}$, $i_k \in \mathbb{N}$, jolle $(Lx_{i_k})_{k \in \mathbb{N}}$ on aidosti kasvava ja rajoittamaton. Koska L on kompakti ja $(x_{i_k})_{k \in \mathbb{N}}$ rajoitettu, niin jonon $(Lx_{i_k})_{k \in \mathbb{N}}$ tulee sisältää suppeneva osajono. Tämä on ristiriita, joten L on rajoitettu. \square

⁹Avoim kuvauslause ja sen todistus on esitetty lähteessä [24, s. 104–106].

Esimerkki 1.19. Olkoot B_1, B_2 ja B_3 Banachin avaruuksia sekä $L : \text{Dom}(L) \rightarrow B_2$ kompakti lineaarikuvaus ja $\text{Dom}(L) \subseteq B_1$. Jos $A : B_2 \rightarrow B_3$ on jatkuva lineaarikuvaus, niin $A \circ L : \text{Dom}(L) \rightarrow B_3$ on kompakti lineaarikuvaus.

Todistus. Olkoon $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ rajoitettu jono avaruudessa $\text{Dom}(L)$. Nyt jonolla $(Lx_n)_{n \in \mathbb{N}}$ on avaruudessa B_2 suppeneva osajono $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Koska A on rajoitettu lineaarikuvaus, niin myös $(Aa_n)_{n \in \mathbb{N}}$ suppenee avaruudessa B_3 . Siis $A \circ L$ on kompakti. \square

Lause 1.20 (Rieszin lemma). *Olkoon X normiavaruus, Y sen aito suljettu aliavaruus ja $0 < \alpha < 1$ reaalityyppi. Tällöin on olemassa $x_\alpha \in X \setminus Y$, $\|x_\alpha\| = 1$, jolle $\|x_\alpha - y\| > \alpha$ jokaisella $y \in Y$.*

Todistus. Vastaavanlainen todistus esitetään monissa eri lähteissä. Kun $x \in X$ ja $A \subseteq X$, niin määritellään merkintä

$$d(x, A) := \inf\{d(x, s) \mid s \in A\},$$

missä d on avaruuden X metriikka.

Olkoon $x \in X \setminus Y$. Nyt $d(x, Y) > 0$, koska Y on suljettu. Olkoon $a \in Y$ sellainen, että

$$\|x - a\| < \frac{d(x, Y)}{\alpha}.$$

Osoitetaan, että tällainen a on olemassa. Koska

$$0 < \alpha < 1 \Rightarrow d(x, Y) < \frac{d(x, Y)}{\alpha},$$

niin infimumin määritelmän perusteella on olemassa $a \in Y$, jolle

$$\|x - a\| < \frac{d(x, Y)}{\alpha}.$$

Määritellään sitten

$$x_\alpha := \frac{x - a}{\|x - a\|},$$

jolloin triviaalisti $\|x_\alpha\| = 1$. Osoitetaan, että $x_\alpha \in X \setminus Y$. Jos $x_\alpha \in Y$, niin $x = (x - a) + a \in Y$, mikä on ristiriitaista.

Jokaisella $y \in Y$ lisäksi pätee

$$\begin{aligned} \|y - x_\alpha\| &= \left\| y - \frac{x - a}{\|x - a\|} \right\| = \frac{1}{\|x - a\|} \|\|x - a\|y + a - x\| \\ &\geq \frac{d(x, Y)}{\|x - a\|} > \alpha, \end{aligned}$$

koska $\|x - a\|y + a \in Y$. \square

Esimerkki 1.21. Olkoon B ääretönulotteinen Banachin avaruus ja $S := \{x \in B \mid \|x\| \leq 1\}$ suljettu yksikkökuula. Tällöin

- on olemassa jono $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S$, jolla ei ole suppenevaa osajonoa;
- avaruuden B identiteettifunktio I ei ole kompakti.

Todistus. a) Konstruoidaan jono $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S$, jolla ei ole suppenevaa osajonoa. Olkoon $x_1 \in S$ mielivaltainen. Olkoon $n \geq 1$ ja oletetaan, että olemme valinneet pisteet $x_1, \dots, x_n \in S$, joille $\|x_l - x_k\| > \frac{1}{2}$ jokaisilla $1 \leq k, l \leq n, k \neq l$. Nyt $X_n := \text{span}(x_1, \dots, x_n)$ on äärellisulotteinen ja täten suljettu aliavaruus. Koska B on ääretönulotteinen, niin $B \neq X_n$. Rieszin lemmän mukaan on olemassa $x_{n+1} \in S$, jolle $\|x_{n+1} - x_k\| > \frac{1}{2}$ jokaisella $1 \leq k \leq n$. Olemme saaneet konstruotua induktiivisesti sellaisen jonon $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in S$, jolla ei voi olla suppenevaa osajonoa, mikä todistaa väitteen.

b) Nyt konstruoinnin perusteella $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ on rajoitettu, mutta sen kuvalla $(Ix_n)_{n \in \mathbb{N}} = (x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ei ole suppenevaa osajonoa, mikä todistaa väitteen. □

Hilbertin avaruudessa todistus voitaisiin tehdä myös konkreettisemmin (ks. esim. [18, s. 294]). △

1.2 Lineaarisista inversio-ongelmista

Määritelmä 1.22. Hadamardin¹⁰ mielessä *hyvin määritellyllä* (eng. *well-posed*) ongelmalla vaadimme olevan seuraavat ominaisuudet

- 1) H1: Ongelmalla on ratkaisu (*olemassaolo*),
- 2) H2: Ongelman ratkaisu on yksikäsitteinen (*yksikäsitteisyys*) ja
- 3) H3: Ongelman ratkaisu riippuu jatkuvasti käytetystä datasta (*vakaus*).

Huonosti määritellyksi (eng. *ill-posed*) voidaan ajatella sellainen ongelma, joka ei toteuta yhtä tai useampaa edellisistä vaatimuksista.

Esimerkki 1.23. Olkoot X ja Y normiavaruuksia sekä $F : U \rightarrow V$ lineaarikuvaus, missä $U \subseteq X$ ja $V \subseteq Y$. Tällöin jos yhtälö $Fx = y$, missä $x \in U$ on tuntematon, toteuttaa Hadamardin ehdot jokaisella $y \in V$, niin F on bijektio ja F^{-1} on jatkuva.

Todistus. Ehdosta H1 seuraa, että F on surjektio. Ehdosta H2 seuraa, että F on injektio. Ehdosta H3 seuraa, että F^{-1} on jatkuva. □

Esimerkki 1.24. Olkoot H_1 ja H_2 Hilbertin avaruuksia sekä $F : H_1 \rightarrow H_2$ kompakti lineaarikuvaus. Tällöin *1. lajin Fredholm'n yhtälö* on muotoa

$$(1.10) \quad Fx = y,$$

missä $x \in H_1$ on tuntematon ja $y \in H_2$ tunnettu. Tällöin

- a) yhtälöllä (1.10) on ratkaisu (H1), jos ja vain jos $y \in \text{Ran}(F)$;
- b) yhtälön (1.10) ratkaisu on yksikäsitteinen (H2), jos ja vain jos $\text{Ker}(F) = \{0\}$.

Todistus. Oletetaan, että $\text{Ker}(F) = \{0\}$. Olkoon $Fx = Fx'$, missä $x, x' \in H_1$. Nyt $Fx = Fx'$, joten lineaarisuuden perusteella $F(x - x') = Fx - Fx' = 0$. Siis oletuksen mukaan $x - x' = 0$ eli $x = x'$. Toinen suunta sekä kohta a) ovat täysin triviaaleja. □

¹⁰Jacques Hadamard (1865–1963) oli ranskalainen matemaatikko, joka tunnetaan erityisesti *alkulukulauseen* todistuksesta.

Jos molemmat ehdoista ovat voimassa, niin yhtälöllä (1.10) on yksikäsitteinen ratkaisu. \triangle

Määritelmä 1.25. Olkoot X ja Y Hilbertin avaruuksia sekä $\text{Dom}(F) \subseteq X$. Tällöin kutsumme rajoitettua lineaarikuvausta $F : \text{Dom}(F) \rightarrow Y$ suoraksi malliksi sekä avaruuksia X ja Y tila-avaruudeksi ja data-avaruudeksi. Lisäksi kutsumme epäsuoran mittauksen inversiomalliksi yhtälöä

$$(1.11) \quad y = Fs + \varepsilon,$$

missä $s \in \text{Dom}(X)$ on tuntematon tila, $y \in Y$ havaittu mittaus ja $\varepsilon \in Y$ epämääräinen kohina, joka toteuttaa $\|\varepsilon\|_Y \leq \delta$ (alaindeksi ilmoittaa, minkä avaruuden normista on kyse), jollakin $\delta > 0$.

Kaikki sellaiset muuttujat, joiden arvot ovat tuntemattomia ajatellaan olevan osa tilaa s . Kohina ε on jotain sellaista, mitä emme pysty tai osaa mallintaa muuttujien avulla. Ajattelemme siis, että mittaus y koostuu kahdesta osasta ns. mittauksen ytimestä Fs ja kokonaisvirheestä¹¹ ε . Virhe saattaa riippua myös tilasta s .

Epäsuoraa koetilannetta mallintavan funktion F konstruointi on usein epätriviaalia. Onkin tavanomaista työskennellä likimääräisen algoritmin kanssa, sillä suljettua muotoa ei välttämättä tunneta. Numeerisessa laskennassa kaavan (1.11) diskretointi on lähes aina tarpeen, kuten teemme esimerkiksi luvun 5 mallissa. Tilastollisessa viitekehyksessä kaava (1.11) esitetään satunnaismuuttujien avulla, mutta tähän paneudutaan tarkemmin vasta luvussa 4.

Määritelmä 1.26. Olkoon määritelmän 1.25 oletukset voimassa. Tällöin kutsumme lineaariseksi inversio-ongelmaksi yhtälön (1.11) ratkaisemista eli ”kun y tunnetaan, ratkaise s ”.

Seuraavaksi tarkastelemme millaisten ehtojen vallitessa lineaarinen inversio-ongelma on hyvin määritelty.

Lause 1.27. Olkoon määritelmän 1.25 oletukset voimassa. Tällöin jos $F : X \rightarrow Y$ on bijektio ja F^{-1} on jatkuva, niin inversio-ongelma toteuttaa Hadamardin ehdot.

Todistus. Väite on triviaali. Kuitenkaan kohinan vuoksi ratkaisu ei välttämättä ole ”oikea”. \square

Hyvin määritelty inversio-ongelmat eivät kuitenkaan ole tutkimuksen kannalta kovinkaan mielenkiintoisia. Tutkimuksen kohteita ovat sellaiset haastavammat inversio-ongelmat, jotka eivät toteuta jotakin Hadamardin ehdoista. Kun inversiomallissa (1.11) kohina on epätriviaalia, niin ehto H1 voi kaatua eli $Fs + \varepsilon \notin F(\text{Dom}(F))$. Jos on olemassa sellaiset kaksi eri tilaa $s, s' \in \text{Dom}(F)$, joille $Fs = Fs'$, niin ehto H2 ei ole voimassa. Myöskään ehto H3 ei ole aina voimassa. Edes mittausten rajoittuminen suoran mallin kuvajoukkoon $F(\text{Dom}(F))$ ei takaa ehdon H3 pätemistä. Seuraava lause osoittaa, että Hadamardin ehdot eivät ole riippumattomia toisistaan.

Lause 1.28. Olkoot X ja Y Banachin avaruuksia sekä $F \in \mathcal{L}(X, Y)$. Jos F on bijektio, niin $F^{-1} \in \mathcal{L}(Y, X)$.

¹¹Emme tässä työssä erottele virheen lähteitä. Tiedämme vain varmasti, että malli ei vastaa täysin mittausta tai ”todellisuutta”.

Todistus. Väite on lauseiden 1.15 ja 1.14 välitön seuraus. \square

Lause 1.29. *Olko X ja Y Banachin avaruuksia sekä $F : \text{Dom}(F) \rightarrow Y$ kompakti lineaarikuvaus, missä $\text{Dom}(F) \subseteq X$ ja $\dim(\text{Dom}(F)) = \infty$. Tällöin inversio-ongelma $Fs = y$ on huonosti määritelty.*

Todistus. Vrt. [18, s. 40]. Oletetaan, että $\dim(\text{Dom}(F)) = \infty$ ja $F^{-1} \in \mathcal{L}(Y, \text{Dom}(F))$. Tällöin $I_{\text{Dom}(F)} := F^{-1} \circ F$ on kompaktin ja jatkuvan kuvauksen yhdisteenä kompakti, kuten esimerkissä 1.19 todistettiin. Toisaalta esimerkin 1.21 perustellaa tiedämme, että ääretönulotteisen Banachin avaruuden identiteettikuvaus $I_{\text{Dom}(F)}$ ei ole kompakti. Olemme siis päätyneet ristiriitaan, joten F :llä ei voi olla jatkuvaa käänteiskuvausta. Se ei siis toteuta Hadamardin ehtoa H3. \square

Esimerkki 1.30. Olkoon H Hilbertin avaruus ja $F : H \rightarrow H$ on kompakti lineaarikuvaus.

a) Vrt. [18, s. 46, Exercise 3.3.1]. Tällöin jos H on ääretönulotteinen ja F^{-1} on olemassa, niin F^{-1} on epäjatkua.

b) Vrt. [18, s. 46, Exercise 3.3.2]. Tällöin jos F^{-1} on olemassa, niin H on äärellisulotteinen.

Todistus. a) Nyt koska $\text{Dom}(F) = H$ ja $\dim(H) = \infty$, niin edellisen lauseen oletukset ovat voimassa. Edellisen lauseen 1.29 todistuksen lopussa pääteltiin, että F :llä ei voi olla jatkuvaa käänteiskuvausta.

b) Koska $F^{-1} : H \rightarrow H$ on olemassa, niin lineaarikuvauksen F täytyy olla bijektio $F : H \rightarrow H$. Koska F on kompakti, niin se on lauseen 1.18 mukaan myös rajoitettu. Siis lauseen 1.15 oletukset ovat voimassa, ja täten F^{-1} on jatkuva lineaarikuvaus. Siis kohdan a) perusteella avaruuden H täytyy olla äärellisulotteinen. \square

Huomataan myös, että kohdan a) oletukset ovat ristiriitaisia kohdan b) perusteella. \triangle

1.3 Regularisointimenetelmistä

Inversio-ongelmat ovat usein huonosti määriteltyjä, jolloin ainakin yksi Hadamardin ehtoista H1–3 ei täyty. Tällöin pyrimme löytämään sellaiset oletukset, joiden vallitessa ongelmalle on olemassa Hadamardin ehdot toteuttava likimääräinen ratkaisumenetelmä eli *regularisoimme* ongelmaa. Koska numeerisessa laskennassa matemaattinen malli täytyy useimmiten diskretoida, niin esitämme paljon matriisilaskentaan liittyviä käsitteitä ja esimerkkejä.

Määritelmä 1.31. Olkoot X ja Y Hilbertin avaruuksia. Olkoon $F : X \rightarrow Y$ injektiivinen lineaarikuvaus, ja tarkastellaan siihen liittyvää epäsuoran mittauksen inversio-ongelmaa, missä $\|Fs - y\| \leq \delta$. Tällöin lineaarikuvauksien $R_\alpha : Y \rightarrow X$, $0 < \alpha < \infty$, kokoelmaa kutsutaan *regularisointistrategiaksi*, jos

$$(1.12) \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} R_\alpha F s = s$$

jokaisella $s \in X$. Kun *regularisointiparametri* α on muuttujan δ funktio, niin kutsumme funktiota $\alpha(\delta)$ *hyväksi*, jos

- 1) $\alpha(\delta) = 0$, kun $\delta \rightarrow 0$ ja
 2) jokaisella $s \in X$ pätee

$$\sup_{y \in Y} \left\{ \left\| R_{\alpha(\delta)} y - s \right\| \mid \|Fs - y\| \leq \delta \right\} \rightarrow 0,$$

kun $\delta \rightarrow 0$.

Regularisointistrategia ja erityisesti hyvä parametrin valinta mahdollistavat inversio-ongelman ratkaisemisen. Regularisointistrategian muodostaminen ei ole kuitenkaan aina suoraviivaista. Monia ongelmia voi ilmetä, kuten

- a) suora malli F ei ole injektio;
 b) miten ratkaista kohinaton yhtälö $y = Fs$? Miten ratkaista kohinallinen yhtälö $y = Fs + \varepsilon$ riittävän vakaasti (eng. *robust*)?
 c) onko mahdollista johtaa kaava $\|s - s'\|_X \leq g(\|Fs - Fs'\|_Y)$, missä $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ on jatkuva kuvaus, jolle $g(0) = 0$?
 d) kuuluuko saatu mittausta y kuvajoukkoon $F(X)$?

Esimerkki 1.32 (SVD ja matriisin ehtoluku). Vrt. [18, s. 49–51] ja [11, s. 311–314]. Olkoon $F \in \mathbb{R}^{n \times m}$ matriisi. Tällöin sillä on *singulaariarvohajotelma* (SVD)

$$(1.13) \quad F = UDV^T,$$

missä $D \in \mathbb{R}^{m \times n}$ diagonaalinen ja $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sekä $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ovat ortogonaalisia. Jos $n = m$, niin $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$, jos $n < m$, niin

$$D = \begin{pmatrix} \text{diag}(d_1, \dots, d_n) \\ 0_{(m-n) \times n} \end{pmatrix},$$

ja jos $n > m$, niin

$$D = \begin{pmatrix} \text{diag}(d_1, \dots, d_m) & 0_{m \times (n-m)} \end{pmatrix}.$$

Lukuja $d_1, \dots, d_{\min(n,m)}$ kutsutaan matriisin F *singulaariarvoiksi*, ja niille pätee $d_1 \geq \dots \geq d_{\min(n,m)}$.

Oletetaan sitten, että F on kääntyvä neliömatriisi. Tällöin

$$F^{-1}y = F^{-1}(Fs + \varepsilon) = s + F^{-1}\varepsilon,$$

mistä saamme virheelle ylärajan $\|F^{-1}\varepsilon\| \leq \|F^{-1}\| \|\varepsilon\|$. Määritellään regularisointistrategiaksi $R(y) := F^{-1}y$. Nyt kuitenkin jos $\|F^{-1}\|$ on suuri, niin pieni virhe voi aiheuttaa suuren virheen inversion tulokseen $F^{-1}y$. Lisäksi numeerinen käänteismatriisin määrittäminen käy epävakaaaksi, jos *matriisin ehtoluku* (eng. *condition number*)

$$(1.14) \quad \text{cond}(F) := \frac{d_1}{d_n}$$

kasvaa liian suureksi. Tämä siksi, että kääntyvälle matriisille pätee $F^{-1} = VD^{-1}U^T$. \triangle

Määritelmä 1.33. Olkoot X ja Y Hilbertin avaruuksia. Olkoon $F : X \rightarrow Y$ lineaarikuvaus ja tarkastellaan siihen liittyvää epäsuoran mittauksen kohinatonta inversio-ongelmaa. Kutsumme vektoria $s(y) \in X$ *pienimmän eron ratkaisuksi*, jos

$$(1.15) \quad \|Fs(y) - y\|_Y = \min_{x \in X} \|Fx - y\|_Y.$$

Pienimmän eron ratkaisua $s(m)$ kutsutaan *pienimmän normin ratkaisuksi*, jos

$$(1.16) \quad \|s(y)\|_X = \inf\{\|z\|_X \mid z \text{ on pienimmän eron ratkaisu}\}.$$

Kun F on matriisi, niin kutsumme pienimmän eron ratkaisua *pienimmän neljösumman ratkaisuksi*. On tunnettua, että pienimmän normin ratkaisun saa tällöin laskettua matriisin F *Mooren¹²-Penrosen¹³ pseudoinvertsin* F^+ avulla. Kun on saatu mittausta y , niin tämä ratkaisu on F^+y . Asia käsitellään kattavasti lähteessä [18, s. 53–55], emmekä esitä sitä tässä.

Esimerkki 1.34 (Typistetty SVD). Vrt. [18, s. 55–56]. Jatketaan siitä, mihin esimerkissä 1.32 jäätin. Pyrimme nyt ratkaisemaan ongelman, joka liittyy matriisiin suureen ehtolukuun. Määritellään seuraavat merkinnät

$$r := \max\{i \mid 1 \leq i \leq \min(m, n), d_i > 0\}$$

ja

$$r_\alpha := \min\{r, \max\{i \mid 1 \leq i \leq \min(m, n), d_i > \alpha\}\},$$

kun $\alpha > 0$. Tällöin matriisin F α -typistetty SVD on

$$(1.17) \quad F_\alpha^+ := VD_\alpha^+U^T,$$

missä D_α^+ on kuten D , mutta vaihdetaan $d_i = 0$ kaikilla $i > r_\alpha$. Mooren-Penrosen pseudoinvertsi F^+ on määritelty vastaavasti kuin typistetty SVD, mutta asetetaan $r_\alpha = r$.

Voimme määritellä sitten kuvausten kokoelman $R_\alpha(y) := F_\alpha^+y$, missä $R_\alpha : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$. Nyt R_α on määritelty jokaisella $y \in \mathbb{R}^m$, ja se antaa yksikäsitteisen ratkaisun. Lisäksi R_α on jatkuva lineaarikuvaus, sillä

$$\|R_\alpha\| = \|VD_\alpha^+U^T\| \leq \|V\| \|D_\alpha^+\| \|U^T\| = \|D_\alpha^+\| = d_{r_\alpha}^{-1}.$$

Siis ratkaisumenetelmä toteuttaa kaikki Hadamardin ehdot.

Lisäksi koska $F = UDV^T$, niin

$$R_\alpha(y) = VD_\alpha^+U^T(Fs + \varepsilon) = VD_\alpha^+DV^T s + VD_\alpha^+U^T \varepsilon,$$

missä $VD_\alpha^+DV^T s \approx s$. Voimme siis arvioida virhetermiä

$$\|VD_\alpha^+U^T \varepsilon\| \leq \|VD_\alpha^+U^T\| \|\varepsilon\| = \|D_\alpha^+\| \|\varepsilon\| = d_{r_\alpha}^{-1} \|\varepsilon\|.$$

Ei ole täysin selvää millainen α tulisi valita, vaan soveltaja joutuu tasapainoilemaan ratkaisun tarkkuuden ja vakauden kanssa. △

¹²Eliakim Moore (1862–1932) oli amerikkalainen matemaatikko, joka tutki erityisesti diskreettiä matematiikkaa.

¹³Roger Penrose (1931–) on englantilainen teoreettinen fyysikko, matemaatikko ja filosofi, joka on tutkinut erityisesti matemaattista fysiikkaa.

Määritelmä 1.35. Olkoot X ja Y Hilbertin avaruuksia. Olkoon $F : X \rightarrow Y$ lineaari-kuvaus ja tarkastellaan siihen liittyvää inversio-ongelmaa. Tällöin vektori $T_\alpha(y) \in X$ on *Tikhonovin*¹⁴ *regularisoitu ratkaisu*, jos

$$(1.18) \quad T_\alpha(y) \in \arg \min_{z \in X} t(z),$$

missä $t(z) := \|Fz - y\|_Y^2 + \alpha \|z\|_X^2$ on *Tikhonovin funktionaali* ja α sen *regularisointiparametri*.

Esimerkki 1.36 (Tikhonovin regularisaatio euklidisessa avaruudessa). Vrt. [18, s. 64]. Jatketaan taas siitä, mihin esimerkissä 1.32 jäätin. Olkoon $\alpha \in \mathbb{R}_+$. Tällöin $T_\alpha(y) = VD_+^\alpha U^T y$ on Tikhonovin regularisoitu ratkaisu, kun $F = UDV^T$ on singulaariarvohajotelma, ja

$$D_+^\alpha := \text{diag} \left(\frac{d_1}{d_1^2 + \alpha}, \dots, \frac{d_{\min(m,n)}}{d_{\min(m,n)}^2 + \alpha} \right) \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Suoraviivaiseen laskuun perustuva todistus on esitetään lähteessä [18, s. 64]. Siinä asetetaan $T_\alpha(y) = Va$, $a \in \mathbb{R}^n$, ja määritetään sitten vektorin a alkioiden arvot, jotka minimoivat Tikhonovin funktionaalin $t(z)$.

Huomataan, että

$$R_\alpha(y) = VD_+^\alpha U^T = \sum_{i=1}^{r_\alpha} \frac{u_i^T y}{d_i} v_i$$

ja

$$T_\alpha(y) = VD_+^\alpha U^T = \sum_{i=1}^r \frac{d_i}{d_i^2 + \alpha} (u_i^T y) v_i.$$

△

Jos tiedämme, että inversio-ongelman ratkaisu $s \in X$ on lähellä vektoria $s_0 \in X$, niin voimme minimoida funktionaalin

$$(1.19) \quad t(z; s_0) = \|Fz - y\|_Y^2 + \alpha \|z - s_0\|_X^2.$$

Jos tiedämme, että ratkaisu s *sileä* eli sillä on kaikkien kertaluokkien derivaatat. Voimme nyt minimoida funktionaalin

$$(1.20) \quad t(z; s_0, L) = \|Fz - y\|_Y^2 + \alpha \|L(z - s_0)\|_X^2,$$

missä L on differentiaalioperaattori¹⁵. Kumpaan menettelyä kutsutaan *yleistetyksi Tikhonovin regularisaatioksi*.

Esimerkki 1.37 (Reaalifunktion diskretoidut integraali- ja derivaattaoperaattorit). Vrt. [18, s. 70]. Oletetaan, että $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ on sileä. Tällöin voimme diskretoida funktion f tasavälisesti $f(s_i)$, $i = 1, \dots, n$, missä Δs on välinpituus. Huomataan, että

$$f(s_i) = \int_0^{s_i} f'(x) dx \approx \Delta s \sum_{j=1}^i f'(s_j).$$

¹⁴Andrey Tikhonov (1906–1993) oli venäläinen matemaatikko ja fyysikko, joka teki tutkimusta monella eri matematiikan alalla.

¹⁵Yleisemmässä tapauksessa liittyy *Fréchet'n derivaattoihin*, emmekä käsittele asiaa tässä työssä (ks. [11, Luku 2]).

Tästä päätellään, että *diskretoitu integraalioperaattori* on

$$(1.21) \quad \begin{pmatrix} f(s_1) \\ \vdots \\ f(s_n) \end{pmatrix} = \Delta s \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f'(s_1) \\ \vdots \\ f'(s_n) \end{pmatrix},$$

josta voimme päätellä *diskretoidun derivaattaoperaattorin* L , jolle

$$(1.22) \quad L \begin{pmatrix} f(s_1) \\ \vdots \\ f(s_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f'(s_1) \\ \vdots \\ f'(s_n) \end{pmatrix}.$$

Toisaalta diskretoidun derivaattaoperaattorin voi määrittää suoraan myös yhtälöstä

$$\frac{df}{ds}(s_i) \approx \frac{f(s_{i+1}) - f(s_i)}{\Delta s}.$$

△

Vielä on käsittelemättä, miten parametri α tulisi valita. Tähän on kaksi yleistä menetelmää *Morozovin*¹⁶ *periaate* (eng. *Morozov's discrepancy principle*) ja *L-käyrämenetelmä* (eng. *L-curve method*). Esitämme tässä vain Morozovin periaatteen. L-käyrämenetelmää on käsitelty lähteessä [18, s. 73–78]. Olkoon $0 < \|\varepsilon\|_Y \leq \delta$. Tällöin hyväksyttäviä ratkaisuja ovat kaikki sellaiset $T_\alpha(y) \in X$, joille

$$\|FT_\alpha(y) - y\|_Y \leq \delta.$$

Morozovin periaatteen mukaan $\alpha > 0$ tulee valita siten, että

$$(1.23) \quad \|FT_\alpha(y) - y\|_Y = \delta.$$

Esimerkki 1.38 (Morozovin periaate euklidisessa avaruudessa). Vrt. [18, s. 72–73]. Jatketään siitä, mihin esimerkissä 1.36 jäätiin. Morozovin periaate määrittää yksikäsitteisen $\alpha > 0$, jos ja vain jos

$$\|Py\| \leq \delta \leq \|y\|,$$

missä $P : \mathbb{R}^m \rightarrow \text{Ran}(F)^\perp$ on ortogonaaliprojektio. Todistuksen yksityiskohdat voi katsoa lähteestä. Tällöin Morozovin periaatteen mukaan tulee valita se yksikäsitteinen α , joka on funktion

$$(1.24) \quad f(\alpha) = \sum_{j=1}^{\min(m,n)} \left(\frac{\alpha}{d_j^2 + \alpha} \right)^2 y_j^2 + \sum_{j=\min(m,n)+1}^m y_j^2 - \delta^2$$

nollakohta. △

Singulaariarvohajotelmaa ja tässä esitettyjä tuloksia voitaisiin käsitellä yleisemmin Hilbertin avaruuksissa, mutta soveltajan kannalta asian käsittely euklidisessa avaruudessa on usein riittävää. Tällainen yleisempi, mutta vähemmän käytännönläheinen, esitys on lähteessä [11, Luku 2]. Luvussa 4 esitämme tilastollisen lähestymistavan, jonka tietyt erikoistapaukset vastaavat tässä alaluvussa esitettyjä menetelmiä.

¹⁶A. V. Morozov on venäläinen matemaatikko, joka kehitti tämän säännön vuonna 1966 venäjäksi julkaistuissa artikkeleissa ”On the solution of functional equations by the method of regularization” ja ”On the regularization of ill-posed problems and the choice of the regularization parameter”.

1.4 Epälineaarista inversio-ongelmista ja numeerisesta optimoinnista

Olemme tähän asti käsitelleet vain lineaarisia inversio-ongelmia. *Epälineaarisia* ovat sellaiset inversio-ongelmat, joissa suora malli ei ole lineaarikuvaus. Tyypillisesti epälineaaristen inversio-ongelmien ratkaiseminen on paljon haastavampaa kuin lineaaristen. Esimerkiksi aiemmin esitetty yksinkertainen matriisilaskenta ei aina ole mahdollista.

Epälineaarisen inversio-ongelman voi yrittää linearisoida. Samantyyppisiä ideoita, kuten regularisointistrategia ja -menetelmät, joita olemme käyttäneet lineaaristen inversio-ongelmien kanssa, voi pyrkiä soveltamaan myös epälineaarisiin ongelmiin. Epälineaaristen inversio-ongelmien numeeriset ratkaisumenetelmät ovat kuitenkin usein malliriippuvaisia.

Esitämme tässä aluvussa Levenbergin-Marquardtin algoritmin yhtenä ratkaisumenetelmänä epälineaarille inversio-ongelmille. Menetelmä ratkaisee minimointiongelman iteratiivisesti käyttäen numeerisia derivaattoja. Yksi hyväksi havaittu optimointimenetelmä, joka ei perustu mallin derivaattoihin, on *Nelderin-Meadin simplex algoritmi*¹⁷. Derivaattaan perustuvat menetelmät voivat kuitenkin olla nopeampia. Luvussa 4 esitämme vielä tilastollisen tavan ratkaista inversio-ongelmia – myös epälineaarisia.

Numeeristen optimointimenetelmien teoriaa ja soveltamista on käsitelty kattavasti teoksessa *Numerical Optimization* [19, Nocedal ja Wright]. Kuitenkin tässä aluvussa esitettävä teoria perustuu vahviten lähteeseen *Methods for Non-Linear Least Squares Problems* [16, Madsen, Nielsen ja Tingleff], joka käsittelee kattavasti derivaattoihin perustuvan minimoinnin teoriaa ja implementaatioita.

1.4.1 Esitietoja vektori- ja skalaarikenttien differentiaalilaskennasta sekä minimoinnista

Käytetään jatkossa vektoria

$$(1.25) \quad \nabla := \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right),$$

jota kutsumme *nablaksi*. Nabla operoi joko skalaari- tai vektorikenttään, ja siitä voidaan johtaa useita erilaisia differentiaalioperaattoreita. Erikseen mainitsematta oletetaan, että sen ulotteisuus n on tilanteeseen sopiva.

Määritelmä 1.39. Olkoon $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ derivoituva funktio. Tällöin kutsumme matriisia

$$(1.26) \quad J_f(x)_{ij} := \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x),$$

funktion f *Jacobin*¹⁸ *matriisiksi*. Olkoon $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ kaksi kertaa derivoituva funktio. Tällöin kutsumme matriisia

$$(1.27) \quad H_F(x)_{ij} := \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}(x),$$

funktion F *Hessen*¹⁹ *matriisiksi*. Kun F on ainakin kerran derivoituva, niin kutsumme vektoria ∇F funktion F *gradientiksi*.

¹⁷John Nelder (1924–2010) oli englantilainen tilastotieteilijä, joka yhdessä Roger Meadin kanssa keksi kyseisen algoritmin (1965). Esim. MATLAB-funktio *fminsearch* käyttää tätä algoritmia.

¹⁸Carl Jacobi (1804–1851) oli saksalainen matemaatikko, joka tutki menestyksellisesti analyysiä ja lukuteoriaa.

¹⁹Otto Hesse (1811–1874) oli saksalainen matemaatikko, joka tutki algebraa.

Oletetaan, että $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ on jatkuvasti kaksi kertaa derivoituva. Tällöin Taylorin²⁰ sarjan perusteella voimme kirjoittaa

$$(1.28) \quad f(x+h) = f(x) + J_f(x)h + O(\|h\|^2).$$

Määritellään, että

$$F(x) := \frac{1}{2} \|f(x)\|^2 = \frac{1}{2} f(x)^T f(x),$$

jolloin funktion f normin $\|f\|$ *globaali minimointiongelma* on

$$(1.29) \quad \text{”ratkaise joukko } \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) \text{”}.$$

Globaalin minimointiongelman ratkaiseminen on vaikeaa, joten esittelemme seuraavan määritelmän. Olkoon $\delta > 0$ kiinnetty luku. Kutsumme tällöin lukua $x^* \in \mathbb{R}^n$ funktion F *lokaaliksi minimiksi*, jos $F(x^*) \leq F(x)$ jokaisella $x \in B(x^*, \delta)$ (x^* -keskinen δ -säteinen avoin kuula). Tästä saamme edelleen *lokaalin minimointiongelman*, missä tulee löytää jokin lokaaleista minimeistä.

Saamme funktion F gradientille kaavan

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x) \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x)$$

eli $\nabla F(x) = J_f(x)^T f(x)$. Edelleen

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k}(x) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \frac{\partial f_i}{\partial x_k}(x) + f_i(x) \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}(x) \right)$$

eli

$$H_F(x) = J_f(x)^T J_f(x) + \sum_{i=1}^m f_i(x) H_{f_i}(x).$$

1.4.2 Gaussin-Newtonin ja Levenbergin-Marquardtin algoritmeista

Käymme läpi tarvittavan teorian, jonka jälkeen Gaussin-Newtonin ja Levenbergin-Marquardtin algoritmien implementointi on helpohkoa. Esitämme aluksi muutaman määritelmän ja tuloksen liittyen matriisilaskentaan.

Määritelmä 1.40. Olkoon $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ reaalmatriisi. Tällöin

- a) matriisia A kutsutaan *positiivisesti definitiksi*, jos se on symmetrinen ja $x^T A x > 0$ jokaisella $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$;
- b) matriisia A kutsutaan *positiivisesti semidefinitiksi*, jos se on symmetrinen ja $x^T A x \geq 0$ jokaisella $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$.

Lause 1.41. Olkoon $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ reaalmatriisi. Tällöin

- a) matriisit $A^T A$ ja $A A^T$ ovat *positiivisesti semidefinittejä*;
- b) matriisin A sarakkeet ovat *lineaarisesti riippumattomia*, jos ja vain jos $A^T A$ on *kääntö*;

²⁰Brook Taylor (1685–1731) oli englantilainen matemaatikko, joka tunnetaan parhaiten Taylorin lauseesta ja Taylorin sarjoista.

- c) matriisin A rivit ovat lineaarisesti riippumattomia, jos ja vain jos AA^T on kääntövä;
d) matriisi $A^T A + \mu I$ on positiivisesti definiitti, kun $\mu \in \mathbb{R}_+$;
e) jos A on positiivisesti definiitti, niin se on kääntövä.

Todistus. Todistukset käsitellään matriisilaskennan peruskursseilla, mutta lukija voi tehdä ne helposti itsekin. Ks. esim. *A First Course in Linear Algebra* [3, Beezer] tai *Matrix Algebra* [1, Abadir ja Magnus]. \square

*Gaussin*²¹-*Newtonin*²² algoritmi on yksi tapa ratkaista lokaali minimointiongelma. Esi-tämme sen johdattelevana pohjustuksena Levenbergin-Marquardt-in algoritmille. Olkoon $x \in \mathbb{R}^n$ kiinnitetty. Gaussin-Newtonin algoritmi perustuu Taylorin sarjasta (1.28) johdet-tuun lineaariseen approksimaatioon

$$f(x+h) \approx l(h) := f(x) + J_f(x)h.$$

Tällöin

$$\begin{aligned} F(x+h) &\approx L(h) := \frac{1}{2}l(h)^T l(h) \\ &= \frac{1}{2}f(x)^T f(x) + h^T J_f(x)^T f(x) + \frac{1}{2}h^T J_f(x)^T J_f(x)h \\ &= F(x) + h^T J_f(x)^T f(x) + \frac{1}{2}h^T J_f(x)^T J_f(x)h. \end{aligned}$$

Nyt *Gaussin-Newtonin askel* h_{GN} pisteessä x on sellainen, että

$$(1.30) \quad h_{GN} = \arg \min_{h \in \mathbb{R}^n} L(h).$$

Lasku osoittaa, että gradientti ja Hessen matriisi ovat

$$\nabla L(h) = J_f(x)^T f(x) + J_f(x)^T J_f(x)h, \quad H_L(h) = J_f(x)^T J_f(x).$$

Nähdään helposti, että $\nabla L(h)|_{h=0} = \nabla F(x)$. Matriisi $J_f(x)^T J_f(x)$ on positiivisesti semi-definiitti. Jos lisäksi $J_f(x)^T J_f(x)$ on kääntövä, niin tällöin funktiolla $L(h)$ on yksikäsit-teinen minimi h_{GN} . Tämä minimi löydetään gradientin nollakohdasta, ts. se on yhtälön $\nabla L(h) = 0$ ratkaisu. Askel h_{GN} pienentää funktion $F(x)$ arvoa approksimaation mielessä, sillä

$$\begin{aligned} F(x+h_{GN}) - F(x) &\approx h_{GN}^T \nabla F(x) = h_{GN}^T (J_f(x)^T f(x)) \\ &= -h_{GN}^T (J_f(x)^T J_f(x)h_{GN}) < 0. \end{aligned}$$

Voimme valita uudeksi pisteeksi $x' := x + \alpha h_{GN}$, missä $\alpha := 1$ tai tehokkaammin sen arvo voidaan hakea *viivahaululla*²³ (eng. *line search*), ts.

$$\alpha := \arg \min_{a \in \mathbb{R}_+} F(x + ah_{GN}).$$

²¹Carl Friedrich Gauss (1777–1855) oli saksalainen matemaatikko, tähtitieteilijä ja fyysikko, jota voi-daan pitää yhtenä luonnontieteiden ja matematiikan tärkeimmistä kehittäjistä kautta aikain.

²²Sir Isaac Newton (1642–1727) oli englantilainen luonnontieteilijä, joka loi mm. matemaattisen perus-tan fysiikan tutkimukselle ja differentiaalilaskennan perusteet.

²³Implementaatio on esitetty lähteessä [16, Luku 2.3].

Tämän jälkeen toistamme menettelyä, kunnes asettamamme lopetusehto täyttyy.

Nyt olemme valmiita esittämään *Levenbergin-Marquardtin*²⁴ algoritmin (*LMA*). Olkoon tilanne, kuten Gaussin-Newtonin algoritmista, mutta asetetaan *Levenbergin-Marquardtin askel* h_{LM} pisteessä x siten, että

$$(1.31) \quad (J_f(x)^T J_f(x) + \mu I) h_{LM} = -J_f(x)^T f(x),$$

missä $\mu \geq 0$ on *damping-parametri* (vrt. Tikhonovin regularisaatioon, luku 1.3, ja Gaussin lineaarisen mallin MAP-estimaattiin, luku 4.1).

Jokaisella $\mu > 0$ matriisi $J_f(x)^T J_f(x) + \mu I$ on positiivisesti definiitti, joten askel h_{LM} on yksikäsitteisesti määrätty. Jos μ on suuri, niin

$$h_{LM} \approx -\frac{1}{\mu} J_f(x)^T f(x) = -\frac{1}{\mu} \nabla F(x).$$

Jos μ on todella pieni, niin tällöin $h_{LM} \approx h_{GN}$. Siis damping-parametri μ vaikuttaa sekä askeleen suuntaan että pituuteen, ja meidän ei nyt tarvitse löytää optimaalista askeleen pituutta viivahaulla.

Olkoon alkuarvo $x := x_0 \in \mathbb{R}^n$ lukittu. Tällöin lähteen [16, s. 25–27] mukaan damping-parametrin alkuarvo $\mu := \mu_0$ tulisi valita siten, että

$$(1.32) \quad \mu_0 := \tau \cdot \max \left\{ \text{diag}(J_f(x)^T J_f(x)) \Big|_{x=x_0} \right\},$$

missä $\tau \in \mathbb{R}_+$ on käyttäjän valitsema vakio²⁵. Kutsumme askeleen h_{LM} *hyötysuhteeksi* (eng. *gain ratio*) pisteessä x lukua

$$(1.33) \quad \theta(h_{LM}) := \frac{F(x) - F(x + h_{LM})}{L(0) - L(h_{LM})},$$

missä

$$\begin{aligned} L(0) - L(h_{LM}) &= -h_{LM}^T J_f(x)^T f(x) - \frac{1}{2} h_{LM}^T J_f(x)^T J_f(x) h_{LM} \\ &= -\frac{1}{2} h_{LM}^T (2J_f(x)^T f(x) + (J_f(x)^T J_f(x) + \mu I - \mu I) h_{LM}) \\ &= \frac{1}{2} h_{LM}^T (\mu h_{LM} - J_f(x)^T f(x)) > 0. \end{aligned}$$

Jos $\theta(h_{LM})$ on suuri, niin tällöin $L(h_{LM}) \approx F(x + h_{LM})$, jolloin voimme pienentää damping-parametrin μ arvoa seuraavaa iterointikierrosta varten. Tällöin menetelmä on lähempänä Gaussin-Newtonin askelta, joka toimii tehokkaasti todellisen ratkaisun x_{true} lähistöllä. Jos $\theta(h_{LM})$ on lähellä nollaa, tai jopa negatiivinen, niin $L(h_{LM})$ on huono approksimaatio funktiolle $F(x + h_{LM})$. Tällöin voimme kasvattaa damping-parametrin μ arvoa seuraavaa iterointikierrosta varten, jolloin menetelmän askelpituus pienenee ja askel on vahvemmin vektorin $-\nabla F(x)$ suuntainen²⁶. Jos $\theta(h_{LM}) \leq 0$ eli $F(x) \leq F(x + h_{LM})$,

²⁴Kenneth Levenberg (1919–1973) ja Donald Marquardt (1929–1997) olivat amerikkalaisia tilastotieteilijöitä, jotka tunnetaan erityisesti Levenbergin-Marquardtin algoritmista. Menetelmän löysi ensimmäisenä Levenberg (1944) ja myöhemmin Marquardt (1963).

²⁵Peukalosaäntö: Mitä lähempänä lokaalia minimiä alkuarvaus x_0 on, niin sitä pienempi τ tulisi valita; esimerkiksi $\tau \in [10^{-6}, 1]$. Menetelmä ei ole kuitenkaan erityisen herkkä parametrin τ valinnalle.

²⁶Vektori $-\nabla F(x)$ on aina approksimaation mielessä vähenemisen suuntainen, mutta kuitenkin tämä ei välttämättä ole optimaalinen vähenemissuunta.

niin tällöin pysymme seuraavalla iteraatiolla alkuperäisessä pisteessä x , ja jos $\theta(h_{LM}) > 0$ eli $F(x) > F(x + h_{LM})$, niin tällöin liikumme seuraavalla iteraatiolla pisteeseen $x' := x + h_{LM}$.

Jotta algoritmi pystähtyisi, tulee sille antaa ainakin yksi *lopetusehto*. Yksi hyvä vaihtoehto on valita sellainen $\varepsilon \in \mathbb{R}_+$, että jos

$$(1.34) \quad \|x_{i+1} - x_i\| \leq \varepsilon(\|x_i\| + \varepsilon),$$

niin algoritmi pysähtyy. Tämä tarkoittaa oleellisesti, että arvojen muutos lähtöjoukon puolella on riittävän vähäistä. Vaihtoehtoinen lopetusehto on valita sellainen $\delta \in \mathbb{R}_+$, että jos

$$(1.35) \quad \|J_f(x_i)^T f(x_i)\| \leq \delta,$$

niin algoritmi pysähtyy. Tämä tarkoittaa oleellisesti, että ollaan saavutettu sellainen x_i , jolle $\nabla F(x_i) \approx 0$ eli olemme päätyneet riittävän lähelle lokaalia minimiä. Myös näitä molempia voidaan käyttää yhdessä.

Levenbergin-Marquardtinkin algoritmin yksi implementaatio on annettu lähteessä [16, s. 27, Algorithm 3.16]. Menetelmiin liittyviä suppenemisehtoja on todistettu lähteessä [19, Luku 10.2], emmekä esitä niitä tämän työn yhteydessä. Lisäksi lähde sisältää suppenemismenopeuteen liittyviä tarkasteluja. Iteratiivisen ratkaisijan suppenemismenopeus voidaan luokitella *virhejonon* $(x_{\text{true}} - x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ perusteella esimerkiksi *lineaariseksi*, *neliölliseksi* tai *superlineaariseksi*. Menetelmistä on myös useita erilaisia, mahdollisesti jollakin kriteerillä parempia, variaatiota (ks. esim. [16, Luvut 3.3–3.6]).

Olkoon nyt tarkasteltavana epälineaarinen inversio-ongelma, missä $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ on jatkuvasti kahdesti derivoituva suora malli ja y saatu mittausta. Voimme tällöin minimoida funktionaalin

$$(1.36) \quad F(s) := \frac{1}{2} \|f(s) - y\|^2$$

Levenbergin-Marquardtinkin algoritmilla. Tämä minimi on inversio-ongelman numeerinen ratkaisu.

Ei kuitenkaan ole takeita, että ratkaisu on vakaa kohinan suhteen, tai edes siitä, että ratkaisu suppenee pienimmän minimin ympäristöön. Lisäksi derivaattojen laskeminen voidaan joutua tekemään numeerisesti. Ratkaisuna näihin ongelmiin tulemme luvussa 4 esittämään tilastollisen lähestymistavan. Lisäksi käytännössä vaikeuksia voi aiheuttaa numeeriseen laskentaan liittyvät ongelmat, joista onneksi monet ovat korjattavissa erilaisilla skaalausmenettelyillä.

2 Mittateoreettisia esitietoja

Tässä luvussa esitämme mittateorian perusteita, mutta ennakkotiedot aiheesta auttavat lukijaa huomattavasti. Luvussa 3 sovellamme mittateorian tuloksia todennäköisysteoriaan, mitä puolestaan tarvitsemme tilastollisten inversio-ongelmien kanssa luvussa 4. Koska haluamme esittää monia tärkeitä tuloksia, niin emme pysty käsittelemään jokaista yksityiskohtaa. Lukija voi tekstissä annettujen viitteiden ohjeistamana tutustua puuttuviin yksityiskohtiin lähteistä *Real and Complex Analysis* [24, Rudin], *Real Analysis and Probability* [2, Ash] ja *Probability Essentials* [20, Protter ja Jacod].

2.1 Mittateorian perusteita

Esittelemme tässä alaluvussa mitallisuuden, mitan ja mittaintegraalin käsitteet.

Määritelmä 2.1. Kokoelma \mathcal{A} joukon Ω osajoukkoja on σ -algebra, jos

- 1) $\Omega \in \mathcal{A}$,
- 2) $A \in \mathcal{A} \Rightarrow A^c \in \mathcal{A}$ ja
- 3) jos $A_n \in \mathcal{A}$ jokaisella $n \in \mathbb{N}$ ja $A = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} A_n$, niin $A \in \mathcal{A}$.

Tällöin kutsumme paria (Ω, \mathcal{A}) *mittalliseksi avaruudeksi* ja kokoelman \mathcal{A} alkioita *mittallisiksi* joukossa Ω .

Lause 2.2. Olkoon \mathcal{C} kokoelma joukon Ω osajoukkoja. Tällöin on olemassa joukon Ω pienin σ -algebra $\sigma(\mathcal{C})$, jolle $\mathcal{C} \subseteq \sigma(\mathcal{C})$.

Todistus. Vrt. [24, s. 12–13]. Olkoon Θ niiden joukon Ω σ -algebroiden kokoelma, joihin \mathcal{C} sisältyy. Koska $\mathcal{P}(\Omega) \in \Theta^{27}$, niin $\Theta \neq \emptyset$. Olkoon

$$(2.1) \quad \sigma(\mathcal{C}) := \bigcap_{M \in \Theta} M.$$

Selvästi $\mathcal{C} \subseteq \sigma(\mathcal{C})$ ja $\sigma(\mathcal{C}) \subseteq M$ jokaisella $M \in \Theta$.

Osoitetaan vielä, että $\sigma(\mathcal{C})$ on σ -algebra. Jos $A_i \in \sigma(\mathcal{C})$, $i \in \mathbb{N}$, ja $M \in \Theta$, niin jokaisella $i \in \mathbb{N}$ pätee $A_i \in M$. Siis $\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in M$, sillä M on σ -algebra. Koska $\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in M$ jokaisella $M \in \Theta$, niin joukon $\sigma(\mathcal{C})$ määritelmän mukaan $\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in \sigma(\mathcal{C})$. Ehdot 1–2 voidaan osoittaa vastaavasti. \square

Määritelmä 2.3. Olkoon (X, \mathcal{T}) topologinen avaruus. Tällöin kutsumme avaruuden X *Borel²⁸-joukoiksi* kokoelman \mathcal{T} generoiman σ -algebran alkioita. Lisäksi merkitään avaruuden X Borel-joukkojen kokoelmaa $\mathcal{B}(X)$.

Jos muuta ei mainita oletamme, että avaruudessa \mathbb{R}^d σ -algebran muodostaa Borel-joukkojen kokoelma $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) := \sigma(\mathcal{O})$, missä \mathcal{O} on euklidisen metriikan generoimien avoimien joukkojen kokoelma.

Esimerkki 2.4. Olkoon X topologinen avaruus. Borel-joukkojen kokoelma on suppein σ -algebra, johon kuuluu jokainen avaruuden X suljettu joukko.

²⁷Merkitään joukon X *potenssijoukkoa* $\mathcal{P}(X)$.

²⁸Émile Borel (1871–1956) oli ranskalainen matemaatikko ja poliitikko, joka teki perustavanlaatuisia tutkimusta mittateorian ja todennäköisyyden alalla

Todistus. Koska σ -algebra on komplementtien suhteen suljettu, niin jokainen suljettu joukko kuuluu Borel-joukkojen kokoelmaan. Olkoon Θ sellainen σ -algebra, että siihen sisältyy kaikki avaruuden X suljetut joukot. Nyt siihen sisältyy myös näiden komplementit eli avoimet joukot. Tällöin siis $\mathcal{B}(X) \subseteq \Theta$, josta väite seuraa. \square

Esimerkki 2.5 (Reaalilukujen Borel-joukot). Reaalilukujen Borel-joukkojen kokoelman $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ generoi puoliavoimet välit $] - \infty, a]$, missä $a \in \mathbb{Q}$.

Todistus. Vrt. [20, s. 8]. Olkoon \mathcal{C} kaikkien avointen välien kokoelma. Koska kaikki avoimet joukot voidaan esittää avointen välien numeroituvana yhdisteenä, niin $\sigma(\mathcal{C}) = \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Olkoon \mathcal{D} kaikkien muotoa $] - \infty, a]$ olevien joukkojen kokoelma, missä $a \in \mathbb{Q}$. Olkoon $]a, b[\in \mathcal{C}$. Olkoon nyt $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sellainen laskeva jono rationaalilukuja, joka suppenee kohti lukua a ja vastaavasti $(b_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sellainen kasvava jono rationaalilukuja, joka suppenee kohti lukua b , mutta $b_n < b$ jokaisella $n \in \mathbb{N}$. Tällöin

$$]a, b[= \bigcup_{i=0}^{\infty}]a_n, b_n] = \bigcup_{n=1}^{\infty} (] - \infty, b_n] \cap] - \infty, a_n]^c).$$

Siis $\mathcal{C} \subseteq \sigma(\mathcal{D})$, joten $\sigma(\mathcal{C}) \subseteq \sigma(\mathcal{D})$. Koska \mathcal{D} koostuu vain suljetuista joukoista, niin edellisen esimerkin perusteella $\sigma(\mathcal{D}) \subseteq \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Näin ollen olemme päättelleet, että

$$\mathcal{B}(\mathbb{R}) \subseteq \sigma(\mathcal{C}) \subseteq \sigma(\mathcal{D}) \subseteq \mathcal{B}(\mathbb{R}).$$

Siis $\sigma(\mathcal{D}) = \mathcal{B}(\mathbb{R})$. \square

Tietysti kokoelman $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ generoi useat erilaiset joukkoperheet. Näin ollen edellinen menettely ei ole yksikäsitteinen tapa konstruoida reaalisia Borel-joukkoja. \triangle

Määritelmä 2.6. Olkoon (Ω, \mathcal{A}) mitallinen avaruus. Kutsumme funktiota $\mu : \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$ *positiiviseksi mitaksi*, jos se on *numeroituvasti additiivinen*, ts. kun $A_i \in \mathcal{A}$, niin

$$(2.2) \quad \mu \left(\bigcup_{i=0}^{\infty} A_i \right) = \sum_{i=0}^{\infty} \mu(A_i).$$

Lisäksi sanomme, että mitallinen avaruus on *mitta-avaruus* $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$, kun sen mitallisissa joukoissa on määritelty positiivinen mitta. Vaihtamalla maalijoukoksi $\text{Ran}(\mu) = \mathbb{C}$ saamme ns. *kompleksimitan*. Mittaa kutsutaan *Borelin mitaksi*, jos se on määritelty avaruuden Borel-joukoissa.

Määritelmä 2.7. Olkoon (X, \mathcal{X}, μ) mitta-avaruus. Tällöin sen sanotaan olevan σ -*äärellinen*, jos $X = \bigcup_{i=0}^{\infty} X_i$ ja jokaisella $i \in \mathbb{N}$ pätee $\mu(X_i) < \infty$.

Määritelmä 2.8. Olkoot (Ω, \mathcal{A}) ja (E, \mathcal{E}) mitallisia avaruuksia. Tällöin kuvaus $f : \Omega \rightarrow E$ on *mitallinen*, jos jokaisella $A \in \mathcal{E}$ pätee $f^{-1}(A) \in \mathcal{A}$. Lisäksi sanotaan, että f on *Borel-mitallinen*, jos \mathcal{E} on topologisen avaruuden Borel-joukkojen kokoelma.

Huomautus 2.9. Mitallisten kuvauksien määritelmä on analoginen jatkuvien kuvausten topologisen määritelmän kanssa.

Esimerkki 2.10. Olkoot (E, \mathcal{E}) , (F, \mathcal{F}) ja (G, \mathcal{G}) mitallisia avaruuksia. Tällöin jos $X : E \rightarrow F$ ja $Y : F \rightarrow G$ ovat mitallisia kuvauksia, niin $Y \circ X : E \rightarrow G$ on mitallinen kuvaus.

Todistus. Olkoon $A \in \mathcal{G}$. Nyt

$$(Y \circ X)^{-1}(A) = X^{-1}(Y^{-1}(A)),$$

joten kuvauksen Y mitallisuuden perusteella $Y^{-1}(A) \in \mathcal{F}$, ja edelleen kuvauksen X mitallisuuden perusteella $X^{-1}(Y^{-1}(A)) \in \mathcal{E}$. \square

Esimerkki 2.11. Olkoot (E, \mathcal{U}) ja (F, \mathcal{V}) topologisia avaruuksia. Tällöin jokainen jatkuva funktio $X : E \rightarrow F$ on mitallinen, kun mitalliset joukot ovat avaruuksien Borel-joukot.

Todistus. Vrt. [20, s. 49]. Riittää osoittaa, että $X^{-1}(\mathcal{V}) \subseteq \sigma(\mathcal{U})$, sillä \mathcal{V} generoi Borel-joukot avaruudessa F (ks. [20, Theorem 8.1, s. 47]). Jos $O \in \mathcal{V}$, niin tällöin $X^{-1}(O)$ on avoin eli $X^{-1}(O) \in \mathcal{U}$. Siis $X^{-1}(O) \in \sigma(\mathcal{U})$. \square

Lemma 2.12. Jos f ja g ovat mitallisia kuvauksia $\Omega \rightarrow [\infty, -\infty]$, niin tällöin $\max\{f, g\}$ ja $\min\{f, g\}$ ovat mitallisia.

Todistus. Ks. [24, s. 15]. \square

Olkoon f mitallinen kuvaus, kuten edellisessä lauseessa. Tällöin kuvauksen f *positiiviosa* on $f^+ := \max\{f, 0\}$ ja *negatiiviosa* on $f^- := -\min\{f, 0\}$. Edellisen lauseen perusteella tiedämme, että f^+ ja f^- ovat mitallisia, ja lisäksi ne ovat epänegatiivisia. Voimme myös kirjoittaa $f = f^+ - f^-$ ja $|f| = f^+ + f^-$.

Määritelmä 2.13. Funktio $f : A \rightarrow B$ on *yksinkertainen*, jos $\text{Ran}(f)$ on äärellinen.

Määritelmä 2.14. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus ja olkoon s mitallinen yksinkertainen funktio $\Omega \rightarrow [0, \infty]$, ts.

$$(2.3) \quad s := \sum_{i=1}^n \alpha_i 1_{A_i},$$

missä $A_i = \{x \mid s(x) = \alpha_i\}$ ovat mitallisia sekä pareittain erillisiä ja 1_A on joukon A indikaattorifunktio (vrt. [24, s. 16]). Jos $A \in \mathcal{A}$, niin määritellään

$$(2.4) \quad \int_A s(x) \mu(dx) := \sum_{i=1}^n \alpha_i \mu(A_i \cap A).$$

Jos $f : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ on mitallinen funktio ja $A \in \mathcal{A}$, niin määritellään

$$(2.5) \quad \int_A f(x) \mu(dx) := \sup_{s \in S_{\leq f}} \int_A s(x) \mu(dx),$$

missä

$$S_{\leq f} := \{s : \Omega \rightarrow [0, \infty] \mid s \text{ on mitallinen ja yksinkertainen, } 0 \leq s \leq f\}.$$

Tätä integraalia kutsutaan funktion f *mittaintegraaliksi* mitan μ suhteen (yli joukon A).

Huomautus 2.15. Mittaintegraalia merkitään myös lyhyesti $\int_A f d\mu$.

Lause 2.16 (Lebesguen²⁹ monotonisen suppenemisen lause). *Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Tällöin jos $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sellainen jono mitallisia funktioita $\Omega \rightarrow [0, \infty]$, että jokaisella $x \in \Omega$*

²⁹Henri Lebesgue (1875–1941) oli ranskalainen matemaatikko, joka tunnetaan modernin mitta- ja integraaliteorian keksijänä.

1) $0 \leq f_1(x) \leq f_2(x) \leq \dots \leq \infty$ ja

2) $f_n(x) \rightarrow f(x)$, kun $n \rightarrow \infty$,

niin f on mitallinen, ja

$$(2.6) \quad \int_{\Omega} f_n(x) \mu(dx) \rightarrow \int_{\Omega} f(x) \mu(dx),$$

kun $n \rightarrow \infty$.

Todistus. Ks. [24, s. 22–23]. Todistus tehdään mukailien mittaintegraalin konstruktiota ja käyttäen funktiojonon supremumiin liittyviä mitallisuustuloksia. \square

Määritelmä 2.17. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Tällöin määritellään, että $L^1(\mu)$ on niiden kaikkien kompleksimitallisten funktioiden $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ joukko, joille

$$(2.7) \quad \int_{\Omega} |f|(x) \mu(dx) < \infty.$$

Sanomme, että $L^1(\mu)$ on μ -integroituviin funktioiden joukko ja sen alkiot μ -integroituvia funktioita.

Seuraavan määritelmän avulla voimme laajentaa mittaintegraalin käsitteen koskemaan kaikkia μ -integroituvia funktioita.

Määritelmä 2.18. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus ja $f = u + iv \in L^1(\mu)$, missä u ja v ovat mitallisia funktioita $\Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Tällöin jos $f \in L^1(\mu)$ ja $A \in \mathcal{A}$, niin määritellään

$$(2.8) \quad \int_A f(x) \mu(dx) := \int_A u^+ d\mu - \int_A u^- d\mu + i \int_A v^+ d\mu - i \int_A v^- d\mu.$$

Tätäkin integraalia kutsutaan *mittaintegraaliksi* mitan μ suhteen (yli joukon A).

Huomautus 2.19. Edellisessä määritelmässä oletuksesta $f \in L^1(\mu)$ seuraa, että jokainen neljästä oikeanpuoleisesta integraalista tulee olla äärellisiä, sillä itseisarvon $|f|$ integraali on äärellinen, ja se on luonnollisesti osiensa yläraja. Määritelmä kattaa myös reaalfunktiot asettamalla $v = 0$.

Määritelmä 2.20. Mitta-avaruuden joukkoja $A \in \mathcal{A}$ kutsutaan *nollamitalliseksi*, jos $\mu(A) = 0$. Mittaa μ kutsutaan *täydelliseksi*, jos jokaisen nollamitallisen joukon osajoukko on nollamitallinen.

On tunnettua, että jokainen mitta-avaruus voidaan laajentaa täydelliseksi (ks. [24, s. 29]) eli *täydellistä*.

Määritelmä 2.21. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Tällöin ominaisuus P pätee *melkein kaikkialla* joukossa A , jos se pätee joukon A jokaisella osajoukolla, joka ei ole nollamitallinen.

Esimerkki 2.22. Vrt. [24, s. 28]. Olkoon f ja g mitallisia kuvauksia $\Omega \rightarrow E$. Tällöin $f = g$ melkein kaikkialla joukossa Ω , jos

$$(2.9) \quad \mu(\{x \mid f(x) \neq g(x)\}) = 0.$$

Jos $f = g$ melkein kaikkialla joukossa Ω , niin tällöin

$$\int_A f(x)\mu(dx) = \int_A g(x)\mu(dx),$$

missä $A \in \mathcal{A}$. △

Esitetään Fubinin-Tonellin lause tämän alaluvun päätteeksi. Olkoon $f : X \times Y \rightarrow B$ kuvaus ja $A \subseteq X \times Y$. Jos $x_0 \in X$ ja $y_0 \in Y$, niin merkitään $f_{x_0}(y) := f(x_0, y)$ ja $f_{y_0}(x) := f(x, y_0)$ sekä $A_{x_0} := \{y \mid (x_0, y) \in A\}$ ja $A_{y_0} := \{x \mid (x, y_0) \in A\}$. Nämä merkinnät eivät ole täysin tulkinnattomia, vaan alaindeksin merkitys täytyy päätellä kontekstista. Kun (X, \mathcal{X}, μ) ja $(Y, \mathcal{Y}, \lambda)$ ovat mitta-avaruuksia, niin merkitään niiden *tuloavaruutta*

$$(2.10) \quad (X \times Y, \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}),$$

missä $\mathcal{X} \otimes \mathcal{Y} = \sigma(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. Edelleen voimme tästä induktiolla yleistää tuloavaruuden käsitteen.

Lemma 2.23. *Olkoot (X, \mathcal{X}) , (Y, \mathcal{Y}) ja (E, \mathcal{E}) mitallisia avaruuksia. Jos f on mitallinen kuvaus $X \times Y \rightarrow E$, niin*

- a) jokaisella $x \in X$ funktio $f_x : Y \rightarrow E$ on mitallinen;
- b) jokaisella $y \in Y$ funktio $f_y : X \rightarrow E$ on mitallinen.

Todistus. Vrt. [24, s. 147–148]. Todistetaan kohta a). Olkoon $Q = \{(x, y) \mid f(x, y) \in \mathcal{E}\}$. Nyt oletuksen perusteella $Q \in \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}$, joten $Q_x = \{y \mid f_x(y) \in \mathcal{E}\} \in \mathcal{Y}$ (ks. [24, s. 146, 7.2 Theorem]), mikä todistaa väitteen. Kohta b) todistetaan vastaavasti. □

Lemma 2.24. *Olkoot (X, \mathcal{X}, μ) ja $(Y, \mathcal{Y}, \lambda)$ σ -äärellisiä mitta-avaruuksia. Olkoon $Q \in \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}$. Tällöin jos $\varphi(x) = \lambda(Q_x)$ ja $\psi(y) = \mu(Q_y)$ jokaisella $x \in X$ ja $y \in Y$, niin φ ja ψ ovat mitallisia sekä*

$$(2.11) \quad \int_X \varphi(x)\mu(dx) = \int_Y \psi(y)\lambda(dy).$$

Todistus. Todistuksessa käytetään Lebesguen monotonisen suppenemisen lausetta, mutta myös *Lebesguen dominoitun suppenemisen lausetta* (eng. *Lebesgue's dominated convergence theorem*). Täydellisen todistuksen esittäminen vaatisi melko kattavan pohjatyon, joten emme esitä sitä tässä, vaan annamme lähdeviitteen [24, s. 148–149]. □

Määritelmä 2.25. Olkoon edellisen lemmän oletukset voimassa. Tällöin määrittelemme, että

$$(2.12) \quad (\mu \times \lambda)(Q) := \int_X \lambda(Q_x)\mu(dx) = \int_Y \mu(Q_y)\lambda(dy).$$

Tätä mitta kutsutaan *tulomitaksi*.

Lause 2.26 (Fubinin³⁰-Tonellin³¹ lause). *Olkoot (X, \mathcal{X}, μ) ja $(Y, \mathcal{Y}, \lambda)$ σ -äärellisiä mitta-avaruuksia sekä f avaruuden $(X \times Y, \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y})$ mitallinen funktio. Tällöin*

a) jos $0 \leq f \leq \infty$ ja

$$(2.13) \quad F_X(x) = \int_Y f_x(y) \lambda(dy), \quad F_Y(y) = \int_X f_y(x) \mu(dx),$$

niin F_Y ja F_X ovat mitallisia sekä

$$(2.14) \quad \int_X F_X(x) \mu(dx) = \int_{X \times Y} f(x, y) (\mu \times \lambda)(d(x, y)) = \int_Y F_Y(y) \lambda(dy)$$

eli

$$(2.15) \quad \int_X \int_Y f(x, y) \lambda(dy) \mu(dx) = \int_Y \int_X f(x, y) \mu(dx) \lambda(dy).$$

b) Jos f on kompleksifunktio ja jos

$$(2.16) \quad F_X^*(x) = \int_Y |f|_x(y) \lambda(dy), \quad \int_X F_X^*(x) \mu(dx) < \infty,$$

niin $f \in L^1(\mu \times \lambda)$.

c) Jos $f \in L^1(\mu \times \lambda)$, niin $f_x \in L^1(\lambda)$ on melkein kaikkialla joukossa X (vastaavasti funktiolle f_y). Jos F_X ja F_Y ovat, kuten kaavassa (2.13), niin $F_X \in L^1(\mu)$ on määritelty melkein kaikkialla joukossa X (vastaavasti funktiolle F_Y).

Todistus. Väite on lemmojen 2.23 ja 2.24 seuraus. Todistuksen yksityiskohdat voi katsoa lähteestä [24, s. 150–151]. □

2.2 Dynkinin ja Carathéodoryn laajennuslauseet

Tässä aluvussa esittelemme Dynkinin ja Carathéodoryn laajennuslauseet. Carathéodoryn laajennuslause on tärkeä mittateoreettinen tulos. Emme esitä siihen liittyvää todistusta, mutta sitä varten vaadittava pohjatyö ei olisi paljonkaan tässä esitettävää laajempi. Terminologiassa olemme noudattaneet osittain teosta *Foundations of Modern Probability* [12, Kallenberg].

Määritelmä 2.27. Kokoelma \mathcal{A} joukon Ω osajoukkoja on π -*systemi*, jos $A, B \in \mathcal{A} \Rightarrow A \cap B \in \mathcal{A}$.

Määritelmä 2.28. Kokoelma \mathcal{A} joukon Ω osajoukkoja on λ -*systemi* (myös *Dynkinin*³² *luokka*), jos

1) $\Omega \in \mathcal{A}$,

³⁰Guido Fubini (1879–1943) oli italialainen matemaatikko, joka tunnetaan parhaiten *Fubinin lauseen* todistuksesta.

³¹Leonida Tonelli (1885–1946) oli italialainen matemaatikko, joka tunnetaan parhaiten *Fubinin lausetta* koskevasta tutkimuksesta.

³²Eugene Dynkin on Neuvostoliitossa 1924 syntynyt, nykyisin amerikkalainen, matemaatikko, joka on tutkinut erityisesti todennäköisyysteoriaa ja algebraa.

- 2) $A, B \in \mathcal{A}$ ja $A \subseteq B \Rightarrow B \setminus A \in \mathcal{A}$, ja
 3) $(A_i)_{i \in \mathbb{N}} \in \mathcal{A}$ ja $A_i \subseteq A_{i+1} \Rightarrow \bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \in \mathcal{A}$.

Määritelmä 2.29. Kokoelma \mathcal{A} joukon Ω osajoukkoja on *algebra*, jos

- 1) $\Omega \in \mathcal{A}$,
 2) $A \in \mathcal{A} \Rightarrow A^c \in \mathcal{A}$ ja
 3) $A, B \in \mathcal{A} \Rightarrow A \cup B \in \mathcal{A}$.

Kutsumme funktiota $\mu : \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$ *esimitaksi*, jos se on numeroituvasti additiivinen. Sanomme, että esimita on *σ -äärellinen*, jos on olemassa joukot $A_i \in \mathcal{A}$, joille $\Omega = \bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i$ ja $\mu(A_i) < \infty$ (vrt. määritelmä 2.7).

Huomautus 2.30. Merkitään kokoelman \mathcal{A} sisältävää pienintä π -systeemiä $\pi(\mathcal{A})$, λ -systeemiä $\lambda(\mathcal{A})$ ja algebraa $\sigma(\mathcal{A})$. Näiden olemassaolo ja konstruktio voidaan esittää samaan tapaan kuin σ -algebralle.

Lemma 2.31. *Olkoon \mathcal{A} avaruuden Ω kokoelma. Tällöin se on σ -algebra, jos ja vain jos se on sekä π -systeemi että λ -systeemi.*

Todistus. On selvää, että σ -algebra toteuttaa π - ja λ -systeemien ominaisuudet.

Oletetaan sitten, että \mathcal{A} on sekä π - että λ -systeemi. Olkoon $A, B \in \mathcal{A}$. Tällöin $A \setminus B \in \mathcal{A}$, koska se on λ -systeemi. Myös

$$A \cup B = (A^c \cap B^c)^c \in \mathcal{A}.$$

Olkoon $(A_i)_{i \in \mathbb{N}} \in \mathcal{A}$. Koska äärelliset yhdisteet kuuluvat myös joukkoon \mathcal{A} , niin $B_n := \bigcup_{k \leq n} A_k \in \mathcal{A}$. Lisäksi nouseva ketju B_n suppenee kohti joukkoa $\bigcup_{i=0}^{\infty} A_n = \bigcup_{i=1}^{\infty} B_n \in \mathcal{A}$. Myös selvästi $\Omega \in \mathcal{A}$. Siis \mathcal{A} toteuttaa σ -algebran ominaisuudet. \square

Herää tietysti kysymyksiä, kuten onko $\pi(\lambda(\mathcal{A}))$ λ -systeemi? Tai onko $\lambda(\pi(\mathcal{A}))$ π -systeemi? Esitetään seuraavaksi kaksi muotoilua Dynkinin π - λ -lemmalle, joka vastaa jälkimmäiseen kysymykseen. Tulos tunnetaan englanniksi myös nimellä *Monotone Class Theorem*. Tässä todistusten jäsentelyä ja lauseiden esitystä on pyritty selkeyttämään.

Lause 2.32 (Dynkinin π - λ -lemma, 1. muotoilu). *Olkoon \mathcal{A} π -systeemi avaruudessa Ω . Tällöin $\lambda(\mathcal{A}) = \sigma(\mathcal{A})$.*

Todistus. Vrt. [20, s. 36]. Edellisen lemmän vuoksi riittää osoittaa, että $\lambda(\mathcal{A})$ on π -systeemi. Olkoon

$$X := \{ B \in \lambda(\mathcal{A}) \mid \forall I \in \mathcal{A} : B \cap I \in \lambda(\mathcal{A}) \}$$

ja

$$Y := \{ B \in \lambda(\mathcal{A}) \mid \forall I \in \lambda(\mathcal{A}) : B \cap I \in \lambda(\mathcal{A}) \}.$$

Nähdään heti, että $\mathcal{A} \subseteq X$, Y on π -systeemi ja $Y \subseteq X$.

Pyritään osoittamaan, että

$$\lambda(\mathcal{A}) = X = Y = \sigma(\mathcal{A}).$$

Oletetaan aluksi, että X olisi λ -systeemi. Tällöin koska $\mathcal{A} \subseteq X$, niin $\lambda(\mathcal{A}) \subseteq X$. Näin ollen joukon X määritelmän perusteella täytyy olla, että $\lambda(\mathcal{A}) = X$. Koska $X = \lambda(\mathcal{A})$,

niin kokoelmien määritelmien perusteella $\mathcal{A} \subseteq Y$. Kuten alla osoitetaan kokoelmalle X , voimme osoittaa, että Y on λ -systeemi. Siis $Y = \lambda(\mathcal{A})$. Toisaalta määritelmänsä perusteella Y on π -systeemi. Siis kokoelmien minimaalisuuden vuoksi $\lambda(\mathcal{A}) = Y = \sigma(\mathcal{A})$, mikä todistaa väitteen.

Osoitetaan lopuksi, että X on todella λ -systeemi. Selvästi $\Omega \in X$. Olkoon sitten $A, B \in X$, $A \subseteq B$ ja $I \in \mathcal{A}$. Tällöin

$$(B \setminus A) \cap I = (B \cap I) \setminus (A \cap I).$$

Koska $B \cap I \in \lambda(\mathcal{A})$ ja $A \cap I \in \lambda(\mathcal{A})$, niin $(B \cap I) \setminus (A \cap I) \in \lambda(\mathcal{A})$. Siis $B \setminus A \in X$. Olkoon $(A_i)_{i \in \mathbb{N}} \in X$ nouseva ketju joka suppenee kohti joukkoa A . Tällöin kaikille $I \in \mathcal{A}$ pätee $A_n \cap I \in \lambda(\mathcal{A})$ ja $A_n \cap I$ suppenee kohti joukkoa $A \cap I$. Siis $A \cap I \in \lambda(\mathcal{A})$, joten $A \in X$. Olemme näin osoittaneet, että X on λ -systeemi. \square

Esimerkki 2.33 (Dynkinin π - λ -lemma, 2. muotoilu). Vrt. [2, s. 19, 1.3.9 Monotone Class Theorem]. Olkoon \mathcal{C} π -systeemi ja \mathcal{D} λ -systeemi avaruudessa Ω . Tällöin $\mathcal{C} \subseteq \mathcal{D} \Rightarrow \sigma(\mathcal{C}) \subseteq \mathcal{D}$. Lisäksi edellinen on yhtäpitävää lauseen 2.32 kanssa.

Todistus. Esitämme todistuksen vedoten edelliseen lauseeseen.

Edellisen lauseen perusteella $\lambda(\mathcal{C}) = \sigma(\mathcal{C})$. Koska $\mathcal{C} \subseteq \mathcal{D}$, niin $\lambda(\mathcal{C}) \subseteq \mathcal{D}$. Siis olemme päättäneet, että $\sigma(\mathcal{C}) = \lambda(\mathcal{C}) \subseteq \mathcal{D}$.

Todistetaan sitten jälkimmäinen väite. Oletetaan, että \mathcal{A} on π -systeemi. Tällöin oletuksen perusteella $\sigma(\mathcal{A}) \subseteq \lambda(\mathcal{A})$. Nyt λ -systeemin minimaalisuudesta ja lemmasta 2.31 seuraa, että $\lambda(\mathcal{A}) \subseteq \sigma(\mathcal{A})$. Siis $\lambda(\mathcal{A}) = \sigma(\mathcal{A})$. Näin olemme saaneet todistettua yhtäpitävyyden. \square

Seuraus 2.34 (Dynkinin laajennuslause). *Olkoon \mathcal{A} π -systeemi. Olkoot P ja P' kaksi todennäköisyyksmittaa³³ mitallisessa avaruudessa $(\Omega, \sigma(\mathcal{A}))$. Jos $P(A) = P'(A)$ jokaisella $A \in \mathcal{A}$, niin $P(A) = P'(A)$ jokaisella $A \in \sigma(\mathcal{A})$.*

Todistus. Vrt. [20, s. 36–37]. Olkoon

$$\mathcal{D} := \{ A \in \sigma(\mathcal{A}) \mid P(A) = P'(A) \}.$$

Osoitamme, että \mathcal{D} on λ -systeemi, jolloin Dynkinin lemmän perusteella $\mathcal{D} = \sigma(\mathcal{A})$. Selvästi $\Omega \in \mathcal{D}$. Olkoon $A, B \in \mathcal{D}$ ja $A \subseteq B$. Tällöin

$$P(B \setminus A) = P(B) - P(A) = P'(B) - P'(A) = P'(B \setminus A).$$

Siis $B \setminus A \in \mathcal{D}$. Olkoon $(A_i)_{i \in \mathbb{N}} \in \mathcal{D}$ nouseva ketju, joka suppenee kohti joukkoa A . Nyt

$$P(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(A_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} P'(A_n) = P'(A),$$

joten $A \in \mathcal{D}$. Siis \mathcal{D} on λ -systeemi, jolle $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{D}$. Nyt Dynkinin lemmän mukaan $\sigma(\mathcal{A}) = \lambda(\mathcal{A}) \subseteq \mathcal{D}$, mikä todistaa väitteen. \square

Lause 2.35 (Carathéodoryn³⁴ laajennuslause). *Olkoon \mathcal{A} avaruuden Ω algebra ja μ' σ -äärellinen esimitta kokoelmassa \mathcal{A} . Tällöin on olemassa yksikäsitteinen esimitan μ' laajennus μ σ -algebraan $\sigma(\mathcal{A})$.*

Todistus. Ks. [2, s. 19–20]. Todistus tehdään käyttäen *ulkomitan* käsitettä (ks. esim. [2, s. 16–19]). Rajataksemme työn laajuutta, emme käsittele todistusta. \square

³³Todennäköisyyksimittoja käsitellään tarkemmin vasta luvussa 3, mutta olemme päättäneet esittää Dynkinin laajennuslauseen jo tässä yhteydessä.

³⁴Constantin Carathéodory (1873–1950) oli kreikkalainen matemaatikko, joka tutki erityisesti mitta-teoriaa ja sen sovelluksia.

2.3 Lebesguen-Stieltjesin mitta

Kehitämme tässä alaluvussa Lebesguen-Stieltjesin mittojen teoriaa, joka on hyödyllistä erityisesti todennäköisyysvektorien kanssa työskennellessä. Aloitamme esittämällä tärkeimmät määritelmät ja tarpeelliset merkinnät, jonka jälkeen todistamme perustuloksia. Alaluvun lopuksi esitämme hahmotelman Lebesguen mitan konstruktiosta.

Kun $a \in \mathbb{R}^d$, niin merkitään, että $a = (a_1, \dots, a_d)$. Olkoon $a, b \in \mathbb{R}^d$. Tällöin määrittelemme seuraavat merkinnät

$$(2.17) \quad]a, b] := \{x \in \mathbb{R}^d \mid \forall i \in \{1, \dots, d\} : a_i < x_i \leq b_i\},$$

$$(2.18) \quad]a, -\infty[:= \{x \in \mathbb{R}^d \mid \forall i \in \{1, \dots, d\} : x_i > a_i\}$$

ja

$$(2.19) \quad]-\infty, b] := \{x \in \mathbb{R}^d \mid \forall i \in \{1, \dots, d\} : x_i \leq b_i\}.$$

Lisäksi määritellään $a \leq b$, jos ja vain jos $\forall i \in \{1, \dots, d\} : a_i \leq b_i$. Määrittelemme myös muut välit ja järjestysrelaatiot vastaavasti.

Määritelmä 2.36. Avaruuden \mathbb{R}^d Borelin mitta μ kutsutaan *Lebesguen-Stieltjesin*³⁵ *mitaksi*, jos $\mu(I) < \infty$ aina, kun I on muotoa (2.17) oleva rajoitettu väli.

Määritelmä 2.37. Olkoon $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ funktio ja $i \in \{1, \dots, d\}$. Tällöin määritellään

$$(2.20) \quad \begin{aligned} \Delta_i^{a,b} f(x_1, \dots, x_d) \\ := f(x_1, \dots, x_{i-1}, b, x_{i+1}, \dots, x_d) - f(x_1, \dots, x_{i-1}, a, x_{i+1}, \dots, x_d) \end{aligned}$$

jokaisella $a, b \in \mathbb{R}$. Kutsumme operaattoria Δ_i *differenssioperaattoriksi* koordinaatin i suhteen.

Lause 2.38. *Olkoon μ avaruuden \mathbb{R}^d äärellinen Borelin mitta ja*

$$(2.21) \quad F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto \mu(]-\infty, x]).$$

Tällöin jos $a \leq b$, niin

$$(2.22) \quad \mu(]a, b]) = \Delta_1^{a_1, b_1} \dots \Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d),$$

missä

$$(2.23) \quad \Delta_1^{a_1, b_1} \dots \Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d) = F_0 - F_1 + F_2 - F_3 + \dots + (-1)^d F_d$$

ja F_i on summa jokaisesta $C(n, i)$:stä termistä, jotka ovat muotoa $F(c_1, \dots, c_d)$, missä $c_k = a_k$ tasan i :llä indeksillä ja $c_k = b_k$ lopuilla $d - i$:llä indeksillä.

³⁵Thomas Stieltjes (1856–1894) oli hollantilainen matemaatikko, joka tunnetaan erityisesti nimeään kantavista käsitteistä mittateoriassa. Hän tutki myös momenttifunktioita ja ketjumurtolukuja.

Todistus. Vrt. [2, s. 27–28]. Väitteen kaikki osat voidaan todistaa suoralla laskulla. Aluksi

$$\begin{aligned}\Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d) &= F(x_1, \dots, x_{d-1}, b_d) - F(x_1, \dots, x_{d-1}, a_d) \\ &= \mu(\{\omega \mid \omega_1 \leq x_1, \dots, \omega_{d-1} \leq x_{d-1}, \omega_d \leq b_d\}) \\ &\quad - \mu(\{\omega \mid \omega_1 \leq x_1, \dots, \omega_{d-1} \leq x_{d-1}, \omega_d \leq a_d\}) \\ &= \mu(\{\omega \mid \omega_1 \leq x_1, \dots, \omega_{d-1} \leq x_{d-1}, a_d < \omega_d \leq b_d\}).\end{aligned}$$

Jatketaan laskemista vastaavasti ja saamme lopulta, että

$$\Delta_1^{a_1, b_1} \dots \Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d) = \mu(\{\omega \mid \forall i \in \{1, \dots, d\} : a_i < \omega_i \leq b_i\}).$$

Siis

$$\mu([a, b]) = \Delta_1^{a_1, b_1} \dots \Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d).$$

Saamme jälkimmäisen väitteen suoraan soveltamalla differenssin määritelmää d kertaa.

Siis

$$\Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d) = F(x_1, \dots, x_{d-1}, b_d) - F(x_1, \dots, x_{d-1}, a_d).$$

Tästä voidaan edelleen laskea, että

$$\begin{aligned}\Delta_{d-1}^{a_{d-1}, b_{d-1}} \Delta_d^{a_d, b_d} F(x_1, \dots, x_d) &= \Delta_{d-1}^{a_{d-1}, b_{d-1}} (F(x_1, \dots, x_{d-1}, b_d) - F(x_1, \dots, x_{d-1}, a_d)) \\ &= \Delta_{d-1}^{a_{d-1}, b_{d-1}} F(x_1, \dots, x_{d-1}, b_d) - \Delta_{d-1}^{a_{d-1}, b_{d-1}} F(x_1, \dots, x_{d-1}, a_d) \\ &= F(x_1, \dots, b_{d-1}, b_d) - F(x_1, \dots, a_{d-1}, b_d) \\ &\quad - F(x_1, \dots, b_{d-1}, a_d) + F(x_1, \dots, a_{d-1}, a_d).\end{aligned}$$

Vastaavasti jatkamalla saamme lopulta kaavan (2.23). □

Kun $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ja $a, b \in \mathbb{R}^d$, $a \leq b$, niin määritellään $f([a, b])$, kuten kaavassa (2.22).

Siis

$$(2.24) \quad f([a, b]) := \Delta_1^{a_1, b_1} \dots \Delta_d^{a_d, b_d} f(x_1, \dots, x_d).$$

Huomaa, että f laajennettiin joukkofunktioksi, ts. $f([a, b]) \in \mathbb{R}$, ja merkintä $f([a, b])$ ei tarkoita tässä kontekstissa välin $a \leq b$ kuvajoukkoa.

Määritelmä 2.39. Olkoon $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ funktio.

- a) Funktion f sanotaan olevan *kasvava*, jos $f([a, b]) \geq 0$ aina, kun $a \leq b$.
- b) Funktion f sanotaan olevan *oikealta jatkuva pisteessä* $x \in \mathbb{R}^d$, jos jokaiselle jonolle $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$, jolle $x_{i+1} \geq x_i$ ja $x_i \rightarrow x$, pätee $f(x_i) \rightarrow f(x)$. Sanomme, että f on *oikealta jatkuva*, jos se on oikealta jatkuva jokaisessa pisteessä $x \in \mathbb{R}^d$.
- c) Funktiota f kutsutaan *kertymäfunktiksi*, jos se on kasvava ja oikealta jatkuva.

Lause 2.40. Olkoon $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ kertymäfunktio. Määritellään, että

$$(2.25) \quad \mu([a, b]) := F([a, b]), \quad a, b \in \mathbb{R}^d, \quad a \leq b.$$

Tällöin funktiolla μ on olemassa yksikäsitteinen laajennus, joka on Lebesguen-Stieltjesin mitta avaruudessa \mathbb{R}^d .

Todistushahmotelma. Ks. [2, s. 24–25 ja 29–31]. Täsmällinen todistus olisi pitkä ja tekninen, joten esitetään todistuksesta vain hahmotelma.

Olkoon \mathcal{A} kaikkien muotoa (2.17) olevien puoliavointen välien joukko. Nyt on mahdollista laajentaa μ algebran $a(\mathcal{A})$ esimitaksi. Lisäksi μ on σ -äärellinen, sillä voimme pilkkoa avaruuden \mathbb{R}^d sopiviin osiin, joita on numeroituvasti ja joiden mitat ovat oletuksen perusteella äärellisiä.

Edellisten huomioiden nojalla Carathéodoryn laajennuslauseen oletukset ovat voimassa, joten mitalla μ on yksikäsitteinen laajennus avaruuteen $\sigma(a(\mathcal{A})) = \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Lisäksi μ on Lebesgue-Stieltjesin mitta, koska $\mu([a, b]) = F(b) - F(a) < \infty$, $a, b \in \mathbb{R}^d$, $a \leq b$. \square

Nyt voimme konstruoida Lebesgue mitan seuraavasti (vrt. [2, s. 26 ja 31]). Olkoon F_1, \dots, F_d kertymäfunktioita \mathbb{R} :ssä ja määritellään $F(x_1, \dots, x_d) := F_1(x_1) \cdots F_d(x_d)$. Nyt F on kertymäfunktio \mathbb{R}^d :ssä, sillä

$$(2.26) \quad F([a, b]) = \prod_{i=1}^d (F_i(b_i) - F_i(a_i)).$$

Erityisesti kun $F_i(x_i) = x_i$ jokaisella $i \in \{1, \dots, d\}$, niin

$$(2.27) \quad F(x_1, \dots, x_d) = x_1 \cdots x_d$$

ja asetetaan

$$(2.28) \quad \mu([a, b]) = F([a, b]) = \prod_{i=1}^d (b_i - a_i).$$

Tämä vastaa luonnollista tilavuutta, ja kutsumme Lebesgue-Stieltjesin mittaa μ Lebesgue mitaksi $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$:ssä. Merkitsemme mitta-avaruuden $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), \mu)$ *täydellistymää* $(\mathbb{R}^d, \mathcal{M}_d, m_d)$, missä kutsumme kokoelmaa \mathcal{M}_d *Lebesgue-mitallisten joukkojen kokoelmaksi* ja mittaa m_d *Lebesgue mitaksi* avaruudessa \mathbb{R}^d . Lebesgue mitta käyttäytyy, kuten ”intuitiivinen geometrinen mitta” (ks. esim. [24, s. 51–54]).

Kuten konstruktiosta nähdään, Borel-joukot $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ kuuluvat aidosti Lebesgue-mitallisten joukkojen kokoelmaan \mathcal{M}_d , mutta kuitenkin kaikki euklidisen avaruuden \mathbb{R}^d osajoukot eivät ole Lebesgue-mitallisia (ks. hahmotelma [24, s. 54–55]). Lebesgue mitta on tietysti myös Borelin mitta, kun asetamme $\mu := m_d \upharpoonright \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Merkitään kuitenkin jatkossa rajoittumaa myös symbolilla m_d .

Huomautus 2.41. Tapauksessa $d = 1$ merkitsemme lyhyesti $m = m_1$ ja $\mathcal{M} = \mathcal{M}_d$.

Integroinnin yhteydessä on tavanomaista merkitä Lebesgue mittaa symbolilla x tai jos haluamme korostaa dimensiota, niin x^d . Siis merkitään

$$(2.29) \quad \int_A f(x) dx := \int_A f(x) m_d(dx),$$

missä $A \in \mathcal{M}_d$ ja $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ on mitallinen kuvaus. Kutsumme tätä mittaintegraalin erikoistapausta *Lebesgue integraaliksi*.

Esimerkki 2.42. Avaruus $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), m_d)$ on σ -äärellinen, sillä \mathbb{R}^d voidaan esittää äärellismittaisten suljettujen kuulien numeroituvana yhdisteenä. Siis myös $(\mathbb{R}^d, \mathcal{M}_d, m_d)$ on σ -äärellinen. \triangle

Kun $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ ja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ on jatkuva funktio, niin Riemannin³⁶ ja Lebesguen integraalit yli välin $[a, b]$ ovat yhtä suuria. Vastaava pätee itseasiassa kaikille Riemann-integroituville funktioille. Lebesguen mitta voidaan konstruoida eri tavoilla. Käsittelemämme konstruktio perustuu ulkomittaan ja Carathéodoryn laajennuslauseen. Esimerkiksi lähteessä [24, Luku 2] konstruktio perustuu Hausdorffin³⁷ avaruuksiin ja yhteen monista Rieszin esityslauseista.

2.4 Lebesguen osituslause ja Radonin-Nikodymin lause

Määritelmä 2.43. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Olkoon $0 < p < \infty$ ja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ mitallinen funktio. Tällöin

$$(2.30) \quad \|f\|_p := \left(\int_{\Omega} |f|^p(x) \mu(dx) \right)^{1/p}.$$

Olkoon $L^p(\mu)$ niiden funktioiden joukko, joille $\|f\|_p < \infty$. Kutsumme operaatiota $\|f\|_p$ funktion f L^p -normiksi. Edelleen määritellään, että $L^\infty(\mu)$ koostuu kaikista niistä funktioista, joille $\|f\|_\infty < \infty$, missä

$$(2.31) \quad \|f\|_\infty := \inf \{ y \in \mathbb{R} \mid |f(x)| \leq y \text{ melkein kaikilla } x \in \Omega \}.$$

Kutsumme normia $\|f\|_\infty$ *supremum-normiksi*.

Huomautus 2.44. Edellinen määritelmä sopii yhteen jo aiemmin määrittelemämme $L^1(\mu)$ -käsitteen kanssa. Jos m on Lebesguen mitta joukossa \mathbb{R}^d , niin tällöin merkitsemme $L^p(\mathbb{R}^d) := L^p(m)$.

Huomautus 2.45. Jos $f \in L^\infty(\mu)$, niin f on rajoitettu melkein kaikkialla joukossa Ω .

Lemma 2.46. *Mittaintegraali on lineaarinen operaattori $L^1(\mu) \rightarrow \mathbb{C}$.*

Todistus. Ks. [24, s. 26–27]. Todistus tehdään mittaintegraalin konstruktiota mukailen. \square

Lause 2.47 (Rieszin-Fischerin³⁸ lause). *Olkoon μ positiivinen mitta mitallisessa avaruudessa (Ω, \mathcal{A}) ja $1 \leq p \leq \infty$. Tällöin $L^p(\mu)$ on täydellinen metrinen avaruus, missä metriikan indusoi L^p -normi ja alkiot samaistetaan ekvivalenssiluokkiinsa*

$$[f] := \{g \in L^p(\mu) \mid f = g \text{ melkein kaikkialla joukossa } \Omega \}.$$

Todistus. Lause on Minkowskin³⁹ epäyhtälön ja Fatoun⁴⁰ lemmän seuraus. Yksityiskohtia varten ks. [24, s. 69–70]. \square

³⁶Bernhard Riemann (1826–1866) oli saksalainen matemaatikko, joka kehitti merkittävästi analyysiä ja differentiaaligeometriaa. Hänet tunnetaan myös kuuluisasta *Riemannin hypoteesista* ja *zeta-funktiosta*, jotka liittyvät analyyttiseen lukuteoriaan.

³⁷Felix Hausdorff (1862–1942) oli saksalainen matemaatikko, joka oli yksi ensimmäisistä ”topologeista”. Hän teki tärkeää tutkimusta myös monilla muilla matematiikan aloilla.

³⁸Ernst Fischer (1875–1954) oli itävaltalainen matemaatikko, joka tutki etenkin Hilbertin avaruuksia.

³⁹Hermann Minkowski (1864–1909) oli liettualais-saksalainen matemaatikko, joka tutki erityisesti geometriaa, lukuteoriaa ja matemaattista fysiikkaa.

⁴⁰Pierre Fatou (1878–1929) oli ranskalainen matemaatikko ja astronomi, joka teki tärkeitä löytöjä analyysin alalla.

Seuraus 2.48. Olkoon μ positiivinen mitta mitallisessa avaruudessa (Ω, \mathcal{A}) . Tällöin $L^2(\mu)$ on Hilbertin avaruus, kun määrittelemme sisätuloksi

$$(2.32) \quad \langle f, g \rangle := \int_{\Omega} f \bar{g} d\mu$$

ja alkiot samaistetaan ekvivalenssiluokkiinsa $[f]$.

Todistus. Vrt. [24, s. 81]. Koska $p = 2$ on itsensä konjugaatti eksponentti, ts. $\frac{1}{p} + \frac{1}{p} = 1$, niin $f\bar{g} \in L^1(\mu)$ (ks. esim. [24, s. 67–68, 3.8 Theorem]). Siis sisätulo on hyvinmääritelty. Lisäksi yllä oleva määritelmä toteuttaa sisätulon aksioomat. Rieszin-Fischerin lauseen perusteella tiedetään, että $L^p(\mu)$ on täydellinen metrinen avaruus jokaisella $1 \leq p \leq \infty$, kun μ on positiivinen mitta ja metriikan indusoi L^p -normi. \square

Lemma 2.49. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Olkoon $f : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ mitallinen, ja

$$F(A) = \int_A f(x) \mu(dx),$$

kun $A \in \mathcal{A}$. Tällöin $F : \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$ on mitta, ja

$$(2.33) \quad \int_{\Omega} g(x) F(dx) = \int_{\Omega} (gf)(x) \mu(dx)$$

jokaisella mitallisella $g : X \rightarrow [0, \infty]$.

Todistus. Ks. [24, s. 24–25]. Väite on Lebesguen monotonisen suppenemisen lauseen 2.16 seuraus. Todistus tehdään mittaintegraalin konstruktioita mukaillen. \square

Lemma 2.50. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus.

a) Olkoon $f : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ mitallinen, $A \in \mathcal{A}$ ja $\int_A f(x) \mu(dx) = 0$. Tällöin $f = 0$ melkein kaikkialla joukossa A .

b) Olkoon $f \in L^1(\mu)$ ja $\int_A f(x) \mu(dx) = 0$ jokaisella $A \in \mathcal{A}$. Tällöin $f = 0$ melkein kaikkialla joukossa Ω .

c) Olkoon $f \in L^1(\mu)$ ja

$$\left| \int_{\Omega} f(x) \mu(dx) \right| = \int_{\Omega} |f|(x) \mu(dx).$$

Tällöin on olemassa vakio $a \in \mathbb{R}$ siten, että $af = |f|$ melkein kaikkialla joukossa Ω .

Todistus. Ks. [24, s. 31]. \square

Lemma 2.51. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Oletetaan, että $\mu(\Omega) < \infty$, $f \in L^1(\mu)$, $S \subseteq \mathbb{C}$ on suljettu joukko, keskiarvot

$$(2.34) \quad A_E(f) := \frac{1}{\mu(E)} \int_E f(x) \mu(dx)$$

kuuluvat joukkoon S jokaisella $E \in \mathcal{A}$ ja $\mu(E) > 0$. Tällöin $f(x) \in S$ melkein kaikkialla joukossa X .

Todistus. Ks. [24, s. 31–32]. □

Määritelmä 2.52. Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mitta-avaruus. Sanomme, että mitta λ on *absoluuttisesti jatkuva mitan μ suhteen*, jos jokaisella $A \in \mathcal{A}$ pätee $\mu(A) = 0 \Rightarrow \lambda(A) = 0$. Kirjoitamme tällöin, että $\lambda \ll \mu$.

Määritelmä 2.53. Olkoon (Ω, \mathcal{A}) mitallinen avaruus sekä μ ja λ sen mittoja.

- a) Sanomme, että mitta λ on *keskittynyt* joukkoon $A \in \mathcal{A}$, jos kaikille $E \in \mathcal{A}$ pätee $\mu(E) = \mu(A \cap E)$.
- b) Sanomme, että mitat μ ja λ ovat *toisensa poissulkevat*, $\mu \perp \lambda$, jos on olemassa sellaiset erilliset joukot $A, B \in \mathcal{A}$, että μ on keskittynyt joukkoon A ja λ on keskittynyt joukkoon B .

Yllä määritellyt käsitteet toteuttavat useita käyttökelpoisia sääntöjä (ks. esim. [24, s. 129, 6.8 Proposition]).

Lause 2.54 (Lebesguen osituslause, Radonin⁴¹-Nikodymin⁴² lause). *Olkoon $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ sellainen mitta-avaruus, jossa μ on positiivinen σ -äärellinen mitta, ja olkoon $\lambda : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$ kompleksimitta. Tällöin*

- 1) *Lebesguen osituslause: On olemassa yksikäsitteinen pari (λ_a, λ_s) kokoelman \mathcal{A} kompleksi-mittoa, joille*

$$(2.35) \quad \lambda = \lambda_a + \lambda_s, \quad \lambda_a \ll \mu, \quad \lambda_s \perp \mu.$$

Lisäksi jos λ on positiivinen ja äärellinen, niin tällöin ovat myös λ_a ja λ_s .

- 2) *Radonin-Nikodymin lause: On olemassa yksikäsitteinen $h \in L^1(\mu)$, jolle*

$$(2.36) \quad \lambda_a(E) = \int_E h(x) \mu(dx)$$

jokaisella $E \in \mathcal{A}$.

Todistus. Vrt. [24, s. 129–131]. Esitämme todistuksen vain positiivisten ja rajoitettujen mittojen erikoistapauksessa. Tästä todistus on yleistettävissä käyttäen *positiivi- ja negatiivivariaatioiden* käsitteitä, joita emme halua käsitellä rajataksemme laajuutta (ks. hahmotelma [24, s. 132]).

Todistetaan molemmat väitteet yhdellä kertaa hyödyntäen Hilbertin avaruuksien tuloksia ja tietoa, että mittaintegraali on lineaarikuvaus. Tämän todistuksen on löytänyt von Neumann⁴³ 1936.

Radonin-Nikodymin lauseessa olevan h :n yksikäsitteisyys seuraa lemmasta 2.50. Jos h ja h' molemmat toteuttasivat Radonin-Nikodymin lauseen vaatimuksen, niin melkein kaikkialla joukossa Ω pätee $h - h' = 0$ eli $h = h'$.

⁴¹Johann Radon (1887–1956) oli itävaltalainen matemaatikko, jonka nimeä kantavat monet matemaattisen analyysin tulokset.

⁴²Otto Nikodym (1887–1974) oli puolalainen matemaatikko, joka tunnetaan parhaiten mittateorian tutkimuksesta.

⁴³John von Neumann (1903–1957) oli unkarilaissyntyinen, mutta Amerikassa elänyt matemaatikko, joka kehitti useita matematiikan sovellusaloja eteenpäin.

Olkoon $\theta = \lambda + \mu$. Tällöin, tekemämme todistuksen rajauksen vuoksi, myöskin θ on positiivinen ja rajoitettu mitta. Mittojen summan perusteella

$$(2.37) \quad \int_{\Omega} f(x)\theta(dx) = \int_{\Omega} f(x)\lambda(dx) + \int_{\Omega} f(x)\mu(dx),$$

kun $f = 1_E$. Edelleen tästä seuraa, että identiteetti pätee, jos f on yksinkertainen mitallinen funktio. Lopulta saamme mittaintegraalin määritelmien 2.14 ja 2.18 perusteella, että identiteetti (2.37) pätee kaikille mitallisille funktioille f .

Merkitään integraaleja jatkossa lyhyesti, jotta esitys pysyy helpommin luettavana. Olkoon $f \in L^2(\theta)$. Nyt Schwarzin epäyhtälön 1.11 mukaan

$$\left| \int_{\Omega} f d\lambda \right| \leq \int_{\Omega} |f| d\lambda \leq \int_{\Omega} |f| d\theta \leq \left(\int_{\Omega} |f|^2 d\theta \right)^{1/2} (\theta(\Omega))^{1/2},$$

sillä $\theta(\Omega) < \infty$. Siis $L^2(\theta) \subseteq L^1(\theta)$, ja kuvaus

$$f \mapsto \int_{\Omega} f d\mu$$

on rajoitettu lineaarinen operaattori $L^2(\theta) \rightarrow \mathbb{C}$.

Koska lemmän 2.48 mukaisella sisätulolla varustettuna $L^2(\theta)$ on Hilbertin avaruus, niin Rieszin esityslauseen 1.13 perusteella on olemassa yksikäsitteinen $g \in L^2(\theta)$, jolle

$$(2.38) \quad \int_{\Omega} f d\lambda = \langle f, \bar{g} \rangle = \int_{\Omega} f g d\theta$$

jokaisella $f \in L^2(\theta)$ (konjugointi on bijektio).

Olkoon $E \in \mathcal{A}$ sellainen, että $\theta(E) > 0$ ja $f = 1_E$. Tällöin kaavassa (2.38) vasen puoli on $\lambda(E)$, ja koska $0 \leq \lambda \leq \theta$, niin saamme

$$(2.39) \quad 0 \leq \frac{1}{\theta(E)} \int_E g d\theta = \frac{\lambda(E)}{\theta(E)} \leq 1.$$

Siis lemmän 2.51 ja kaavan (2.39) mukaan $g(x) \in [0, 1]$ melkein jokaisella x (mitan θ suhteen). Voidaan siis yhtä hyvin olettaa, että $0 \leq g(x) \leq 1$ jokaisella $x \in \Omega$.

Kirjoitetaan nyt identiteetin (2.37) avulla kaava (2.38) muotoon

$$(2.40) \quad \int_{\Omega} (1 - g) f d\lambda = \int_{\Omega} f g d\mu,$$

missä $f \in L^2(\theta)$. Määritellään sitten seuraavat joukot

$$(2.41) \quad A := \{x \mid 0 \leq g(x) < 1\}, \quad B := \{x \mid g(x) = 1\},$$

ja mitat

$$\lambda_a = \lambda(A \cap E), \quad \lambda_s(E) = \lambda(B \cap E),$$

jokaisella $E \in \mathcal{A}$.

Valitsemalla kaavassa (2.40), että $f = 1_B$, saamme $\mu(B) = 0$. Siis $\lambda_s \perp \mu$, sillä λ_s on keskittynyt joukkoon B ja μ joukkoon A .

Koska $0 \leq g \leq 1$, niin voimme valita kaavassa (2.40), että $f = (1 + g + \cdots + g^n)1_E$, missä $n \in \mathbb{Z}_+$ ja $E \in \mathcal{A}$. Jolloin saamme, että

$$(2.42) \quad \int_E (1 - g^{n+1}) d\lambda = \int_E g(1 + g + \cdots + g^n) d\mu.$$

Kun $x \in B$, niin $1 - g^{n+1}(x) = 0$, ja kun $x \in A$, niin $g^{n+1}(x) \rightarrow 0$ monotonisesti. Siis kaavan (2.42) vasen puoli suppenee kohti $\lambda(A \cap E) = \lambda_a(E)$, kun $n \rightarrow \infty$.

Integroitava funktio $g(1 + g + \cdots + g^n)$ kasvaa monotonisesti kohti epänegatiivista mitallista rajafunktiota h . Täten Lebesguen monotonisen suppenemisen lauseen 2.16 perusteella kaavan (2.42) oikea puoli suppenee kohti $\int_E h d\mu$, kun $n \rightarrow \infty$. Valitsemalla $E = \Omega$, saamme $h \in L^1(\mu)$, sillä $\lambda_a(X) < \infty$. Siis olemme todistaneet Radonin-Nikodymin lauseen. Edelleen voimme päätellä, että $\lambda_a \ll \mu$. \square

Määritelmä 2.55. Edellisen lauseen paria (λ_a, λ_s) kutsutaan mitan λ *Lebesguen ositukseksi* mitan μ suhteen.

Määritelmä 2.56. Edellisen lauseen funktiota $d\lambda_a/d\mu := h$ kutsutaan mitan λ_a *Radonin-Nikodymin derivaataksi* mitan μ suhteen.

Esimerkki 2.57. Olkoon $F \ll \mu$. Tällöin jos $F = F_a + F_s$, $F_a \ll \mu$ ja $F_s \perp \mu$, niin $F - F_a = F_s \ll \mu$. Edelleen koska $F_s \ll \mu$ ja $F_s \perp \mu$, niin $F_s = 0$. \triangle

Esimerkin perusteella voimme aina löytää absoluuttisesti jatkuvalle mitalle F Radonin-Nikodymin derivaatan f , missä integrointi tapahtuu σ -äärellisen mitan μ suhteen. Käänteisesti aiemman lemmän mukaan jokaista positiivista mitallista funktiota f vastaa mitta F . Sopivilla oletuksilla absoluuttiselle jatkuvuudelle on olemassa myös ”tutumpi” ε - δ -määritelmä, kuten seuraava lause osoittaa.

Lause 2.58. *Olkoon (Ω, \mathcal{A}) mitallinen avaruus ja $\mu : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ sekä $\lambda : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ sen mittoja, joista μ on positiivinen. Tällöin seuraavat ehdot ovat yhtäpitäviä:*

- a) $\lambda \ll \mu$.
- b) Jokaisella $\varepsilon > 0$ on olemassa $\delta > 0$ siten, että $|\lambda(E)| < \varepsilon$ jokaisella $E \in \mathcal{A}$, jolle $\mu(E) < \delta$.

Todistus. Ks. [24, s. 132–133]. \square

3 Todennäköisyysteoriaa

Tässä alaluvussa käsittelemme tilastollisissa inversio-ongelmissa tarvittavaa, mutta yleistä, todennäköisyysteoriaa. Todennäköisyyslaskenta on keskeinen työkalu useilla matemaatiikan sovellusaloilla, sillä se luo teoreettisen perustan tilastolliselle päättelylle. Todennäköisyyslaskenta tapahtuu matemaattisessa struktuurissa, jota kutsutaan todennäköisyssavaruudeksi. Tämän taas voi nähdä yleisemmän mittateorian erikoistapauksena. Käytännössä todennäköisyyksien avulla pyritään arvioimaan epävarmuuksia, jotka voivat johtua monenlaisista lähteistä.

Pääasiallisena lähteenä olemme käyttäneet teoksia *Real Analysis and Probability* [2, Ash], joka käsittelee todennäköisyysteoriaa yleisen mittateorian pohjalta, ja *Probability Essentials* [20, Protter ja Jacod], jossa mittateoria esitetään hieman naivimmin pelkästään todennäköisyyslaskennan tarpeisiin.

3.1 Todennäköisyysjakaumat

Esitämme nyt keskeisimmät määritelmät ja tärkeimmät tulokset liittyen todennäköisyssavaruuksiin. Tavoitteenamme on tutustua tämän jälkeen tarkemmin ehdolliseen todennäköisyyteen.

Määritelmä 3.1. Olkoon Ω epätyhjä joukko. Kolmikko (Ω, \mathcal{A}, P) on *todennäköisyssavaruus*, jos \mathcal{A} on σ -algebra joukossa Ω ja $P : \mathcal{A} \rightarrow [0, 1]$ sen positiivinen mitta, jolle pätee lisäksi $P(\Omega) = 1$. Tällöin kutsumme joukkoa Ω *otosavaruudeksi* ja sen alkioita *alkeistapauksiksi*, kokoelman \mathcal{A} alkioita *tapahtumiksi* ja kuvausta P *todennäköisyydeksi* tai *todennäköisyysmitaksi*.

a) Jos lisäksi $X : \Omega \rightarrow E$ on mitallinen kuvaus johonkin mitalliseen avaruuteen (E, \mathcal{E}) , niin kutsumme sitä *satunnaismuuttujaksi*. Edelleen joukkofunktiota

$$(3.1) \quad P_X : E \rightarrow [0, 1], A \mapsto (P \circ X^{-1})(A)$$

kutsumme *satunnaismuuttujan X todennäköisyysjakaumaksi* tai *satunnaismuuttujan X indusoimaksi todennäköisyysmitaksi*.

b) Edelleen jos $(E, \mathcal{E}) = (\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$, niin kutsumme satunnaismuuttujaa X *satunnaisvektoriksi*. Jos $(E, \mathcal{E}) = (\mathbb{R}^\infty, \mathcal{B}(\mathbb{R}^\infty))$, niin kutsumme satunnaismuuttujaa X *satunnaisjonoksi* tai *-prosessiksi*.

Emme jatkossa yleensä erikseen korosta sitä, että joukossa Ω on määritelty todennäköisyssavaruus ja avaruuden \mathbb{R}^d mitalliset joukot ovat Borel-joukot $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Satunnaismuuttujia on tapana merkitä isoilla kirjaimilla X, Y, Z ja $X_i, i \in \mathbb{N}$.

Satunnaismuuttujan X todennäköisyysjakaumalle saadaan seuraavia esityksiä $P_X(A) = P(X^{-1}(A)) = P(\{\omega \mid X(\omega) \in A\})$. Käytetään myös hieman epätäsmällistä merkintää $P(X \in A) := P(\{\omega \mid X(\omega) \in A\})$.

Olkoon $\alpha_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, (a_1, \dots, a_{i-1}, a_i, a_{i+1}, \dots, a_d) \mapsto a_i$ ns. *koordinaattikuvaus*. Tällöin satunnaisvektorin $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ voi esittää yksikäsitteisesti muodossa

$$(3.2) \quad X = (X_1, \dots, X_d),$$

missä $X_i := \alpha_i \circ X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ovat satunnaismuuttujia.

Lause 3.2. Olkoon (E, \mathcal{E}) mitallinen avaruus ja $X : \Omega \rightarrow E$ satunnaismuuttuja. Tällöin $P_X : E \rightarrow [0, 1]$ on avaruuden (E, \mathcal{E}) todennäköisyysmitta.

Todistus. Vrt. [20, s. 50]. Selvästi $P_X(E) = P(X^{-1}(E)) = P(\Omega) = 1$. Koska mielivaltaiset käänteiskuvaukset kommutoivat yhdisteiden (ja leikkausten) suhteen, niin

$$(P \circ X^{-1}) \left(\bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \right) = P \left(\bigcup_{i \in \mathbb{N}} X^{-1}(A_i) \right) = \sum_{i \in \mathbb{N}} (P \circ X^{-1})(A_i),$$

kun $A_i \in E$ ovat mitallisia joukkoja jokaisella $i \in \mathbb{N}$ ja pareittain erillisiä. Siis P_X on todennäköisyysmitta. \square

Edellinen tulos on yksinkertainen, mutta sikäli mielenkiintoinen, että voimme tarvittaessa unohtaa joukon Ω konstruktion. Seuraavaksi esittelemme satunnaismuuttujan kertymäfunktion käsitteen ja sen perusominaisuudet.

Määritelmä 3.3. Olkoon $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ satunnaisvektori. Tällöin sen *kertymäfunktio* on kuvaus $F_X : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$,

$$(3.3) \quad F_X(x) := P_X([-\infty, x]) := P(\{\omega \mid X_i(\omega) \leq x_i, i = 1, \dots, n\}).$$

Kertymäfunktioita F kutsutaan myös satunnaismuuttujien X_1, \dots, X_d yhteisjakauman kertymäfunktioiksi.

Lause 3.4. Funktio $F : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ on kasvava, oikealta jatkuva ja

$$(3.4) \quad F(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \begin{cases} 1, & \text{kun } \forall i \in \{1, \dots, d\} : x_i \rightarrow \infty \\ 0, & \text{kun } \exists! i \in \{1, \dots, d\} : x_i \rightarrow -\infty \end{cases},$$

jos ja vain jos F on jonkin satunnaisvektorin $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ kertymäfunktio.

Todistus. Vrt. [2, s. 212]. Oletetaan aluksi, että F toteuttaa yllä annetut ehdot. Pyritään sitten konstruoimaan sopiva todennäköisyysavaruus (Ω, \mathcal{A}, P) ja satunnaismuuttuja $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$. Valitaan, että $\Omega = \mathbb{R}^d$, $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, P on kertymäfunktion F virittämä Lebesguen-Stieltjesin mitta, kuten lauseessa 2.40, ja $X : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ on identtinen kuvaus. Mitta P on aito todennäköisyys, sillä $F(x) \rightarrow 1$, kun $x \rightarrow \infty$ (kaikissa koordinaateissa). Nyt $P_X = P$ (sillä X on identtinen kuvaus ja $\Omega = \mathbb{R}^d$), joten

$$\begin{aligned} F_X(x) &= P_X([-\infty, x]) = P([-\infty, x]) \\ &= \lim_{a \rightarrow -\infty} P([a, x]) = \lim_{a \rightarrow -\infty} F([a, x]) \\ &= F(x) - \lim_{a \rightarrow -\infty} F(a) = F(x). \end{aligned}$$

Olkoon F nyt satunnaisvektorin $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ kertymäfunktio. Nyt P_X on Lebesguen-Stieltjesin mitta, joten lauseen 2.38 perusteella F on kasvava. Jos $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ on jono, jolle $x_{i+1} \geq x_i$ ja $x_i \rightarrow x$, niin $F(x_i) - F(x) = P_X([x, x_i]) \rightarrow 0$ eli F on oikealta jatkuva. Lisäksi

$$\lim_{x_i \rightarrow -\infty} F(x) = \lim_{x_i \rightarrow -\infty} P_X([-\infty, x]) = P(\emptyset) = 0$$

ja

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} P_X([-\infty, x]) = P_X(\mathbb{R}^d) = 1.$$

Siis kertymäfunktioilla F on halutut ominaisuudet. \square

Seuraavaksi siirrymme käsittelemään satunnaismuuttujan tiheysfunktiota. Tiheysfunktio on siitä erilainen kuin jakauma tai kertymäfunktio, että kaikilla satunnaismuuttujilla ei ole tiheysfunktiota. Määrittelemme tiheysfunktion ainoastaan Lebesguen mitan suhteen absoluuttisesti jatkuville jakaumille. Tilastotieteessä ja sovelluksissa työskennellään lähes aina sellaisten jakaumien kanssa, joilla on tiheysfunktiot.

Määritelmä 3.5. Olkoon satunnaisvektorin $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ indusoima todennäköisyysmitta P_X absoluuttisesti jatkuva Lebesguen mitan x suhteen. Tällöin satunnaisvektorin X tiheysfunktio on

$$(3.5) \quad f := \frac{dP_X}{dx}.$$

Lause 3.6. Tiheysfunktiolle f pätee $P_X(A) = \int_A f(x)dx$ jokaisella $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$.

Todistus. Radonin-Nikodymin lauseen 2.54 välitön seuraus. □

Lause 3.7. Olkoon $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ epänegatiivinen Borel-mitallinen funktio ja $\int_{\mathbb{R}^d} f(x)dx = 1$. Tällöin f on jonkin todennäköisyyden $P : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ tiheysfunktio. Lisäksi P on absoluuttisesti jatkuva Lebesguen mitan suhteen.

Todistus. Määritellään $P(A) := \int_A f(x)dx$, kun $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Nyt lemmän 2.49 mukaan P on mitta. Lisäksi oletuksen perusteella $\int_{\mathbb{R}^d} f(x)dx = 1$. Siis P on todennäköisyysmitta. Selvästi jos $x(A) = 0$, niin $P(A) = 0$ eli P on absoluuttisesti jatkuva Lebesguen mitan suhteen. □

Pidemmälle menevässä funktionaalianalyysissä voidaan tutkia ns. distribuutioita eli laajennettuja funktioita, joiden erikoistapaus todennäköisyysjakauman tiheysfunktio on.

Esimerkki 3.8 (Diracin⁴⁴ mitta). Vrt. [20, s. 42]. Osoitetaan, että kaikilla todennäköisyysmitoilla ei ole tiheysfunktiota. Olkoon $a \in \mathbb{R}$. Tällöin määritellään kaikki todennäköisyysmassa pisteeseen a seuraavasti. Jos $A \subseteq \mathbb{R}$, niin

$$(3.6) \quad \delta_a(A) = \begin{cases} 1, & \text{jos } a \in A \\ 0, & \text{jos } a \notin A \end{cases},$$

jonka kertymäfunktio on

$$(3.7) \quad H(x - a) = \begin{cases} 0, & \text{jos } x < a \\ 1, & \text{jos } x \geq a \end{cases}.$$

Funktiota $\delta_a(A)$ kutsutaan *Diracin mitaksi* ja funktiota $H(x)$ *Heavisiden*⁴⁵ *funktioksi*. Diracin mitalla ei ole olemassa tiheysfunktiota. Epätäsmällisesti voitaisiin sanoa, että *Diracin deltafunktio*

$$(3.8) \quad \delta_a(x) = \begin{cases} \infty, & \text{jos } x = a \\ 0, & \text{jos } x \neq a \end{cases}$$

vastaa Heavisiden kertymäfunktion tiheysfunktiota. △

⁴⁴Paul Dirac (1902–1984) oli englantilainen teoreettinen fyysikko, joka kehitti kvanttifysiikkaa ja sai Nobelin fysiikanpalkinnon 1933.

⁴⁵Oliver Heaviside (1850–1925) oli englantilainen itseoppinut insinööri, matemaatikko ja fyysikko. Hän tutki kehitti erityisesti analyyttisiä laskutekniikoita ja niiden sovelluksia fysiikkaan.

Esimerkki 3.9 (Log-normaalijakauma). Vrt. [20, s. 43]. Olkoon

$$(3.9) \quad g(x; \mu, \sigma^2) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad \mu \in \mathbb{R}, \sigma \in \mathbb{R}_+,$$

normaalijakauman tiheysfunktio. Tällöin funktio

$$(3.10) \quad f(x; \mu, \sigma^2) = \begin{cases} \frac{1}{x} g(\log(x); \mu, \sigma^2), & \text{jos } x > 0 \\ 0, & \text{jos } x \leq 0 \end{cases}$$

on *log-normaalin jakauman* tiheysfunktio parametrein μ ja σ .

Log-normaalijakauma on hyödyllinen monissa sovelluksissa, sillä se antaa suurelle positiivisuusehdon ja käyttäytyy kuitenkin siististi kaikkialla. Esimerkiksi useimmat sen tunnusluvut on helppo laskea. Normaalii ja log-normaalijakaumien välillä on helppo liikkua – jos X on otos normaalijakaumasta, niin tällöin $\exp(X)$ on otos log-normaalijakaumasta, ja toisaalta, jos Y on otos log-normaalijakaumasta, niin tällöin $\log(Y)$ on otos normaalijakaumasta. \triangle

Määritelmä 3.10. Satunnaismuuttujan $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ *odotusarvo* on

$$(3.11) \quad \mathbb{E}(X) := \int_{\Omega} X(x) P(dx),$$

jos integraali suppenee.

Lemma 3.11 (Muuttujanvaihtokaava). *Olkoon $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ satunnaisvektori ja $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ Borel-mitallinen funktio. Tällöin*

$$(3.12) \quad \mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) F_X(dx) := \int_{\mathbb{R}^d} g(x) P_X(dx),$$

jos jompikumpi puoli on olemassa.

Todistus. Käytetään odotusarvon alaindeksiä korostamaan eri avaruuksia. Määritelmän mukaan $\mathbb{E}_{\Omega}(g(X)) = \int_{\Omega} g(X)(x) P(dx)$, sillä $g(X) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ on satunnaismuuttuja. Toisaalta funktio $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ on satunnaismuuttuja todennäköisyysavaruudessa $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), P_X)$, joten määritelmän mukaan myöskin $\mathbb{E}_{\mathbb{R}^d}(g) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) P_X(dx)$. Väiteen mukaan

$$\int_{\Omega} g(X)(x) P(dx) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) (P \circ X^{-1})(dx),$$

mikä vaikuttaa intuitiivisesti uskottavalta. Varsinainen todistus tehdään mittaintegraalin konstruktioita mukailien (yksityiskohdat voi katsoa lähteestä [2, s. 223–225]). \square

Lause 3.12. *Olkoon kertymäfunktio $F : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ absoluuttisesti jatkuva Lebesguen mitan x suhteen ja $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ Borel-mitallinen funktio. Tällöin*

$$(3.13) \quad \mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x) f(x) dx,$$

missä f on kertymäfunktion F tiheysfunktio, jos odotusarvo on olemassa.

Todistus. Tarkastellaan asiaa mitta-avaruudessa $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), x)$. Oletetaan, että $\text{Im}(g) \subseteq [0, \infty[$. Nyt lemmän 2.49 mukaan $\int_{\mathbb{R}^d} g(x)F(dx) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x)f(x)dx$ jokaisella mitallisella $g : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, \infty]$, joten edellisen lemmän 3.11 perusteella saamme kaavan (3.13). Yleinen tapaus todistetaan lähes vastaavasti, mutta asetetaan $g = g^- + g^+$. \square

Määritelmä 3.13. Olkoot $X, Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ sellaisia satunnaismuuttujia, joille $\mathbb{E}(X), \mathbb{E}(Y), \mathbb{E}(XY) < \infty$. Tällöin

$$(3.14) \quad \text{Cov}(X, Y) := \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}(X))(Y - \mathbb{E}(Y))] = \mathbb{E}(XY) - \mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y)$$

on satunnaismuuttujien X ja Y *kovarianssi*, ja

$$(3.15) \quad \text{Var}(X) := \text{Cov}(X, X)$$

on satunnaismuuttujan X *varianssi*. Edelleen

$$(3.16) \quad \rho(X, Y) := \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X)\text{Var}(Y)}}$$

on satunnaismuuttujien X ja Y *korrelaatiokerroin*.

Määritelmä 3.14. Olkoot $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ ja $Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k$ satunnaisvektoreita. Tällöin

$$(3.17) \quad \mathbb{E}(X) := (\mathbb{E}(X_1), \dots, \mathbb{E}(X_d))$$

on satunnaisvektorin X *odotusarvovektori*,

$$(3.18) \quad \text{Cov}(X, Y) := \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}(X))(Y - \mathbb{E}(Y))^T]$$

on satunnaisvektorien X ja Y *kovarianssimatriisi*, ja

$$(3.19) \quad \text{Cov}(X) := \text{Cov}(X, X)$$

on satunnaisvektorin X *kovarianssimatriisi* (tai joskus myös *varianssimatriisi*), mikäli integraalit suppenevat kaikissa koordinaateissa.

Emme tässä esityksessä todista tai esitä näille käsitteille perusominaisuuksia, vaan siirrymme luvussa 4 käsittelemään todennäköisyysteorian soveltamista inversio-ongelmiin.

3.2 Ehdollinen todennäköisyys

Täydellisyyden vuoksi esitetään lyhyesti ehdollisuuden ja riippumattomuuden perusteet todennäköisyysmitoille. Näitä tuloksia ei kuitenkaan käytetä jatkossa, mutta ne voivat auttaa ymmärtämään paremmin vastaavanlaisia käsitteitä satunnaismuuttujille.

Määritelmä 3.15. Olkoon P todennäköisyys ja I jokin indeksijoukko.

a) Tällöin tapahtumat A ja B ovat *riippumattomia*, jos $P(A \cap B) = P(A)P(B)$.

b) Kokoelma $(A_i)_{i \in I}$ tapahtumia on *riippumaton*, jos jokaiselle $J \subseteq I$ pätee

$$(3.20) \quad P\left(\bigcap_{i \in J} A_i\right) = \prod_{i \in J} P(A_i).$$

Huomautus 3.16. Jos kokoelma $(A_i)_{i \in I}$ tapahtumia on riippumaton, niin tällöin tapahtumat ovat pareittain riippumattomia. Kuitenkaan päinvastainen päätelmä ei ole yleisesti voimassa.

Lause 3.17. Jos tapahtumat A ja B ovat riippumattomia, niin samoin ovat (A, B^c) , (A^c, B) ja (A^c, B^c) .

Todistus. Vrt. [20, s. 16]. Todistetaan vain tapaus (A, B^c) , sillä muut tapaukset voidaan todistaa vastaavanlaisilla argumenteilla. Nyt

$$\begin{aligned} P(A \cap B^c) &= P(A \setminus (A \cap B)) = P(A) - P(A \cap B) \\ &= P(A) - P(A)P(B) = P(A)(1 - P(B)) \\ &= P(A)P(B^c). \end{aligned}$$

□

Määritelmä 3.18. Olkoon A ja B ovat tapahtumia siten, että $P(B) > 0$. Tällöin $A:n$ ehdollinen todennäköisyys ehdolla B on

$$(3.21) \quad P(A|B) := \frac{P(A \cap B)}{P(B)}.$$

Lause 3.19. Olkoon A ja B tapahtumia siten, että $P(B) > 0$.

- a) Tällöin A ja B ovat riippumattomia, jos ja vain jos $P(A|B) = P(A)$.
- b) Ehdollinen todennäköisyys $Q : \mathcal{A} \rightarrow [0, 1]$, $A \mapsto P(A|B)$ on todennäköisyysmitta.

Todistus. Vrt. [20, s. 16]. Ensimmäinen väite seuraa suoraan määritelmästä.

Todistetaan sitten jälkimmäinen väite. Ensinnäkin

$$Q(\Omega) = P(\Omega|B) = P(\Omega \cap B)/P(B) = P(B)/P(B) = 1.$$

Olkoon (A_n) jono kokoelman \mathcal{A} alkioita siten, että joukot ovat pareittain erillisiä. Tällöin

$$\begin{aligned} Q\left(\bigcup_{n=0}^{\infty} A_n\right) &= P\left(\bigcup_{n=0}^{\infty} A_n | B\right) = \frac{P((\bigcup_{n=0}^{\infty} A_n) \cap B)}{P(B)} \\ &= \frac{P(\bigcup_{n=0}^{\infty} (A_n \cap B))}{P(B)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{P(A_n \cap B)}{P(B)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P(A_n | B) = \sum_{n=0}^{\infty} Q(A_n). \end{aligned}$$

Olkoon $A \in \mathcal{A}$. Selvästi $P(B) \geq P(B \cap A) \geq 0$, joten $0 \leq Q(A) \leq 1$. Näin olemme todistaneet väitteen. □

Lause 3.20. Olkoon $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{A}$ sellaisia, että $P(A_1 \cap \dots \cap A_{n-1}) > 0$. Tällöin

$$(3.22) \quad P(A_1 \cap \dots \cap A_n) = P(A_1)P(A_2|A_1) \cdots P(A_n|A_1 \cap \dots \cap A_{n-1}).$$

Todistus. Ks. [20, s. 17]. Helppo induktio, jossa peruskaskel on tosi määritelmän nojalla. □

Lause 3.21. *Olkoon $(E_i)_{i \in I}$ äärellinen tai numeroituvasti ääretön avaruuden Ω ositus. Tällöin jos $A \in \mathcal{A}$, niin*

$$(3.23) \quad P(A) = \sum_{i \in I} P(A | E_i) P(E_i).$$

Todistus. Vrt. [20, s. 17]. Huomataan aluksi, että

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

Koska joukot E_i ovat pareittain erillisiä, niin ovat myöskin $(A \cap E_i)$. Näin ollen

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

□

Lause 3.22 (Bayesin⁴⁶ kaava). *Olkoon $(E_i)_{i \in I}$ äärellinen tai numeroituvasti ääretön avaruuden Ω ositus ja A sellainen tapahtuma, jolle $P(A) > 0$. Tällöin*

$$(3.24) \quad P(E_i | A) = \frac{P(A | E_i) P(E_i)}{\sum_{j \in I} P(A | E_j) P(E_j)}.$$

Todistus. Vrt. [20, s. 17]. Koska $P(A | E_i) P(E_i) = P(E_i | A) P(A)$, niin edellisen lauseen perusteella saamme väitteen. □

Kutsumme edellisessä kaavassa mittaa $P(E_i | A)$ *posterioritodennäköisyydeksi*, $P(E_i)$ *prioritodennäköisyydeksi* ja $P(A | E_i)$ *uskottavuudeksi ehdolla A* . Tätä terminologiaa käytetään erityisesti bayesiläisen tilastotieteen piireissä. Jakajassa oleva summa $\sum_{j \in I} P(A | E_j) P(E_j)$ on vain ehdosta A riippuva vakio, joka takaa, että käsittelemme aitoa todennäköisyydsmittaa. Satunnaismuuttujien vastaavia käsitteitä on käsitelty kattavasti lähteessä [2, Luvut 5.8 ja 6].

⁴⁶Thomas Bayes (1702–1761) oli englantilainen tilastotieteilijä, filosofi ja pappi, joka tunnetaan nykyään erityisesti Bayesin kaavasta. Hän esitti ensimmäisenä, että sitä voidaan soveltaa ”uskomuksen päivittämiseen”.

4 Tilastollinen inversio-ongelma

Tässä luvussa johdatellaan tilastollisten inversio-ongelmien teoriaan, mutta luku toimii samalla myös johdantona bayesiläiseen tilastotieteeseen. Lähteinä olemme käyttäneet kirjoja *Statistical and Computational Inverse Problems* [11, Kaipio ja Somersalo] ja *Introduction to Bayesian Scientific Computing* [4, Calvetti ja Somersalo]. Lukijan oletetaan olevan perehtynyt tilastolliseen matriisilaskentaan ja tuntevan todennäköisyysteoriaa sellaisessa laajuudessa, jossa sitä käsiteltiin luvussa 3.

4.1 Bayesiläinen ratkaisu inversio-ongelmaan

Oletamme jatkossa kaikkien satunnaismuuttujien olevan absoluuttisesti jatkuvia Lebesguen mitan suhteen, mikä yksinkertaistaa tarkasteluja. Voimme siis samaistaa jakauman ja tiheysfunktion käsitteet, koska tiheysfunktio on yksikäsitteinen melkein kaikkialla.

Merkitään satunnaisvektorien $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ joukkoa $\Omega(\mathbb{R}^d)$. Olkoon $y = F(x, e)$, missä kuvaus $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^m$. Kutsutaan kuvausta F suoraksi malliksi sekä alkioita e, x ja y parametreiksi⁴⁷, tilaksi ja dataksi. Näillä on sama käytännön merkitys kuin luvussa 1. Tilastollisissa inversio-ongelmissa ajattelemme kuitenkin parametreja, tilaa ja dataa satunnaismuuttujina. Siis kirjoitamme $Y = F(X, E)$, missä $X \in \Omega(\mathbb{R}^n)$, $E \in \Omega(\mathbb{R}^k)$ ja $Y \in \Omega(\mathbb{R}^m)$.

Esimerkki 4.1 (Tiheysfunktioiden koordinaattimuunnokset). Vrt. [4, s. 46–47]. Olkoot $X, Y \in \Omega(\mathbb{R}^d)$ satunnaismuuttujia, joita sitoo yhtälö $Y = F(X)$, missä $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ on injektiivinen ja jatkuvasti derivoituva funktio. Voimme kirjoittaa *Jacobin determinanttiin* $|J_F(x)|$ perustuvat *koordinaattimuunnokset*, jos $|J_F(x)| \neq 0$ jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$. Oletukset takaavat, että funktio F on aidosti monotoninen, ja täten sillä on olemassa käänteisfunktio F^{-1} .

Jos satunnaismuuttujan Y tiheysfunktio $\pi_Y(y)$ on tunnettu, niin tällöin voimme kirjoittaa koordinaattimuunnoksen muodossa

$$(4.1) \quad \pi_X(x) = \pi_Y(F(x)) |J_F(x)|.$$

Toisaalta jos tunnemme tiheysfunktion $\pi_X(x)$, niin

$$(4.2) \quad \pi_Y(y) = \pi_X(F^{-1}(y)) |J_{F^{-1}}(y)|.$$

Emme esitä tähän liittyviä yksityiskohtia, mutta niitä on käsitelty esim. lähteissä [20, s. 92–93] ja [2, s. 220–222]. \triangle

Oletetaan, että satunnaismuuttujalla (X, Y) on yhteisjakauma, jonka tiheysfunktio on $\pi_{X,Y}(x, y)$. Tällöin satunnaismuuttujien X ja Y *marginaalijakaumien tiheysfunktiot* ovat

$$(4.3) \quad \pi_X(x) := \int_{\mathbb{R}^m} \pi_{X,Y}(x, y) dy, \quad \pi_Y(y) := \int_{\mathbb{R}^n} \pi_{X,Y}(x, y) dx.$$

Edelleen määrittelemme *ehdolliset tiheysfunktiot* seuraavasti

$$(4.4) \quad \pi(x | Y = y) := \frac{\pi_{X,Y}(x, y)}{\pi_Y(y)}, \quad \pi(y | X = x) := \frac{\pi_{X,Y}(x, y)}{\pi_X(x)},$$

⁴⁷Parametrit ovat sellaisia muuttujia, jotka aiheuttavat virheen.

jos $\pi_Y(y), \pi_X(x) \neq 0$. Merkitsemme lyhyesti $\pi(x|y) := \pi(x|Y=y)$, jos se ei aiheuta sekaannusta. Jos $\pi_Y(y_0) = 0$, niin tämä tarkoittaa sitä, että $\pi_{X,Y}(x, y_0) = 0$ melkein kaikilla $x \in \mathbb{R}^n$ (vastaavasti toisessa tapauksessa). Tietysti kaikissa todellisissa mittaustilanteissa havainnolla on positiivinen *frekventistinen* todennäköisyys, sillä se on tapahtunut⁴⁸.

Lause 4.2. *Olkoon yllä olevien määritelmien oletukset voimassa. Tällöin*

- a) *marginaalijakaumien tiheysfunktiot generoivat todennäköisyyssmitan;*
- b) *ehdolliset tiheysfunktiot generoivat todennäköisyyssmitan;*
- c) $\pi(x|y)\pi_Y(y) = \pi(y|x)\pi_X(x)$.

Todistus. a) Nähdään helposti, että lausekkeiden (4.3) integraalit ovat suuruudeltaan 1, jolloin väite seuraa lauseesta 3.7.

b) Nähdään helposti, että lausekkeiden (4.4) integraalit ovat suuruudeltaan 1, jolloin väite seuraa lauseesta 3.7.

c) Triviaali. □

Määritelmä 4.3. *Olkoon edelliset merkinnät käytössä. Tällöin tilastollinen inversio-ongelma on: "Kun $y_{obs} \in \mathbb{R}^m$ tunnetaan, ratkaise ehdollinen tiheysfunktio $\pi(x|y_{obs})$."*

Tilastollisen inversio-ongelman ratkaisu tapahtuu siis bayesiläisessä viitekehyksessä. Kutsumme ratkaisua π_{post} satunnaismuuttujan X *posteriorijakaumaksi*. Ongelmaa regularisoidaan asettamalla satunnaismuuttujalle X marginaalijakauma tiheysfunktion π_{pr} avulla. Kutsumme tätä marginaalijakaumaa *priorijakaumaksi*. Lisäksi tässä bayesiläisessä terminologiassa ehdollista tiheysfunktiota $\pi(y_{\text{obs}}|x)$ kutsutaan *uskottavuusfunktiksi* (eng. *likelihood*). Tämä ja edellisen luvun lopussa, Bayesin kaavan 3.22 yhteydessä, esitetty terminologia ovat analogisia.

Lause 4.4. *Oletetaan, että lauseen 4.2 oletukset ovat voimassa ja olemme asettaneet priorijakauman π_{pr} . Tällöin tilastollisen inversio-ongelman ratkaisu on*

$$(4.5) \quad \pi_{\text{post}}(x) = \frac{\pi(y_{\text{obs}}|x)\pi_{\text{pr}}(x)}{\pi_Y(y_{\text{obs}})},$$

missä

$$(4.6) \quad \pi_Y(y_{\text{obs}}) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi(y_{\text{obs}}|x)\pi_{\text{pr}}(x)dx.$$

Todistus. Väite seuraa suoraan määritelmistä ja lauseesta 4.2. □

Koska edellisen lauseen mukaan jakajassa oleva termi (4.6) on vain ns. *normeeraava vakio* (x :n suhteen), niin on tapana merkitä

$$(4.7) \quad \pi_{\text{post}}(x) \propto \pi(y_{\text{obs}}|x)\pi_{\text{pr}}(x)^{49}.$$

⁴⁸Lebesguen mitan suhteen *absoluuttisesti jatkuvasta* todennäköisyysjakaumasta saadun yksittäisen havainnon pistetodennäköisyys on kuitenkin aina 0 (helppo todistus).

⁴⁹Merkintä $f(x) \propto g(x)$ luetaan: " f on verrannollinen g :hen". Siis $f(x) \propto g(x) \iff \exists c \in \mathbb{R} : f = cg$.

Normeeraava vakio takaa, että tiheysfunktio määrittää aidon todennäköisyysjakauman, jonka massa on 1. Osaa $\pi(y_{\text{obs}} | x)\pi_{\text{pr}}(x)$ kutsutaan posteriorijakauman *tiheysfunktion muodoksi* tai *ytimeksi*. Käytännössä ei ole aina tarpeellista laskea integraalia (4.6), vaan voi olla riittävää määrittää posteriorijakauman muoto tai käyttää jotakin menetelmää, jolla saadaan generoitua otoksia posteriorijakaumasta.

Tilastollisen inversio-ongelman ratkaisu voidaan rikkoa siis kolmeen osaan:

- 1) Priorijakauman π_{pr} konstruointi siten, että se sisältää kaiken ennakkotietomme tuntemattomasta satunnaismuuttujasta X .
- 2) Uskottavuusfunktion $\pi(y | x)$ konstruointi siten, että se sisältää tietomme x :n ja y :n välisestä suhteesta.
- 3) Löytää sopiva menetelmä ratkaista posteriorijakauma tai saada siitä riittävän kattava otos.

Määritellään sitten tyypilliset bayesiläisessä tilastotieteessä käytetyt estimaattorit. Tilastotieteen kirjallisuudessa esitetään usein *bayesiläisiin sakkofunktioihin* perustuvia *Bayesin estimaattoreita*. Sitten erikoistapauksille todistetaan tiettyjä ominaisuuksia, mutta emme, tilaa säästääksemme, kuitenkaan tee nyt niin.

Määritelmä 4.5. Olkoon merkinnät, kuten edellä. Tällöin satunnaismuuttujan X

a) *MAP-estimaattori* (eng. *maximum a posteriori estimate*) on

$$(4.8) \quad x_{\text{MAP}} := \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi(x | y),$$

jos se on olemassa;

b) *ehdollinen odotusarvo* eli *CM-estimaattori* (eng. *conditional mean*) on

$$(4.9) \quad x_{\text{CM}} := \mathbb{E}(X | y) = \int_{\mathbb{R}^n} x \pi(x | y) dx,$$

jos integraali suppenee;

c) *ehdollinen kovarinassi* (eng. *conditional covariance*) on

$$(4.10) \quad \begin{aligned} \text{Cov}(X | y) &:= \mathbb{E}((X | y - x_{\text{CM}})(X | y - x_{\text{CM}})^T) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} (x - x_{\text{CM}})(x - x_{\text{CM}})^T \pi(x | y) dx \in \mathbb{R}^{n \times n}, \end{aligned}$$

jos integraali suppenee;

d) *suurimman uskottavuuden estimaattori* eli *ML-estimaattori* (eng. *maximum likelihood estimate*) on

$$(4.11) \quad x_{\text{ML}} := \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi(y | x),$$

jos se on olemassa.

e) Olkoon $0 < p < 1$. Määrittelemme *bayesiläisen p-luottamusalueen* D_p sellaiseksi mitalliseksi joukoksi, että se täyttää seuraavat kaksi ehtoa

$$(4.12) \quad P_{X|y}(D_p) = \int_{D_p} \pi(x|y)dx = p, \quad \pi(x|y)|_{x \in \partial D_p} = c,$$

missä ∂D_p on joukon D_p *reunapisteiden*⁵⁰ joukko ja $c \in \mathbb{R}$.

Huomautus 4.6. Estimaattorien kanssa voi tulla tiettyjä ongelmia. Joitakin estimaattoreita ei välttämättä ole olemassa, tai ne eivät aina kuvaa jakaumaa kovinkaan hyvin. Lisäksi on mahdollista, että MAP ja ML eivät ole yksikäsitteisiä, vaan kaavat (4.8) ja (4.11) määrittelevät joukot.

Esimerkki 4.7 (Additiivinen virhemalli). Vrt. [11, s. 56–57]. Olkoon $E, Y \in \Omega(\mathbb{R}^m)$, $X \in \Omega(\mathbb{R}^n)$ ja $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ mitallinen kuvaus. Tarkastellaan nyt *additiivista virhemallia*

$$(4.13) \quad Y = F(X) + E.$$

Oletetaan, että X ja E ovat riippumattomia, ja että tunnemme kohinan E tiheysfunktion π_{noise} . Koska X ja E ovat riippumattomia, niin uskottavuusfunktio on

$$(4.14) \quad \pi(y|x) = \pi_{\text{noise}}(y - F(x)).$$

Olkoon satunnaismuuttujan X priorijakauman tiheysfunktio π_{pr} . Tällöin

$$(4.15) \quad \pi(x|y) \propto \pi_{\text{pr}}(x)\pi_{\text{noise}}(y - F(x)),$$

joten tiedämme posteriorijakauman muodon.

Luovutaan sitten satunnaismuuttujien X ja E riippumattomuudesta. Oletetaan, että tunnemme ehdollisen jakauman $E|x$ tiheysfunktion $\pi_{\text{noise}}(e|x)$. Nyt voimme kirjoittaa

$$(4.16) \quad \pi(y|x) = \int_{\mathbb{R}^m} \pi(y|x, e)\pi_{\text{noise}}(e|x)de,$$

missä siis integroimme yli ”kohinaan liittyvän epävarmuuden”. Kun $X = x$ ja $E = e$ ovat tunnettuja, niin ne määrittävät yksikäsitteisesti, että $Y = y = F(x) + e$. Tällöin siis

$$(4.17) \quad \pi(y|x, e) = \delta_{F(x)+e}(y)^{51},$$

mistä voimme päätellä, että

$$(4.18) \quad \pi(y|x) = \pi_{\text{noise}}(y - F(x)|x).$$

Lopulta saamme posteriorijakauman muodoksi

$$(4.19) \quad \pi(x|y) \propto \pi_{\text{pr}}(x)\pi_{\text{noise}}(y - F(x)|x).$$

△

Toinen melko tavallinen malli on

$$(4.20) \quad Y = EF(X),$$

jota kutsutaan *multiplikatiiviseksi virhemalliksi* (ks. [11, s. 58–60]).

⁵⁰Piste $x \in D_p$ on *reunapiste*, jos sen jokainen ympäristö $B(x, r)$, $r > 0$, sisältää pisteen molemmista joukoista D_p sekä D_p^c .

⁵¹Siis $Y|x, e$ noudattaa esimerkissä 3.8 käsitellyä Diracin jakaumaa, jonka kaikki massa on yhdessä pisteessä $F(x) + e$. Joudumme valitettavasti tässä kohtaa luottamaan intuitioomme – vain, koska emme ole käsitelleet distribuutiota.

4.1.1 Lineaarinen Gaussinen malli

Käymme seuraavaksi läpi joukon hyödyllisiä esimerkkejä, jotka havainnollistavat tilastollisten inversio-ongelmien luonnetta ja edellä määriteltyjä käsitteitä. Tilatollisessa päätelyssä oletetaan usein, että jakaumat olisivat Gaussisia, sillä tällöin niiden käsitteleminen on melko suoraviivaista. Kuitenkin monien muidenkin jakaumien täsmällinen matemaattinen käsittely on mahdollista. Monimutkaisten mallien kanssa käytetään usein jotakin laskennallista tapaa generoida otoksia. Tällaisia tapoja ovat esimerkiksi myöhemmin käsiteltävät Markovin ketju Monte Carlo -menetelmät. Otoksesta voidaan estimoida jakauman ominaisuuksia, kuten esimerkiksi ydinestimoida (eng. kernel density estimation) jakauman muotoa.

Esimerkki 4.8 (ML-estimaattorin ratkaiseminen). Vrt. [4, s. 35–37]. Olkoon $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matriisi ja $E \sim \mathcal{N}(0, \Gamma)$, missä $\Gamma \in \mathbb{R}^{m \times m}$ on positiivisesti definiitti. Jatkossa oletamme erikseen mainitsematta, että Gaussisten jakaumien kovarianssit ovat positiivisesti definiittejä. Tarkastellaan lineaarisen mallin

$$(4.21) \quad Y = Ax + E$$

inversio-ongelmaa, missä $x \in \mathbb{R}^n$ on tuntematon. Bayesiläisessä mielessä tämä vastaa sitä, että käytämme *epäinformatiivista prioria* eli ”kaikilla pisteillä $x \in \mathbb{R}^n$ on sama prioritodennäköisyys”⁵². Selvästi $\mathbb{E}(Y) = Ax$ ja $\text{Cov}(Y) = \Gamma$, joten $Y \sim \mathcal{N}(Ax, \Gamma)$. Tällöin

$$(4.22) \quad \pi(y | x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \det(\Gamma)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y - Ax)^T \Gamma^{-1}(y - Ax)\right).$$

Olkoon nyt saatu otos $y_i \sim Y, i = 1, \dots, N$. Tällöin pudottamalla kertoimia pois logaritmoiduksi uskottavuusfunktiksi saadaan

$$(4.23) \quad \begin{aligned} L(y_1, \dots, y_N | x) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (y_i - Ax)^T \Gamma^{-1} (y_i - Ax) \\ &= \frac{N}{2} x^T (A^T \Gamma^{-1} A) x - x^T \left(A^T \Gamma^{-1} \sum_{i=1}^N y_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N y_i^T \Gamma^{-1} y_i. \end{aligned}$$

Tästä voidaan laskea gradientti

$$(4.24) \quad \nabla_x L(y_1, \dots, y_N | x) = N(A^T \Gamma^{-1} A)x - A^T \Gamma^{-1} \sum_{i=1}^N y_i.$$

Gradientin nollakohdat ovat uskottavuusfunktion potentiaalisia maksimeita. Merkitään otoskeskiarvoa \bar{y} . Siis ML-estimaatti x_{ML} , jos se on olemassa, on yhtälön

$$(4.25) \quad (A^T \Gamma^{-1} A)x = A^T \Gamma^{-1} \bar{y}$$

ratkaisu. Yhtälön (4.25) voi vielä kirjoittaa muotoon

$$(4.26) \quad (A^T \Gamma^{-1})(Ax - \bar{y}) = 0,$$

joka ei välttämättä ole Hadamardin mielessä hyvin määritelty.

⁵²Merkitään myös $\pi_{\text{pr}}(x) \propto 1$, mutta tämä ei ääretönulotteisessa avaruudessa ole aito todennäköisyysjakauma!

Olkoon $\Gamma = UDU^T$ ominaisarvohajotelma ja merkitään $W = D^{-1/2}U^T$. Nyt $\Gamma^{-1} = W^TW$ ja voimme kirjoittaa kaavan (4.23)

$$(4.27) \quad L(y_1, \dots, y_N | x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \|W(Ax - y_i)\|^2.$$

Siis ML-estimaattorin ratkaiseminen johtaa matriisilla W painotettujen neliösummien minimointiongelmaan ilman regularisointia. \triangle

Esimerkki 4.9 (MAP-estimaattorin ratkaiseminen). Vrt. [4, s. 56–58]. Tämä esimerkki on jatkoa edelliseen esimerkkiin 4.8. Kirjoitetaan nyt lineaarinen malli (4.21) muotoon

$$(4.28) \quad Y = AX + E,$$

missä $X \sim \mathcal{N}(0, \gamma^2\Gamma)$ ja $E \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2I)$ ⁵³.

Siis

$$(4.29) \quad \pi_{\text{pr}}(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\gamma^2}x^T\Gamma^{-1}x\right)$$

on priorijakauman tiheysfunktion ydin, missä $\gamma \in \mathbb{R}$ ja $\Gamma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ oletetaan olevan ennalta tunnettuja. Kun *kohinan taso* $\sigma^2 \in \mathbb{R}$ on tunnettu, niin

$$(4.30) \quad \pi(y | x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|Ax - y\|^2\right)$$

on uskottavuusfunktion ydin. Tämä voidaan johtaa, kuten edellisessä esimerkissä. On syytä huomata, että kaava (4.23) pätee tässäkin esimerkissä, ja tehty oletus valkoisesta kohinasta on ”tarpeeton”.

Nyt posteriorijakauman muodolle saadaan lauseke

$$(4.31) \quad \begin{aligned} \pi(x | y) &\propto \pi_{\text{pr}}(x)\pi(y | x) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\gamma^2}x^T\Gamma^{-1}x - \frac{1}{2\sigma^2}\|Ax - y\|^2\right) \\ &= \exp(-V(x | y)), \end{aligned}$$

missä

$$(4.32) \quad V(x | y) := \frac{1}{2\gamma^2}x^T\Gamma^{-1}x + \frac{1}{2\sigma^2}\|Ax - y\|^2$$

on *posteriorin potentiaalifunktio*. Olkoon $\Gamma^{-1} = R^TR$ symmetrinen hajotelma (esim. kuten edellisessä esimerkissä, *Choleskyn hajotelma* tai SVD:stä johdettu). Tällöin

$$(4.33) \quad x^T\Gamma^{-1}x = x^TR^TRx = \|Rx\|^2.$$

Määritellään

$$(4.34) \quad T(x) := 2\sigma^2V(x | y) = \|Ax - y\|^2 + \delta^2\|Rx\|^2,$$

⁵³Keskiarvoja voidaan siirtää helposti, joten tehty oletus nollakeskisyydestä ei ole rajoittava. Kohinan oletamme nyt olevan ns. *valkoista kohinaa* (eng. *(Gaussian) white noise*), mutta tästäkin oletuksesta voitaisiin luopua.

missä $\delta = \sigma/\gamma$. Koska

$$(4.35) \quad x_{\text{MAP}} = \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \pi(x | y) = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} V(x | y),$$

niin

$$(4.36) \quad x_{\text{MAP}} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} T(x).$$

Siis MAP-estimaattorin ratkaiseminen on johtanut Tikhonovin regularisoituun ongelmaan.

Voimme edelleen kirjoittaa, että

$$(4.37) \quad T(x) = \left\| \begin{pmatrix} A \\ \delta R \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} \right\|^2$$

eli kyseessä on jälleen neliösummien minimointiongelma (ks. esim. [18, s. 67–68]). \triangle

Yksi menetelmä ehdollisten Gaussisten jakaumien käsittelyyn perustuu kovarianssimatriisin Γ lohkoamiseen ja näiden lohkojen *Schur'n*⁵⁴ *komplementteihin*. Menetelmä johtaa samoihin tuloksiin kuin tässä esitetty, mutta saamme lisäksi laskukaavat posteriorijakauman keskiarvolle ja kovarianssille. Esitämme lähestymistavan antamat tärkeimmät tulokset yhteenvetona. Muuten tyydymme antamaan vain lähdeviitteet [11, s. 72–79] ja [4, s. 128–151], joista molemmista löytyy asian perusteellinen käsittely.

Olkoon tarkasteltavana lineaarinen malli (4.28), jossa $X \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\text{pr}})$ ja $E \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\text{noise}})$ ovat riippumattomia. Taaskaan oletus nollakeskisyydestä ei ole rajoittava, sillä keskiarvoja on helppo siirtää. Oletetaan, että on saatu mittaus y_{obs} . Nyt voimme esittää posteriorijakauman seuraavilla kaavoilla

$$(4.38) \quad x_{\text{CM}} = \Sigma_{\text{post}} A^T \Sigma_{\text{noise}}^{-1} y_{\text{obs}}$$

ja

$$(4.39) \quad \Sigma_{\text{post}} = (\Sigma_{\text{pr}}^{-1} + A^T \Sigma_{\text{noise}}^{-1} A)^{-1}.$$

Esimerkki 4.10 (SVD ja MAP-estimaatti). Vrt. [4, s. 84–88]. Tarkastellaan samaa tilannetta kuin edellisessä esimerkissä 4.9. Koska MAP-estimaatti on Tikhonovin funktionaalin $T(x)$ minimi, niin se on myös yhtälön

$$(4.40) \quad \begin{pmatrix} A \\ \delta R \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ \delta R \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} A \\ \delta R \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}$$

ratkaisu. Edellisen yhtälön (4.40) voi kirjoittaa muodossa

$$(4.41) \quad (A^T A + \delta^2 R^T R) x = A^T y.$$

Oletetaan, että $R = I$, ja olkoon $A = UDV^T$ matriisin A *singulaariarvohajotelma*, missä $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ ja $V = [v_1 \dots v_n]$ ⁵⁵. Tällöin

$$A^T A = V D^T D V^T, \quad V V^T = I,$$

⁵⁴Issai Schur (1875–1941) oli saksalainen, mutta Venäjän keisarikunnassa syntynyt, matemaatikko, joka tutki erityisesti ryhmien esitysteoriaa.

⁵⁵Tässä vektorit v_1, \dots, v_n ovat matriisin V sarakkeet.

joten

$$A^T A + \delta^2 R^T R = V(D^T D + \delta^2 I)V^T,$$

missä

$$D^T D + \delta^2 I = \text{diag}(d_1^2 + \delta^2, \dots, d_n^2 + \delta^2).$$

Nyt MAP-estimaatti voidaan esittää singulaariarvojen avulla

$$(4.42) \quad x_{\text{MAP}} = \sum_{i=1}^n \frac{d_i}{d_i^2 + \delta^2} (U^T b)_i v_j.$$

△

Useissa käytännön sovelluksissa tiedetään jotakin tuntemattoman rakenteesta. Esimerkiksi ilmakehän kaukokartoituksessa on järkevää olettaa kaasun tiheysprofiilin olevan jatkuva korkeuden suhteen. Yksinkertainen tapa rajoittaa ratkaisuavaruutta on asettaa priorijakauman tiheysfunktioon alueita, missä se saa arvon 0. Yksi tapa tuoda prioritietoa on asettaa jonkinlainen sileyspriori, jonka avulla malliin tuodaan rakenteellista tietoa (esim. derivaattoihin perustuva). Ratkaisuavaruutta voidaan myös jotenkin pyrkiä supistamaan, kuten pääkomponenttianalyysiin (PCA, eng. principal components analysis) perustuvissa ratkaisumenetelmissä tehdään. Eräs tällainen laskentamenetelmä tullaan esittelemään alaluvussa 4.3.

4.2 Markovin ketju Monte Carlo -menetelmistä

Esittelemme seuraavaksi laskentaintensiivisiä Markovin ketju Monte Carlo -menetelmiä (MCMC). Esivalmisteluina käsittelemme lyhyesti Monte Carlo -integrointia ja Markovin ketjuja. Varsinaisista algoritmeista esittelemme Metropolisin-Hastingsin algoritmin ja adaptiivisen Metropolisin algoritmin. Tärkeimpinä lähteinä olemme käyttäneet jo esitellyjä tilastollisten inversio-ongelmien kirjoja ([11], [4]) ja liseniaatin tutkielmaa *MCMC methods for inverse problems* [26, Tamminen]. Taustalukemistona on ollut myös *Markov Chain Monte Carlo in Practice* [7, Gilks, Richardson ja Spiegelhalter]. Vaihtoehtoinen usein käytetty menetelmä olisi *Gibbsin*⁵⁶ *poimija*.

4.2.1 Johdattelua Monte Carlo -integrointiin

Olkoon π satunnaisvektorin $X \in \Omega(\mathbb{R}^d)$ tiheysfunktio ja $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mitallinen kuvaus. Haluamme laskea integraalin

$$(4.43) \quad I = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \pi(x) dx.$$

Huomataan, että $I = \mathbb{E}(f(X))$. Usein integraalin tarkka laskeminen on vaikeaa, joten pyritään laskemaan likiarvo käyttäen satunnaisotosta.

Oletetaan, että $\text{Var}(f(X)) < \infty$ ⁵⁷. Olkoon $x_i \sim X$, $i = 1, \dots, N$, satunnaisotos, ja merkitään

$$(4.44) \quad I_N = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N f(x_i) \right).$$

⁵⁶Josiah Gibbs (1839–1903) oli amerikkalainen monipuolinen fyysikko, kemisti ja matemaatikko, joka kehitti ja tutki erityisesti matemaattista fysiikkaa.

⁵⁷Oletus $\mathbb{E}(f(X)) < \infty$ olisi riittävä, mutta tällöin suppeneminen olisi mahdollisesti hitaampaa.

Tällöin *vahvan suurten lukujen lain*⁵⁸ perusteella

$$\lim_{N \rightarrow \infty} I_N = I$$

*melkein varmasti*⁵⁹ eli todennäköisyydellä 1. Lisäksi *keskeisen raja-arvolauseen*⁶⁰ perusteella $Y_N \xrightarrow{D} \mathcal{N}(0, 1)$, missä

$$Y_N := \frac{I_N - I}{\sqrt{\text{Var}(f(X))/N}}.$$

Siis $\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Var}(Y_N) = 1$, joten

$$\text{Var}(I_N) \rightarrow 0,$$

kun $N \rightarrow \infty$. Näin ollen integraalin estimaattori I_N on harhaton ja tarkentuva.

Edellä esitettyä satunnaisotoksiin perustuvaa numeerista integrointia (4.44) kutsutaan *Monte Carlo -integroinniksi*. Voimme rajoittaa integroinnin mitalliseen joukkoon $A \subseteq \mathbb{R}^d$ käyttämällä sen indikaattorifunktiota 1_A . Todellinen haaste on nyt satunnaisotoksien generointi, mikä käsitellään hyvin lähteessä [4, Luku 5 *Sampling: first encounter*]. Käytännössä integrointi (4.43) tehdään usein Markovin ketjuihin perustuen, kuten tulemme esittämään.

4.2.2 Johdattelua Markovin ketjuihin

Esitämme seuraavaksi Markovin ketjuihin liittyvät peruskäsitteet euklidisessa avaruudessa \mathbb{R}^d . Määritelmät voitaisiin tehdä yleisemminkin, mutta olemme halunneet esittää teoriaa ainoastaan sen verran kuin sovellusten ymmärtämisen kannalta on välttämätöntä.

Määritelmä 4.11. Kuvausta $K : \mathbb{R}^d \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow [0, 1]$ kutsutaan *todennäköisyyden siirtymäytimeksi* (eng. *probability transition kernel*), jos

- 1) jokaisella $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ kuvaus $\mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$, $x \mapsto K(x, A)$ on mitallinen;
- 2) jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$ kuvaus $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow [0, 1]$, $A \mapsto K(x, A)$ on todennäköisyys.

Määritelmä 4.12. Olkoon $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ jono satunnaismuuttujia $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ ja olkoon K on todennäköisyyden siirtymäydin. Tällöin

- a) kutsumme satunnaismuuttujien jonoa $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ *diskreettiaikaiseksi satunnaisprosessiksi* (tai *stokastiseksi prosessiksi*).
- b) kutsumme diskreettiaikaista satunnaisprosessia $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ *Markovin*⁶¹ *ketjuksi*, jos jokaisella $t \in \mathbb{N}$ ja $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$

$$(4.45) \quad P_{X_{t+1}}(A | X_1 = x_1, \dots, X_t = x_t) = P_{X_{t+1}}(A | X_t = x_t).$$

- c) kutsumme Markovin ketjua *aikahomogeeniseksi*, jos jokaisella $t \in \mathbb{N}$ ja $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ pätee $P_{X_{t+1}}(A | X_t = x_t) = K(x_t, A)$.

⁵⁸Katso esimerkiksi 20. luku *The Laws of Large Numbers* [20, s. 173–177].

⁵⁹Katso esimerkiksi luvut 17. *Convergence of Random Variables* ja 18. *Weak Convergence* [20, s. 141–162].

⁶⁰Katso esimerkiksi 21. luku *The Central Limit Theorem* [20, s. 181–185].

⁶¹Andrei Markov (1856–1922) oli venäläinen matemaatikko, joka tutki paljon stokastisia prosesseja.

Määritelmän 4.11 kohdan 2) todennäköisyyttä kutsutaan *siirtymätodennäköisyydeksi* ”siirtyä tilasta x joukkoon A ”. Määritelmän 4.12 kohdan b) ominaisuutta (4.45) kutsutaan *Markovin ominaisuudeksi*. Aikahomogeenisen ketjun generoi sen siirtymätodennäköisyys K , kun jakauma P_{X_0} on tunnettu.

Määritelmä 4.13. Olkoon edellisten määritelmien oletukset voimassa.

a) Tällöin *siirtymätodennäköisyys n . askeleen verran*

$$(4.46) \quad \begin{aligned} K^{(n)}(x_t, A) &:= P_{X_{t+n}}(A | x_t) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} P(x_{t+n+1}, A) K^{(n-1)}(x_t, dx_{t+n-1}), \end{aligned}$$

kun $n \geq 2$. Jos $n = 1$, niin $K^{(1)}(x_t, A) := K(x_t, A)$.

b) Määritellään merkintä

$$(4.47) \quad \mu K(A) := \int_{\mathbb{R}^d} K(x, A) \mu(dx)$$

jokaisella $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Kutsumme mittaa μ *K-invariantiksi*, jos $\mu K = \mu$ eli

$$(4.48) \quad \int_A \mu(dx) = \int_{\mathbb{R}^d} K(x, A) \mu(dx)$$

jokaisella $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$.

Kun oletamme absoluuttisen jatkuvuuden Lebesguen mitan suhteen, niin kaavan (4.48) voi kirjoittaa muodossa

$$\int_A f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} K(x, A) f(x) dx$$

missä f on todennäköisyyden μ tiheysfunktio. Edelleen voimme kirjoittaa, Fubinin lauseen ja tiheysfunktion yksikäsitteisyyden nojalla

$$f(y) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x, y) f(x) dx,$$

kun $k(x, y)$ on todennäköisyyden $K(x, A)$ tiheysfunktio.

Määritelmä 4.14. Olkoon μ todennäköisyys. Siirtymäydintä K kutsutaan *μ -pelkistymättömäksi* (eng. *μ -irreducible*), jos jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$ ja $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, $\mu(A) > 0$, on olemassa $k \in \mathbb{N}$, jolle $K^{(k)}(x, A) > 0$.

Määritelmä 4.15. Olkoon K pelkistymätön siirtymäydin. Tällöin sanomme, että K on *jaksollinen* (eng. *periodic*), jos jollakin $m \in \mathbb{N}$, $m \geq 2$, on olemassa sellainen kokoelma pareittain erillisiä joukkoja $\{E_1, \dots, E_m\} \subseteq \mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$, että jokaiselle $i = 1, \dots, m$ ja $x \in E_i$ pätee $K(x, E_{i+1 \bmod m}) = 1$. Jos K ei ole ei ole jaksollinen, niin sen sanotaan olevan *jaksoton* (eng. *aperiodic*).

Jos K on μ -pelkistymätön, niin riippumatta alkupisteestä x , sen generoima Markovin ketju vierailee positiivisella todennäköisyydellä jokaisessa joukossa, jolla on positiivinen μ -todennäköisyys. Jos K on jaksollinen, niin tällöin sen generoima Markovin ketju toistaa jaksollista silmukkaa loputtomasti.

Määritelmä 4.16. Olkoon μ reaalinen mitta mitallisessa avaruudessa (Ω, \mathcal{A}) . Tällöin normia

$$(4.49) \quad \|\mu\|_{\text{TV}} := \sup_{A \in \mathcal{A}} \mu(A) - \inf_{A \in \mathcal{A}} \mu(A)$$

kutsutaan *kokonaisvariaationormiksi* (eng. *total variation norm*).

Määritelmä 4.17. Markovin ketjun siirtymäydin K on *ergodinen*, jos sillä K -invariantti todennäköisyys μ ja jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$ pätee

$$(4.50) \quad \|K^{(n)}(x, \cdot) - \mu\|_{\text{TV}} \rightarrow 0,$$

kun $n \rightarrow \infty$. Sanomme, että ergodinen Markovin ketju on *tasaisesti ergodinen*, jos on olemassa $M > 0$ ja $1 > r > 0$, joille

$$(4.51) \quad \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|K^{(n)}(x, \cdot) - \mu\|_{\text{TV}} \leq Mr^n$$

jokaisella $n \in \mathbb{Z}_+$.

Lause 4.18. Olkoon $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sellainen aikahomogeeninen Markovin ketju, jonka siirtymäydin K on tasaisesti ergodinen. Olkoon lisäksi todennäköisyysmitta μ K -invariantti. Tällöin jokaisella jakaumalla π pätee

$$\|\pi K^{(n)}(x, \cdot) - \mu\|_{\text{TV}} \leq Mr^n,$$

missä $0 \leq r < 1$ ja $M < \infty$ ovat sopivasti valittuja kiinteitä lukuja. Jos lisäksi $f \in L^1(\mu)$, niin

$$(4.52) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \mu(dx)$$

melkein varmasti.

Todistus. Todistus perustuu ergodisuus-tuloksiin. Erityisesti havaintoon, että siirtymäydin $K : \Omega(\mathbb{R}^d) \rightarrow \Omega(\mathbb{R}^d)$ määrittelee kontraktion, jolloin metristen avaruuksien kontraktioperiaatetta (eng. contraction mapping principle) voi soveltaa. Tarvittavat todistukset on esitetty lähteessä [26, Luku 6 *Markov chain Monte Carlo (MCMC) methods*]. \square

Lause 4.19. Olkoon $(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$ sellainen aikahomogeeninen Markovin ketju, jonka siirtymäydin on K . Olkoon lisäksi todennäköisyysmitta μ K -invariantti. Tällöin jos K on μ -pelkistymätön ja jaksoton, niin jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$ pätee

$$(4.53) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} K^{(n)}(x, A) = \mu(A),$$

kun $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Jos lisäksi $f \in L^1(\mu)$, niin

$$(4.54) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \mu(dx)$$

melkein varmasti.

Todistus. Sivuuutamme todistuksen. Tulos on esitetty, ilman todistuksia, lähteissä [11, s. 93–94] ja [7, s. 47]. \square

4.2.3 Metropolisin-Hastingsin algoritmista

Metropolisin-Hastingsin algoritmi on yksi käytetyimmistä MCMC-menetelmistä. Haluamme ratkaista MCMC-menetelmällä kohdejakauman P_X . Oletetaan, että π on kohdejakauman P_X , $X \in \Omega(\mathbb{R}^d)$, tiheysfunktio. Tällöin siis

$$P_X(A) = \int_A \pi(x)dx,$$

missä $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$.

Meidän tulee löytää sellainen siirtymäydin $K(x, A)$, jolle $\mu = \pi(x)dx$ on K -invariantti⁶². Kun olemme pisteessä $x \in \mathbb{R}^d$ ja $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, niin $K(x, A)$ kuvaa todennäköisyyttä päätyä pisteestä x joukkoon A . Voimme täten kirjoittaa

$$(4.55) \quad K(x, A) = \int_A k(x, y)dy + r(x)1_A(x),$$

missä $\int_A k(x, y)dy \geq 0$ on todennäköisyys siirtyä pisteestä x joukkoon A ja $r(x)1_A(x) \geq 0$ on todennäköisyys pysyä paikallaan, kun $x \in A$.

Ehdosta $K(x, \mathbb{R}^d) = 1$ seuraa, että

$$(4.56) \quad r(x) = 1 - \int_{\mathbb{R}^d} k(x, y)dy.$$

Kun $\pi(x)dx$ on K -invariantti, niin Fubinin lauseen perusteella tulee päteä

$$\begin{aligned} \mu K(A) &= \int_{\mathbb{R}^d} \left[\int_A k(x, y)dy + r(x)1_A(x) \right] \pi(x)dx \\ &= \int_A \left[\int_{\mathbb{R}^d} \pi(x)k(x, y)dx + r(y)\pi(y) \right] dy \\ &= \int_A \pi(y)dy \end{aligned}$$

jokaisella $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Tällöin Radonin-Nikodymin lauseessa olevan yksikäsitteisyyden vuoksi

$$(4.57) \quad \pi(y) = \int_{\mathbb{R}^d} \pi(x)k(x, y)dx + r(y)\pi(y)$$

melkein jokaisella $y \in \mathbb{R}^d$. Kun yhdistämme kaavat (4.56) ja (4.57), niin saamme

$$(4.58) \quad \int_{\mathbb{R}^d} \pi(y)k(y, x)dx = \int_{\mathbb{R}^d} \pi(x)k(x, y)dx.$$

Kutsumme yhtälöä (4.58) *tasapainoyhtälöksi* (eng. *balance equation*). Tasapainoyhtälö toteutuu erityisesti silloin, kun integrandit ovat yhtäsuuria eli

$$(4.59) \quad \pi(y)k(y, x) = \pi(x)k(x, y)$$

⁶²Lisäksi tulisi osoittaa, että K on joko ergodininen tai μ -pelkistymätön ja jaksoton. Emme kuitenkaan mene tällaisiin yksityiskohtiin tässä työssä.

kaikilla $x, y \in \mathbb{R}^d$. Kutsumme yhtälöä (4.59) *tarkaksi tasapainoyhtälöksi*. Metropolisin-Hastingsin algoritmi on tapa konstruoida sellainen siirtymäydin K , joka toteuttaa tarkan tasapainoyhtälön (4.59).

Olkoon $q : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$ sellainen funktio, että

$$\int_{\mathbb{R}^d} q(x, y) dy = 1.$$

Kutsumme funktion q indusoimaa siirtymäydintä

$$(4.60) \quad Q(x, A) := \int_A q(x, y) dy, \quad A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$$

ehdotusjakaumaksi. Jos funktio q toteuttaa tarkan tasapainoyhtälön (4.59), niin asetamme, että $k(x, y) := q(x, y)$ ja $r(x) := 0$. Muutoin korjaamme ydintä asettamalla

$$k(x, y) = \alpha(x, y)q(x, y),$$

missä $\alpha(x, y)$ on sopiva *korjaustermi*. Oletetaan, että

$$\pi(y)q(y, x) < \pi(x)q(x, y).$$

Haluamme valita sellaisen funktion $\alpha(x, y)$, että yhtälö

$$\pi(y)\alpha(y, x)q(y, x) = \pi(x)\alpha(x, y)q(x, y)$$

toteutuu. Näin tapahtuu erityisesti, jos $\alpha(y, x) = 1$ ja $\alpha(x, y) = \frac{\pi(y)q(y, x)}{\pi(x)q(x, y)} < 1$. Vaihtamalla muuttujien x ja y roolit saamme lopulta, että

$$(4.61) \quad \alpha(x, y) := \min \left(\frac{\pi(y)q(y, x)}{\pi(x)q(x, y)}, 1 \right).$$

Esitetään lopuksi yhteenvetona *Metropolisin-Hastingsin algoritmi*⁶³ (*MH*). Määritellään lähes mielivaltainen ehdotusjakauma $Q(x, \cdot)$, jolla on tiheysfunktio $q(x, y)$ (käytännössä usein Gaussinen jakauma). Tiheysfunktio kuvaa todennäköisyyttä liikkua tilasta x tilaan y . Oletetaan, että ajanhetkellä $t \in \mathbb{N}$ olemme tilassa x_t . Tällöin seuraavan tilan x_{t+1} määrittäminen voidaan jakaa kahteen askeleeseen:

- 1) Arvomme *ehdokaspisteen* $y \sim Q(x_t, \cdot)$ ehdotusjakaumasta.
- 2) Ehdokaspiste y joko hyväksytään tai hylätään. *Hyväksymistodennäköisyys* on

$$(4.62) \quad \alpha(x_t, y) = \begin{cases} \min \left(\frac{\pi(y)q(y, x_t)}{\pi(x_t)q(x_t, y)}, 1 \right), & \text{jos } \pi(x_t)q(x_t, y) > 0 \\ 1, & \text{jos } \pi(x_t)q(x_t, y) = 0. \end{cases}$$

Jos ehdokaspiste y hyväksytään, niin asetetaan $x_{t+1} := y$ ja muulloin $x_{t+1} = x_t$.

⁶³Nicholas Metropolis (1915-1999) oli kreikkalais-amerikkalainen fyysikko ja matemaatikko, joka tunnetaan erityisesti Monte Carlo -menetelmien kehittämisestä. W. Keith Hastings on kanadalainen vuonna 1930 syntynyt tilastotieteilijä, joka kehitti Metropolisin MCMC -menetelmää vuonna 1970 julkaistussa tutkimuksessaan.

Koska menetelmässä lasketaan vain osamäärä $\pi(y)/\pi(x)$, niin riittää tuntea kohdejakauman muoto. Erityisesti tilastollisten inversio-ongelmien kannalta tämä on hyvä asia, sillä integraalin (4.6) laskeminen voi olla vaikeaa. Kun menetelmä on ergodinen, niin tämä lisäksi takaa, että saamme aidon otoksen kohdejakaumasta (asymptoottisesti).

Soveltajan tulee kuitenkin ottaa huomioon, että menetelmällä on *burn-in aika*, jolloin ketjun ensimmäiset pisteet eivät välttämättä ole edustavia otoksia kohdejakaumasta. Lisäksi Markovin ominaisuuden vuoksi ketjun pisteet korreloivat keskenään, mitä voidaan tutkia esimerkiksi *autokorrelaation* avulla. Edellisistä asioista on kerrottu terkemmin lähenteessä [4, Luku 9.1 *Metropolis-Hastings algorithm*].

Kutsumme symmetrisen tiheysfunktion q indusoimaa siirtymäydintä Q *Metropolisin ytimeksi*. Kun ehdotusjakauma on symmetrinen, ts. $q(x, y) = q(y, x)$ kaikilla $x, y \in \mathbb{R}^d$, niin

$$(4.63) \quad \alpha(x, y) = \min \left(1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right).$$

Lähteessä [26, Luku 6.3.1 *Metropolis-Hastings method*] todistetaan useita ergodisuustuloksia liittyen Metropolisin ytimeen.

AM-algoritmi (*adaptive Metropolis algorithm*) on MCMC-menetelmä, joka pyrkii ratkaisemaan ehdotusjakauman valintaan liittyviä haasteita. Menetelmä on kuvattu artikkelissa *An adaptive Metropolis algorithm* [8, Haario, Saksman ja Tamminen]. AM-algoritmissa muokataan ehdotusjakaumaa MCMC-ketjun historian perusteella, joten se ei toteuta Markovin ominaisuutta. Voidaan kuitenkin osoittaa, että menetelmä on ergodinen eli sillä pystytään ratkaisemaan kohdejakauma. AM-algoritmin pseudokoodi ja kuvaus on esitetty väitöskirjassa *Adaptive Markov Chain Monte Carlo Algorithms with Geophysical Applications* [27, Tamminen, Luku 3.4 *The Adaptive Metropolis algorithm*].

AM-algoritmista on olemassa myös laajennettu versio, *DRAM-algoritmi* (*Delayed Rejection Adaptive Metropolis algorithm*), mikä on julkaistu artikkelissa *DRAM: Efficient adaptive MCMC* [9, Haario et al.]. Luvussa 5 esitettävissä simulaatioissa olemme käyttäneen AM-algoritmin implementaatioita *MCMC toolbox for Matlab* [14, Laine]. Tämä toolbox sisältää myös MH- ja DRAM-algoritmien implementaatiot.

4.3 Redusoidun priorin menetelmä

Dimension redusoinnilla tarkoitetaan ns. ulotteisuuden tiputtamista. Dimension redusointia tarvitaan erityisesti kahteen tarkoitukseen, joita ovat datan visualisointi ja laskentaulotteisuuden tiputtaminen. Ihmisen on vaikeaa käsitellä visuaalisesti yli 3-ulotteista dataa, joten visualisoinnin kannalta on järkevää etsiä tapoja esittää data 1–3-ulotteisesti. Tässä työssä olemme kuitenkin motivoituneet dimension redusoinnista laskentaulotteisuuden tiputtamisen vuoksi.

Laskentaulotteisuuden tiputtamisen ansiosta on mahdollista ratkaista ongelmia tehokkaammin, ja on myös mahdollista, että ongelmaa ei pystytä ratkaisemaan liian isossa laskentaulottuvuudessa, jolloin dimension redusointi on erityisen perusteltua. Käsitellään nyt asiaa johdatteluvien esimerkkien avulla.

Esimerkki 4.20. Olkoot V ja U sellaisia vektoriavaruuksia, joille $\dim(U) < \dim(V)$. Tällöin lineaarikuvaus $P : V \rightarrow U$ *redusoi* avaruuden V pisteet avaruuteen $\text{Im}(P) \subseteq U$. Lisäksi dimensiolle pätee $\dim(\text{Im}(U)) \leq \dim(U) < \dim(V)$. Jotta tällaisella kuvauksella olisi käyttöarvoa, niin sen tulee olla sellainen, että se säilyttää sovelluksen kannalta

oleellista informaatiota. Se millainen kuvaus on hyvä riippuu tietysti sovelluksesta, eikä kuvauksen löytäminen välttämättä ole helppoa. \triangle

Esimerkki 4.21. Olkoon $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ satunnaisvektori, missä $n \geq 2$. Tällöin mitallinen kuvaus $P : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, missä $m < n$, määrittelee *reduoidun satunnaismuuttujan* $\alpha_X := P \circ X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$. Erityisesti, jos P on kääntyvä, niin pääsemme vaihtamaan parametriseointien välillä eli $X = P^{-1} \circ \alpha_X$. Kuitenkin kuvauksen P bijektiivisyys saattaa usein olla liian suuri vaatimus.

Koska edellisen konstruktion kuvaus ei ole aina kääntyvä, niin tehdään vastaanlainen päättely vielä päinvastoin. Olkoot $\alpha : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ ja $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ satunnaismuuttujia, missä $n > m \geq 1$. Tällöin mitallinen kuvaus $P : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ määrittelee satunnaismuuttujan $X_\alpha := P \circ \alpha$. Tässä kuvauksen P avulla esitetään todellisuudessa m -ulotteinen satunnaismuuttuja n -ulotteisena. Nyt jos satunnaismuuttujien X ja X_α jakaumat ovat likimain samat, niin tällöin pystymme arvioimaan satunnaismuuttujan X ominaisuuksia satunnaismuuttujan α ja kuvauksen P avulla. \triangle

Esimerkki 4.22 (Gaussisen lineaarisen mallin reduointi). Vrt. [11, s. 181–183]. Tarkastellaan Gaussista lineaarista mallia (4.28), missä

$$Y = AX + E, \quad X \sim \mathcal{N}(x_0, \Sigma_{\text{pr}}), \quad E \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\text{noise}}).$$

Olkoon nyt kuitenkin $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ satunnaisvektori ja $A \in \mathbb{R}^{m \times N}$. Määritellään jokin lineaarikuvaus $P : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^n$, jolle $n \leq N$. Olkoon $\alpha_X := PX$ kuvauksen P *reduoima priori*. Tällöin saamme redusoiduksi priorijakaumaksi

$$\alpha_X \sim \mathcal{N}(Px_0, P\Sigma_{\text{pr}}P^T).$$

Olkoon $A_\alpha \in \mathbb{R}^{m \times n}$ *reduoitu malli* (esim. $A_\alpha = AP^+$), jolloin

$$\begin{aligned} Y &= AX + E = A_\alpha \alpha_X + (A - A_\alpha P)X + E \\ &= A_\alpha \alpha_X + E_\alpha, \end{aligned}$$

missä $E_\alpha := (A - A_\alpha P)X + E$ on *reduoitu virhe*.

Tällöin saamme redusoidun virheen jakaumaksi $E_\alpha \sim \mathcal{N}(e_\alpha, \Sigma_{\alpha, \text{noise}})$, missä

$$e_\alpha = \mathbb{E}(E_\alpha) = (A - A_\alpha P)x_0$$

ja

$$\Sigma_{\alpha, \text{noise}} = \text{Cov}(E_\alpha) = (A - A_\alpha P)\Sigma_{\text{pr}}(A - A_\alpha P)^T + \Sigma_{\text{noise}}.$$

Nyt voimme käsitellä *reduoitua posteriorijakaumaa*, kuten aiemmissä esimerkeissä tai jopa johtaa ehdollinen keskiarvo sekä kovarianssi Schur'n komplementteihin perustuen. Posteriorijakauma tai sen estimaattori voidaan yrittää palauttaa alkuperäisiin yksiköihin, eli täyteen dimensioon N , käyttäen pseudoinversiota tai muuta menetelmää. \triangle

Johdetaan seuraavaksi se dimension reduointimenetelmä, jota sovellamme luvun 5 esimerkeissä. Menetelmä perustuu osittain artikkelissa *Dimensionality reduction and polynomial chaos acceleration of Bayesian inference in inverse problems* [17, Marzouk ja Najm] olleisiin ideoihin. Kuitenkin tässä esitettävät kaavojen johdot perustuvat vahviten Ilmatieteen laitoksella 2013 pidettyyn esitelmään *A tutorial on dimensionality reduction in inverse problems via truncating the prior covariance matrix* [25, Solonen]. Sovellamme

pääkomponenttianalyysiä priorijakaumaan, jolloin sen laskentaulotteisuus laskee. Sopiville priorijakaumille, jotka ovat oikealla tavalla korreloituneita, tämä redusointimenetelmä säilyttää jakauman tärkeimmät ominaisuudet sekä tarjoaa luonnollisen tavan siirtyä redusoidun ja täyden jakauman välillä.

Olkoon $X \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$, missä $\Sigma \in \mathbb{R}^{N \times N}$ on positiivisesti definiitti reaalmatriisi⁶⁴. Haluamme redusoida tämän satunnaismuuttujan N -ulotteisesta avaruudesta n -ulotteiseksi, missä $n \leq N$. Kovarianssilla Σ on ominaisarvohajotelma⁶⁵

$$(4.64) \quad \Sigma = Q\Lambda Q^T = \sum_{i=1}^N \lambda_i q_i q_i^T,$$

missä $Q = [q_1, \dots, q_N]$, jossa q_1, \dots, q_N ovat matriisin Σ ominaisvektorit, ja $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$, jossa $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ ovat matriisin Σ ominaisarvot.

Olkoon ominaisarvot järjestelty siten, että $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$. Määritellään nyt kaavaan (4.64) perustuen

$$(4.65) \quad \Sigma_n := \sum_{i=1}^n \lambda_i q_i q_i^T = Q_n \Lambda_n Q_n^T = P_n P_n^T,$$

missä $P_n := [\sqrt{\lambda_1} q_1, \dots, \sqrt{\lambda_n} q_n]$ on *reduktiokuvaus*.

Tällöin voimme määritellä *reduoidun satunnaismuuttujan* X_n

$$(4.66) \quad X_n := X_n(\alpha) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \sqrt{\lambda_i} q_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i p_i = P_n \alpha,$$

missä $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \sim \mathcal{N}(0, I_n)$ on satunnaisvektori. Tällöin

$$\mathbb{E}(X_n(\alpha)) = \mathbb{E}(P_n \alpha) = P_n \mathbb{E}(\alpha) = 0$$

ja

$$\text{Cov}(X_k(\alpha)) = \text{Cov}(P_n \alpha) = P_n \text{Cov}(\alpha) P_n^T = P_n P_n^T = \Sigma_n,$$

missä käytimme identiteettiä $\text{Cov}(X, Y) = \mathbb{E}(XY^T) - \mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y)^T$. Siis $X_n \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_n)$, joten redusoidulla jakaumalla on joitakin jakauman X ominaisuuksia.

Huomautus 4.23. Reduktiokuvaus $P_n : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^N$ kuvaa redusoidun parametrin reaalisaaion $\alpha_0 \sim \alpha$ täyden avaruuden reaalisaaatioksi $x_0 = P_n \alpha_0$. Tällöin $x_0 \sim X_n \approx X$, missä ainoan huolen aiheuttaa approksimaation tarkkuus.

Olkoon nyt käsiteltävänä tilastollinen (epälineaarinen) inversio-ongelma

$$Y = F(X) + E,$$

missä oletamme additiivisen Gaussisen virhemallin $E \sim \mathcal{N}(0, \Gamma)$, joka on riippumaton tuntemattomasta X . Oletetaan, että olemme saaneet mittauksen $y_{\text{obs}} \sim Y$. Olkoon tuntemattoman priorijakauma $X \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$. Jos $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ on kääntyvä matriisi, niin merkitsemme $\|x\|_A^2 := x^T A^{-1} x$ jokaisella $x \in \mathbb{R}^d$. Voimme esimerkin 4.7 perusteella kirjoittaa inversio-ongelman ratkaisulle kaavan

$$(4.67) \quad \pi_{\text{post}}(x | y_{\text{obs}}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\|f(x) - y_{\text{obs}}\|_{\Gamma}^2 + \|x\|_{\Sigma}^2)\right).$$

⁶⁴Keskiarvosta tehty oletus on vain kaavoja yksinkertaistava.

⁶⁵Koska Σ on positiivisesti semidefiniitti, niin sen singulaariarvohajotelma ja ominaisarvohajotelma ovat samat. Siis myös SVD kävisi.

Edelleen pystymme redusoitujen parametrien α avulla kirjoittamaan kaavan (4.67) muodossa

$$(4.68) \quad \pi_{\text{post}}(\alpha | y_{\text{obs}}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\|f(x_n(\alpha)) - y_{\text{obs}}\|_{\Gamma}^2 + \|\alpha\|_{I_n}^2)\right).$$

Kun määrittelemme Gaussisen priorijakauman, niin voimme tehdä edellisessä alaluvussa esitettyä MCMC-laskentaa redusoiduilla satunnaismuuttujilla. Saadun MCMC-ketjun voi helposti muuntaa täyteen avaruuteen käyttämällä kuvausta P_n , kuten edellinen huomio ehdottaa. Redusointia voidaan jopa soveltaa analyttisissä, minimointiin perustuvissa, ratkaisumenetelmissä, missä minimoimme joko regularisoidun funktionaal-

$$(4.69) \quad \frac{1}{2}(\|f(x_n(\alpha)) - y_{\text{obs}}\|_{\Gamma}^2 + \|\alpha\|_{I_n}^2)$$

(MAP-estimaatti) tai regularisoimattoman

$$(4.70) \quad \frac{1}{2} \|f(x_n(\alpha)) - y_{\text{obs}}\|_{\Gamma}^2.$$

(ML-estimaatti).

Oletetaan, että mallilla F on olemassa Jacobin matriisi $J_F(x)$. Tällöin voimme laskea mallin F Jacobin matriisin redusoitujen parametrien suhteen ketjusäännöllä käyttäen kaavaa

$$(4.71) \quad J_F(x_n(\alpha)) = J_F(x)J_{x_n}(\alpha) = J_F(x)P_n.$$

Esimerkki 4.24 (Log-normaalijakauma ja keskiarvon siirto). Olkoon $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$. Olkoon P_n ja α määritelty satunnaismuuttujalle $Y := X - \mu$, kuten yllä. Jos haluamme redusoida log-normaalijakauman $B \sim \log \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$, niin voimme toimia seuraavasti. Tehdään muunnos

$$(4.72) \quad B_n := \exp(P_n \alpha + \mu),$$

missä $P_n \alpha \sim Y_n \approx Y$ eli $P_n \alpha + \mu \sim Y_n + \mu \approx X$. Edelleen $\exp(P_n \alpha + \mu) \sim B_n \approx \exp(X) = B$. \triangle

Huomaamme kaavasta (4.64), että jos ominaisarvot ovat hyvin lähellä nollaa, niin näiden vaikutus lineaarikuvaukseen on erittäin pieni. Jotta menetelmä voi toimia, niin tarvitsemme sopivanlaisen kovarianssimatriisin. Esitellään seuraavaksi kovarianssityyppi, joka on käytännössä helppoa määritellä ja mahdollistaa tehokkaan dimension redusoinnin.

Määritelmä 4.25. Kutsumme Gaussisen satunnaisvektorin $X \in \Omega(\mathbb{R}^N)$ kovarianssimatriiseja

$$(4.73) \quad GP(\theta, L)_{ij} := \theta \exp\left(-\frac{d(i, j)^2}{2L^2}\right)$$

Gaussisen prosessin kovarianssiksi⁶⁶, missä $d(i, j)$ koordinaattien i ja j tilastollinen etäisyys, $L \in \mathbb{R}_+$ on korrelaatiopituus ja $\theta \in \mathbb{R}_+$ on skaalatekijä.

Kaavassa (4.73) luonnollinen etäisyys voidaan määritellä sijaintivektorilla $x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N$, missä $d(i, j) := \|x_i - x_j\|$. Käytännössä mitä suurempi korrelaatiopituus valitaan, niin sitä nopeammin ominaisarvot suppenevat kohti nollaa. Tämän ominaisuuden vuoksi Gaussisen prosessin kovarianssin käyttö dimension redusointiin on suoraan vaivasta. On huomaamisen arvoista, että skaalaparametri θ määrittää koordinaattien marginaalijakaumien hajonnat.

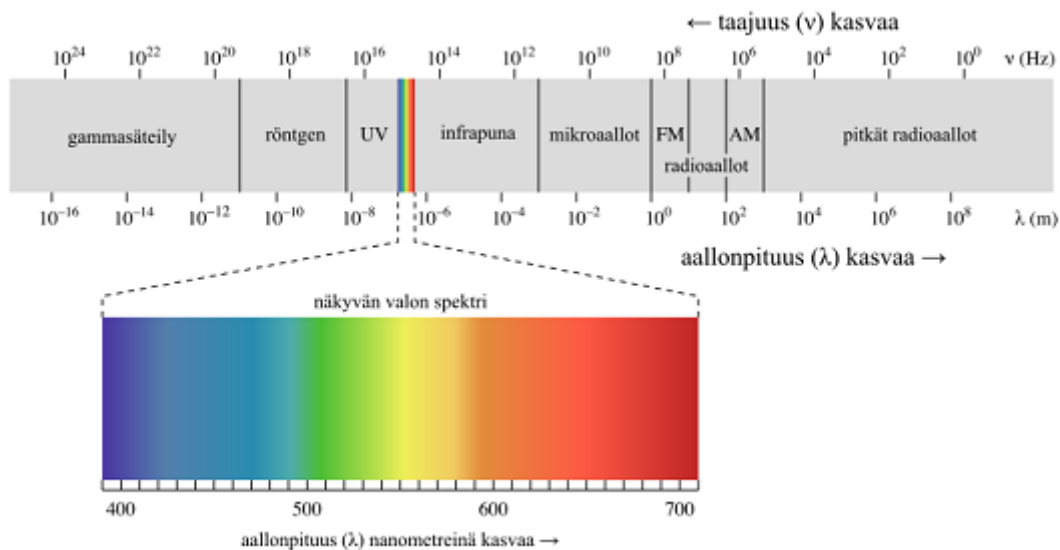
⁶⁶Yleisessä tapauksessa tämä voisi olla ääretönulotteinen, josta nimitys ”prosessi” juontuu.

5 Sovellus: Kasvihuonekaasujen kaukokartoitus

Tarkoituksenamme on esittää vain yleiskuva ilmakehän kaukokartoituksesta, joten emme käy läpi kaikkia fysikaalisia yksityiskohtia. Tämän lisäksi paneudumme tarkemmin ilmakehän kaukokartoitukseen liittyvään inversio-ongelmaan, erityisesti sen matemaattiseen rakenteeseen ja numeeriseen ratkaisemiseen. Luvun lopuksi esitämme kasvihuonekaasujen kaukokartoitukseen liittyviä realistisia esimerkkejä. Olemme teorian osalta käyttäneet lähteinä kirjoja *An Introduction to Atmospheric Radiation* [15, Liou] ja *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice* [22, Rodgers].

5.1 Ilmakehän kaukokartoituksesta

Ilmakehän kaukokartoitus on esimerkki epäsuorasta mittaustilanteesta. Siinä mittalaite⁶⁷ mittaa kohteen läpi tullutta sähkömagneettista säteilyä, jolloin saamme kohteesta spektrin. Tästä spektristä pyrimme päättämään kohteen ominaisuuksia mittaushetkellä. Mittalaite voi sijaita esimerkiksi maassa, satelliitissa tai lentokoneessa. Varsinainen mittaus tapahtuu *spektroskooppisilla* menetelmillä. *Spektri* kuvaa säteilyn intensiteettiä aallonpituuden funktiona. Tässä työssä tarkastelluilla aallonpituuksilla ilmakehä ei itse tuota säteilyä merkittävästi, vaan se *absorboi* auringon tai muun lähteen säteilyä. Näin ollen pystymme vertailemaan lähteen ns. *referenssispektriä* ilmakehän läpi mitattuun spektriin. Säteilyn kulkuun ilmakehässä vaikuttavat myös monet muutkin fysiikan ilmiöt, joista tärkein on *sironta*.



Kuva 1: Sähkömagneettisen säteilyn luokittelu. Lähde: Wikimedia Commons, http://fi.wikipedia.org/wiki/Sähkömagneettinen_säteily [22.5.2014].

Mittaustulokseen vaikuttaa myös koetilanteen *geometria*, jolla tarkoitamme kohteen, havaitsijan, auringon ja maapallon sijainteja koetilanteessa. On syytä huomata, että tarkat ilmakehän ulkopuoliset etäisyydet ovat lähes merkityksettömiä. Tarkastellaan tilannetta, jossa havaitsija ja kohde ovat molemmat maapallon pinnan normaalisuoralla; tällöin kyseessä on *nadiiri-geometria*, jos havaitsija on kohteen yläpuolella, ja vastaavasti kyseessä

⁶⁷Mittalaitteet jaotellaan usein *aktiivisiin* ja *passiivisiin*. Aktiiviset mittalaitteet luovat itse signaalin, ja passiiviset käyttävät jotakin luonnollista lähdettä, kuten aurinkoa tai muita tähtiä.

on *zeniitti-geometria*, jos havaitsija on kohteen alapuolella. Näiden lisäksi tärkeä erikoistapaus on ns. *suoraan aurinkoon katsova -geometria*, jossa kohde on auringon ja havaitsijan välissä.

5.1.1 Kasvihuonekaasujen kaukokartoituksesta

Merkittävimpiä kasvihuonekaasuja ovat *vesihöyry* (H_2O), *hiilidioksidi* (CO_2), *metaani* (CH_4), *typpioksiduuli* (N_2O) ja *otsoni* (O_3). Kasvihuonekaasut lämmittävät ilmakehää, sillä ne absorboivat voimakkaasti infrapunasäteilyä. Täten ilmakehän kaukokartoituksessa kasvihuonekaasumolekyyliden määrää voidaan arvioida infrapuna-alueen mittauksilla⁶⁸.

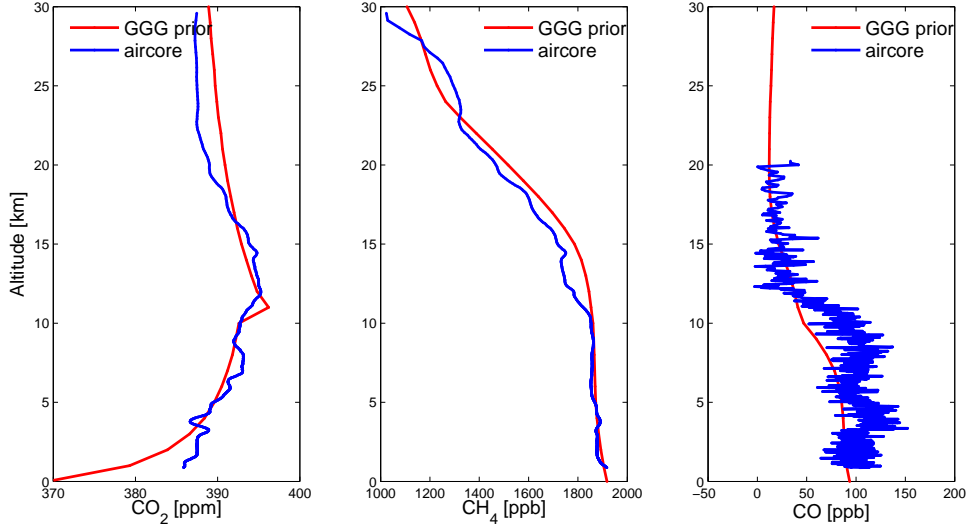
Kasvihuonekaasut ovat olleet viime vuosina yhä kasvavan kiinnostuksen kohteena. Tästä kertoo esimerkiksi useat satelliittiprojektit, kuten

- a) vuonna 2009 laukaistu japanilainen *GOSAT*-satelliitti (JAXA, [28, Yoshida et al.]);
- b) vuoden 2014 aikana laukaistava yhdysvaltalainen *OCO-2*-satelliitti (NASA, [5, Crisp et al.]);
- c) Hollannin ja ESA:n *TROPOMI*-instrumentti (Netherlands Space Office ja ESA, [29, Veefkind et al.]), joka on määrä laukaista vuoden 2016 alkupuolella.

Myöskin maanpintamittauksia tehdään useissa eri paikoissa. Esimerkiksi Ilmatieteen laitos tekee omia mittauksia *FTIR*-instrumentilla (eng. *Fourier transform infrared spectroscopy*, ks. [32, Database of Arctic Research Centre]). Näiden mittauksien perusteella myöhemmin julkaistavan datan inversio tehdään *GGG-algoritmilla* ([31, Wunch et al.]). Olemme työn aikana vertailleet uuden inversio-menetelmämme antamia tuloksia GGG-algoritmin vastaaviin tuloksiin. Näitä tuloksia esitellään tämän luvun lopussa.

In-situ-tiheysprofiilimittauksia pystytään tekemään esimerkiksi *AirCore*-mittalaitteella ([13, Karion et al.]). Suorien mittauksien heikkous on se, että niitä tulisi tehdä todella paljon, jos haluamme saada kattavan kuvan ilmakehästä globaalilla tasolla. Tällöin siis tarvitsisimme globaalisti kattavien mittausten tekoon useita mittalaitteita ja paljon henkilöstöä. Tämän vuoksi kaukokartoitusmenetelmien kehittäminen on hyvin perusteltua.

⁶⁸Eri molekyyileillä on yksilölliset *absorptio-profiilit*.



Kuva 2: Kaikissa kolmessa kuvaajassa (vasemmalta lueteltuna CO_2 , CH_4 ja CO) esitetään yksi GGG-algoritmin käyttämä prioriprofili ja yksi AirCore-mittaus: y-akselilla on korkeus ja x-akselilla sitä vastaava kaasumolekyylin tiheys joko ppm- tai ppb-yksikössä (eng. particles per million/billion).

5.2 Säteilynkulkumallista ja inversio-ongelmasta

Merkitään *säteilyn intensiteettiä* $I(\lambda)$, missä λ on *aallonpituus*⁶⁹. Kun säteily kulkee matkan ds , niin merkitään säteilyn intensiteetin muutosta $dI(\lambda)$. Siis uusi säteilyn intensiteetti on $I(\lambda) + dI(\lambda)$.

Voimme esittää säteilyn intensiteetin vähenemisen kaavalla

$$(5.1) \quad dI_-(\lambda) := -k(\lambda)\rho(s)I(\lambda)ds,$$

missä $\rho(s)$ on väliaineen *tiheys* ja $k(\lambda)$ väliaineen *kokonaisvaikutusala*⁷⁰ (eng. *mass extinction cross section*). Kokonaisvaikutusala ottaa huomioon väliaineen absorptioon ja sen aiheuttaman *sironnan*, mutta ei kuitenkaan *monikertasironnata*⁷¹ ja *emissiota*, jossa aine vapauttaa aiemmin absorboimaansa energiaa. Vastaavasti voimme esittää säteilyn intensiteetin kasvun kaavalla

$$(5.2) \quad dI_+(\lambda) := j(\lambda)\rho(s)ds,$$

missä $j(\lambda)$ on väliaineen *lähdekerroin* (eng. *source function coefficient*). Lähdekerroin ottaa huomioon väliaineen emittoiman säteilyn ja monikertasironnan. Yhdistämällä kaavat (5.1) ja (5.2) saamme säteilyn muutokselle realistisemmän mallin

$$(5.3) \quad dI(\lambda) := dI_-(\lambda) + dI_+(\lambda) = -k(\lambda)\rho(s)I(\lambda)ds + j(\lambda)\rho(s)ds.$$

Määritellään sitten *lähdefunktioksi*

$$(5.4) \quad J(\lambda) := j(\lambda)/k(\lambda).$$

⁶⁹Toisinaan käytetään myös *aaltolukua* $\nu := 1/\lambda$. Spektroskopiassa ja yleisessä fysiikassa aaltoluvun määrittelmä eroaa kertoimen 2π osalta.

⁷⁰Myös vain *ekstinktiokerroin*; sen yksikkö on m^2/kg .

⁷¹Siis säteily oleellisesti siroaa takaisin kulkureitilleen.

Voimme nyt järjestellä kaavan (5.3) muotoon

$$(5.5) \quad \frac{dI(\lambda)}{k(\lambda)\rho(s)ds} = -I(\lambda) + J(\lambda),$$

jota kutsutaan *yleiseksi säteilynkulkuyhtälöksi* (eng. *general radiative transfer equation*).

Johdetaan sitten Beerin-Lambertin-Bouguer'n laki tekemälle sopivia, ilmakehän kaukokartoituksessa usein realistisia, approksimaatioita. Asetetaan kaavassa (5.5) $J(\lambda) \equiv 0$ eli emme ota huomioon monikertasirontaa tai ilmakehän aiheuttamaan emissiota. Kaava (5.5) määrittää nyt muuttujan s suhteen lineaarisen 1. kertaluvun differentiaaliyhtälön, missä tuntematon on $I(\lambda, s)$ ja kerroinfunktio on $k(\lambda)\rho(s)$. Olkoon säteilyn intensiteetti $I(\lambda, a)$, kun säteily on kohdassa $s = a$. Tällöin ratkaisemalla differentiaaliyhtälön (5.5) saamme kaavan

$$(5.6) \quad I(\lambda, b) = I(\lambda, a) \exp\left(-\int_a^b k(\lambda)\rho(s)ds\right),$$

missä $a \leq b$. Jos väliaine on tasainen⁷² läpi säteilyn kulkeman reitin, niin $k(\lambda)$ ei riipu sijainnista s . Oletetaan, että näin olisi. Nyt voimme määritellä

$$(5.7) \quad u := \int_a^b \rho(s)ds.$$

Tällöin kaavan (5.6) voi esittää muodossa

$$(5.8) \quad I(\lambda, b) = I(\lambda, a)e^{-k(\lambda)u},$$

joka tunnetaan *Beerin⁷³-Lambertin⁷⁴-Bouguer'n⁷⁵ lakina*.

Kaavan (5.6) perusteella määrittelemme *transmissioksi*

$$(5.9) \quad \mathcal{T}(\lambda) := \frac{I(\lambda, b)}{I(\lambda, a)}.$$

Jos $I(\lambda, a)$ on auringon säteilyn intensiteetti ennen sen tuloa ilmakehään ja $I(\lambda, b)$ säteilyn intensiteetti maanpinnalla, niin tällöin $0 \leq I(\lambda, b) \leq I(\lambda, a)$ eli $\mathcal{T}(\lambda) \in [0, 1]$.

Määrittelemme yhtälöllä

$$(5.10) \quad \tau(\lambda) := \int_a^b k(\lambda)\rho(s)ds$$

optisen paksuuden $\tau(\lambda)$ (eng. *optical depth*). Nyt siis kaavojen (5.6), (5.9) ja (5.10) perusteella voimme kirjoittaa, että

$$(5.11) \quad \mathcal{T}(\lambda) = e^{-\tau(\lambda)}.$$

⁷²Käytetään myös sanaa *homogeeninen*; aine on tasajakautunutta ja lämpötila sekä paine ovat vakioita.

⁷³August Beer (1825–1863) oli saksalainen fyysikko, kemisti ja matemaatikko, joka teki tutkimusta etenkin optiikan alalla.

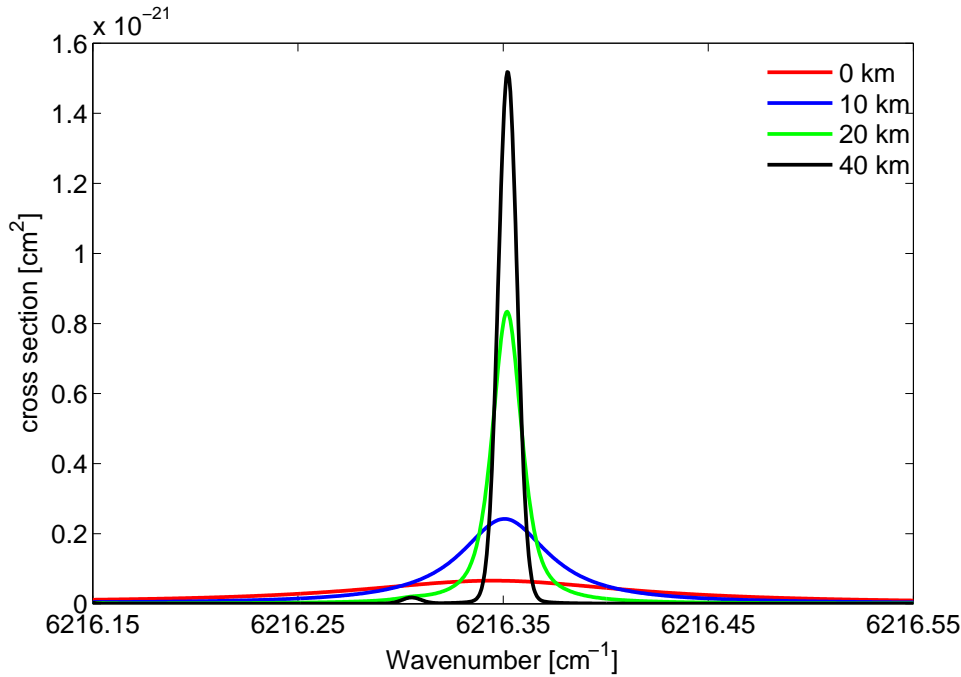
⁷⁴Johann Lambert (1728–1777) oli sveitsiläinen matemaatikko, fyysikko, filosofi ja astronomi, joka tunnetaan parhaiten *todistuksesta π :n irrationaalisuudelle*.

⁷⁵Pierre Bouguer (1698–1758) oli ranskalainen matemaatikko, geofyysikko ja astronomi, joka vuonna 1729 julkaistussa tutkimuksessa *Essai d'optique sur la gradation de la lumière* esitti ensimmäisenä ilmakehän absorptioon liittyviä käsitteitä.

Jos oletetaan, että eri aineiden vaikutukset eivät korreloi keskenään, niin voimme esittää optisen paksuuden τ väliaineessa olevien eri aineiden vaikutuksien summana

$$(5.12) \quad \tau(\lambda) = \sum_{i=1}^N \int_a^b k_i(\lambda, T(s), P(s)) \rho_i(s) ds,$$

missä $i = 1, \dots, N$ on *aineiden indeksointi*, k_i i . ainetta vastaava vaikutusala ja $T(s)$ sekä $P(s)$ ovat lämpötila ja paine pisteessä s . Emme tässä esityksessä käy läpi yksityiskoh-
tia, miten vaikutusalfunktiot k_i voidaan määrittellä analyyttisesti tai laskea numeerises-
ti. Käytännössä oletetaan, että niiden arvot ovat numeerisesti tunnettuja (ks. [33, The
HITRAN database]), joten pystymme laskemaan suoran mallin.



Kuva 3: CO_2 :n vaikutusalat neljällä eri korkeudella, kun paine ja lämpötila eri korkeuksilla ovat tunnettuja: x -akselilla on aaltoluku ja y -akselilla sitä vastaava vaikutusala. Huomaa, että kuvaajassa on käytetty hyvin kapeaa aaltolukuikkunaa.

Voimme linearisoida epälineaarisen yhtälön (5.11) ottamalla puolittain logaritmin, jolloin inversio-ongelma palautuu oleellisesti yhtälön (5.12) ratkaisemiseen, missä tuntemattomia ovat funktiot ρ_i , joita kutsutaan *tiheysprofileiksi*. Fredholmin 1. lajin integraaliyhtälö on yleisesti muotoa

$$(5.13) \quad f(x) = \int_a^b K(x, t) \phi(t) dt,$$

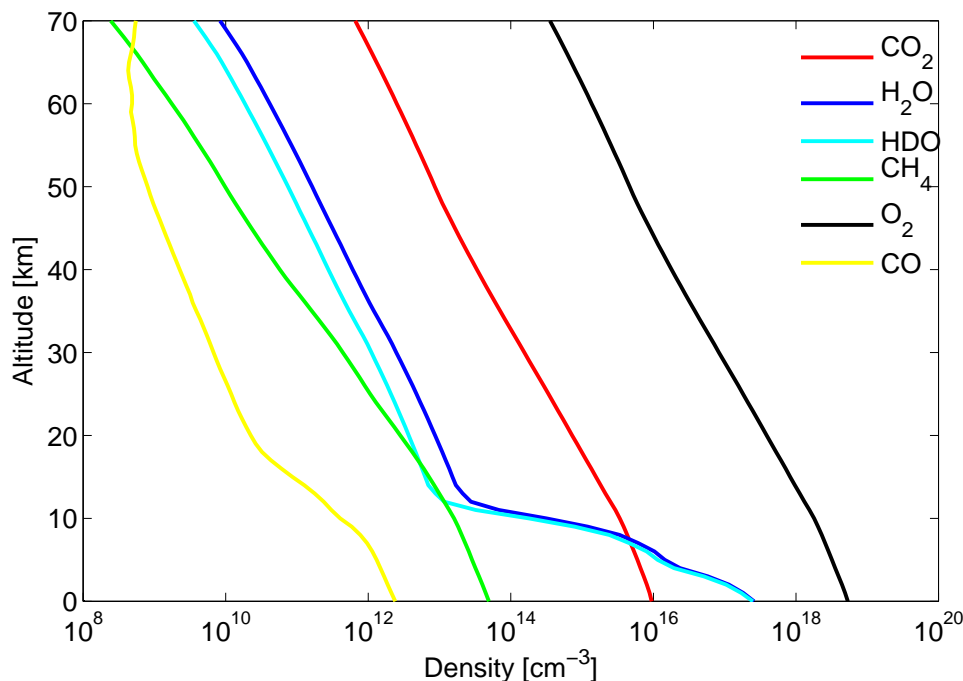
missä ϕ on tuntematon funktio. Nyt esitetty kaava (5.12) koostuu siis Fredholmin 1. lajin integraaliyhtälöiden (5.13) äärellisestä summasta.

Matemaattisena inversio-ongelmana ilmakehän kaukokartoitus kuuluu *optisen tomografian* piiriin. Tällaista puhtaan matematiikan lähestymistä on käsitelty lyhyesti lähteessä [11, Luvut 6.1.1 *Radon Transform*, 6.4 *Optical Tomography* ja 7.8 *Optical Tomography*]

in *Anisotropic Media*]. Koska kaavassa (5.12) ilmenevien integraalien ytimet eivät ole suljetussa muodossa, niin analyytinen lähestyminen ongelmaan on vaikeaa⁷⁶.

5.3 Laskennallisista ratkaisumenetelmistä

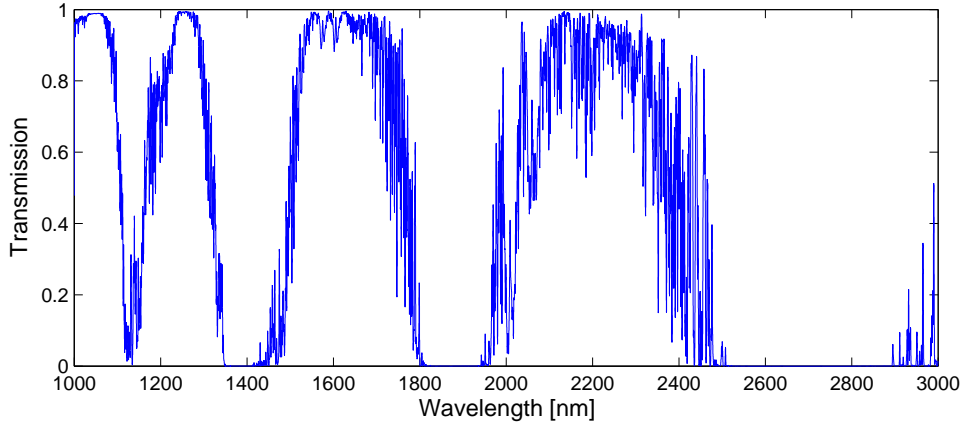
Inversio-ongelman *data-avaruuden* muodostaa mahdollisten transmittanssien joukko, missä transmittanssi on jatkuva funktio $[\lambda_1, \lambda_2] \rightarrow [0, 1]$. Käytännössä saamme transmittanssista vain äärellisen määrän havaintoja, jotka sisältävät myös *mittausvirheen*. Inversio-ongelman *tila-avaruuden* muodostaa kaikkien eri aineiden erilaisten tiheysprofilikombinaatioiden joukko, missä tiheysprofiilit ovat jatkuvia funktioita $[0, s_\infty] \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$ ⁷⁷. Käytännössä rajoitamme data-avaruuden vain niihin tiheysprofileihin, joista haluamme ja uskomme saavamme informaatiota. Lisäksi profileita arvioidaan vain äärellisessä määrässä eri korkeuksia. Edellisten lisäksi simulaatioissa tulee asettaa vallitseva mittausgeometria ja muut välttämättömät parametrit. Käytämme simulaatioissa suorana mallina Ilmatieteen laitoksella kehitettyä *SWIRLAB-mallia* (*Short-Wavelength Infrared Laboratory*). Malliin liittyviä julkaisuja ei vielä ole, mutta olemme aikeissa kirjoittaa sellaisen myöhemmin [henkilökohtainen keskustelu 2014, Simo Tukiainen].



Kuva 4: SWIRLAB-mallissa käytetty priorii-ilmakehä (esimerkkityla): y-akselilla on korkeus ja x-akselilla sitä vastaava kaasumolekyylin tiheys. Eri väriset käyrät kuvaavat eri kaasumolekyylejä. Käytetyt arvot on otettu GGG-algoritmista.

⁷⁶Yleisesti integraaliyhtälöt ovat kuitenkin mielenkiintoinen matemaattinen aihe (ks. esim. [30, Volterra] ja [10, Hochstadt]).

⁷⁷Ylärajaksi voidaan valita sellainen korkeus, jossa ilmakehän vaikutus transmittanssiin on riittävän pieni. Esimerkiksi $s_\infty = 70$ km.



Kuva 5: Yksi SWIRLAB-mallin antamista transmittansseista (esimerkkidata): x -akselilla on aallonpituus ja y -akselilla sitä vastaava transmittanssi.

5.3.1 Mallin diskretoinnista

Ilmakehä diskretoidaan jakamalla se tasavälisesti $r_j = r_1 + (j - 1)\Delta r$ säteisten pallopintojen väliin, missä $r_1 \approx 6400$ km on *maapallon säde*, Δr on pallopintojen etäisyys ja $j = 1, \dots, d$.

Merkitään indeksillä $i = 1, \dots, N$ eri kaasuja, kuten teimme aiemminkin. Olkoot

$$\rho_i = (\rho_{i,1}, \dots, \rho_{i,d})^T$$

ilmakehän diskretointia vastaavat kaasujen tiheysporfilit ja

$$k_i(\lambda) = (k_{i,1}(\lambda), \dots, k_{i,d}(\lambda))$$

ilmakehän diskretointia vastaavat kaasujen vaikutusalat. Kirjoitetaan

$$\rho = (\rho_1, \dots, \rho_N), \quad k(\lambda) = (k_1(\lambda), \dots, k_N(\lambda)).$$

Olkoon lisäksi saatu mittausta

$$(5.14) \quad y = (y_1, \dots, y_m),$$

missä y_j on aallonpituutta λ_j vastaava transmissionin suuruus.

Voimme tällöin kirjoittaa suoran mallin (5.11) diskretoidussa muodossa

$$(5.15) \quad f(\rho) = (f_1(\rho), \dots, f_m(\rho)),$$

missä

$$(5.16) \quad f_i(\rho) = \exp\left(-\sum_{i=1}^N \rho_i k_i(\lambda_i)\right).$$

5.3.2 Inversio-ongelman redusoinnista ja ratkaisemisesta laskentamenetelmällä

Ensinnäkin on syytä huomata, että malli (5.15) on selvästi derivoituva eli voimme laskea jokaisen koordinaatin derivaatan jokaisen kaasun ja korkeuden suhteen. Voimme määrittellä diskretoidulle mallille neliösumman

$$(5.17) \quad F(p) := \frac{1}{2} \|f(\rho) - y\|^2,$$

jolloin pystyisimme soveltamaan LMA:ta minimointiongelmaan. Kuitenkin inversio-ongelmassa on $d \times N$ tuntematonta ja ongelma on huonosti määrätty Hadamardin mielessä. Lisäksi suuri muuttujien määrä tekisi ongelman ratkaisusta raskasta.

Mallia voidaan redusoida asettamalla kiinteät *prioriprofilimuodot* \bar{p}_i ja hakemalla sellaiset *skaalatekijät* $\theta_i \in \mathbb{R}_+$, jotka minimoivat neliösumman

$$(5.18) \quad F(\theta) := \frac{1}{2} \|f(\theta) - y\|^2,$$

missä

$$f_l(\theta) = \exp\left(-\sum_{i=1}^N \theta_i \bar{p}_i k_i(\lambda_l)\right), \quad \theta = (\theta_1, \dots, \theta_N).$$

Esimerkiksi [31, Wunch et al.] tekevät näin GGG-algoritmiin perustuvassa inversiossa.

Ongelmaa voidaan kuitenkin redusoida tehokkaamminkin, kun käytämme alaluvussa 4.3. esitettyjä tekniikoita. Vaikka olemme löytäneet reduktiokuvaukset hyödyntäen tilastollista ajattelutapaa, niin se ei estä käyttämästä niitä analyttisesti. Asetetaan jokaiselle kaasulle kovarianssi $GP_i(\phi_i, L_i)$, jonka käyttäminen voidaan perustella tiheysprofilien jatkuvuudella. Sovelletaan tähän kovarianssiin dimension redusointia, missä $n \leq d$ (tyypillisesti $n \approx \frac{d}{10}$). Nyt siis

$$\rho_i = P_{n_i, i} \alpha_i,$$

missä $P_{n_i, i}$ on i . kaasun reduktiokuvaus ja α_i on i . kaasun tiheysprofilin esitys redusoidussa avaruudessa. Siis voimme minimoida neliösumman

$$(5.19) \quad F(\alpha) := \frac{1}{2} \|f(\alpha) - y\|^2,$$

missä

$$f_l(\alpha) = \exp\left(-\sum_{i=1}^N P_{n_i, i} \alpha_i k_i(\lambda_l)\right), \quad \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N).$$

Simulaatioissa, missä olemme vertailleet menetelmiä (5.18) ja (5.19), menetelmä (5.19) on ollut lupaava. Olemme saaneet alustavasti lupaavia tuloksia myös FTIR-datan kanssa. Lisäksi esitetty menetelmä mahdollistaa mittauksesta saatavan epäsuoran tiheysprofilien korkeusinformaation tutkimisen.

Käytännössä olemme rajoittaneet mahdolliset tiheysprofiilit positiivisiksi esimerkin 4.24 ideaa hyödyntäen. Lisäksi yksinkertaisuuden vuoksi asetamme prioriprofilimuodot \bar{p}_i , joita skaalaamme jokaisessa korkeudessa *skaalafunktioilla* $c_i : [a, b] \rightarrow]0, \infty[^{78}$. Skaalafunktiot diskretoidaan ilmakehän suhteen, ja asetamme niille kovarianssit $GP_i(\phi_i, L_i)$, minkä jälkeen sovellamme niihin dimension redusointia. Tällöin $c_i = \exp(P_{n_i, i} \alpha_i)$, ja minimoimme funktionaalia

$$(5.20) \quad F(\alpha) := \frac{1}{2} \|f(\alpha) - y\|^2,$$

missä

$$f_l(\alpha) = \exp\left(-\sum_{i=1}^N \exp(P_{n_i, i} \alpha_i + \log(\bar{p}_i)) k_i(\lambda_l)\right), \quad \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N).$$

⁷⁸Tällöin tiheyden kokoluokka pysyy järkeväen suuruisena eri korkeuksissa. Lisäksi koska jokainen positiivinen tiheysprofiili $\rho(s)$ voidaan esittää yksikäsitteisellä tavalla muodossa $c(s)\bar{\rho}(s)$, missä $\bar{\rho}(s)$ on kiinteä tiheysprofiili, niin skaalafunktioon perustuva ratkaisutapa ei rajoita ratkaisuvaryuutta.

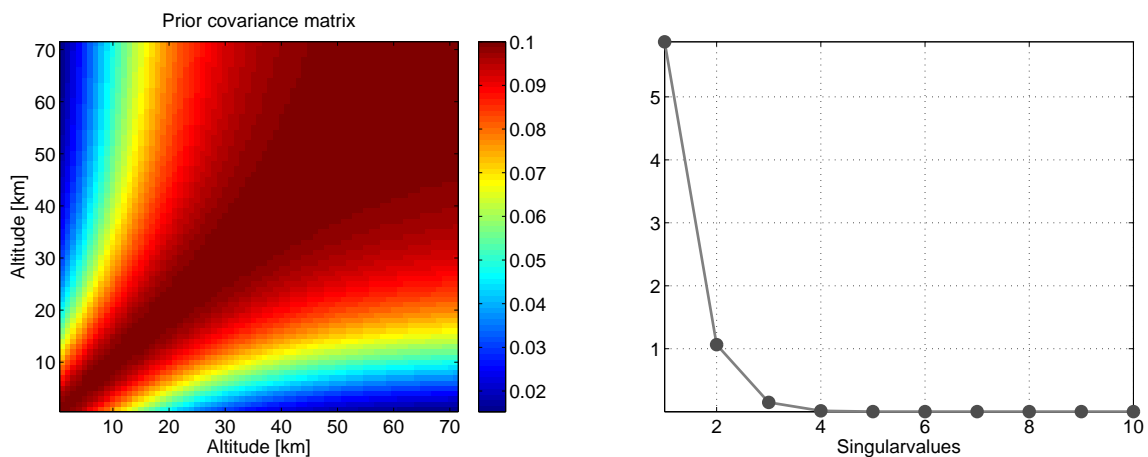
Iterointi on tavallista aloittaa pisteestä $\alpha = 0$, jolloin $\exp(P_{n_i,i}\alpha_i) = 1$ jokaisella $i = 1, \dots, N$ eli lähtöpiste on *priori-ilmakehä* $(\bar{\rho}_1, \dots, \bar{\rho}_N)$.

Esitetään seuraavaksi, miten edellä olleita ajatuksia voidaan hyödyntään tilastollisten inversio-ongelmien ratkaisemisessa MCMC-menetelmällä – mikä tavallaan onkin niiden luonnollinen käyttöympäristö. MCMC-ketjun *aloituspiste* kannattaa etsiä LMA:n avulla käyttäen edellä olleita menetelmiä. Tämä säästää laskenta-aikaa ja tekee AM-algoritmista vakaamman. Koska AM-algoritmi adaptoi *ehdotusjakaumaa*, niin ehdotusjakauman optimaalinen asettaminen ei ole, perinteisiin MCMC-menetelmiin verraten, yhtä kriittistä.

Kun oletamme Gaussisen *virheen* $E \sim \mathcal{N}(0, \Gamma)$, niin voimme soveltaa alaluvussa 4.3 esitettyä kaavaa (4.68) edellä olleisiin redusoituihin suoriin malleihin (5.18), (5.19) ja (5.20). Tällöin *priorijakauma* on redusoitu log-normaalijakauma ja *uskottavuusfunktio* määräytyy virheen sekä suoran mallin perusteella. Nyt posteriorijakauman voi ratkaista käyttäen MCMC-menetelmää. Olemme käyttäneet simuloinneissa AM-algoritmia.

5.4 Simulointeja ja FTIR-datan inversioita

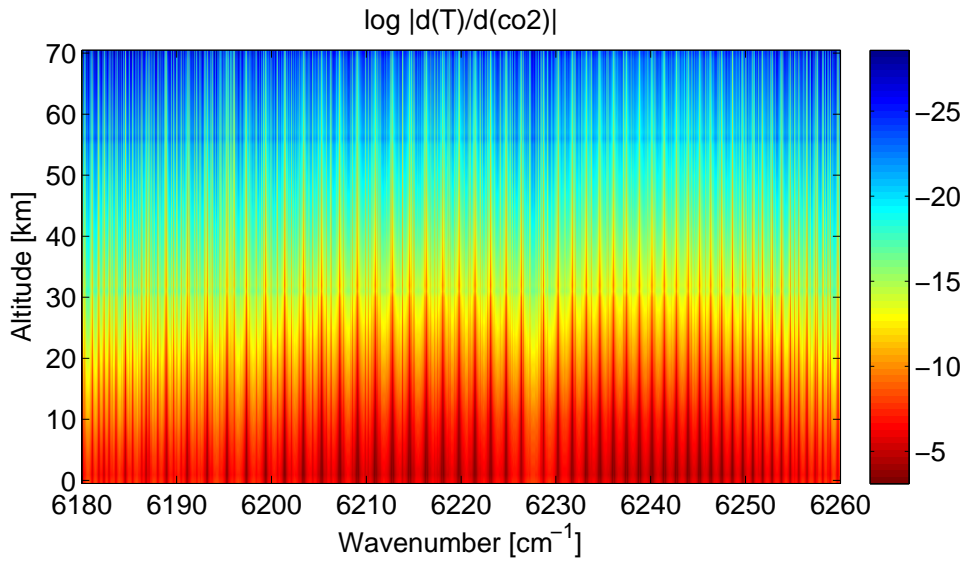
Esittelemme seuraavaksi erilaisten simulointien tuloksia. Olemme tehneet kaikki tässä esittävät simulaatiot lähes samoilla parametreilla (luonnollisesti skaaparametri- ja skaalafunktio menetelmien priorijakaumat tulee asettaa eri tavalla). Mallissa käytetty *priori-ilmakehä* on esitetty kuvassa 4. Olemme käyttäneet mittauksille kuvassa 8 olevaa *aaltolukuikkunaa*. Tässä ikkunassa CO₂ absorboi voimakkaasti ja esitämme pääsääntöisesti siihen liittyviä tuloksia, vaikka mallissa ovat mukana myös H₂O, HDO ja CH₄. Olemme käyttäneet simuloituissa mittauksissa ja suorassa mallissa mittaukselle eri dimensiota ja instrumentti-funktiota. Kuitenkin tilajoukon dimensiot ja ilmakehän diskretointi ovat molemmissa tapauksissa samassa muodossa⁷⁹. Olemme skaalafunktio menetelmässä redusoineet dimension $n = 70$ dimensioksi $d = 5$, mikä kuvan 6b perusteella vaikuttaa järkevältä.



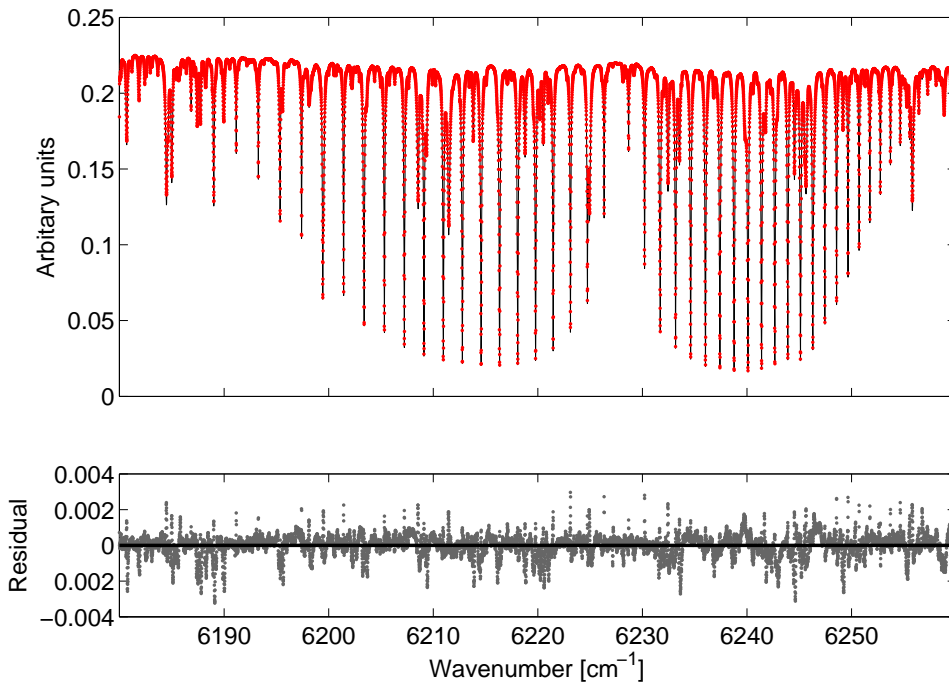
(a) CO₂:n skaalafunktion GP-kovarianssi. (b) Kovarianssin ensimmäiset singulaariarvot.

Kuva 6: Kuvasta (a) nähdään, että kovarianssi sitoo skaalafunktion ylemmät korkeudet vahvasti alempiin. Tämä on tehty sen vuoksi, että neljösummassa olevaa informaatiota saadaan suhteessa paljon enemmän matalilta korkeuksilta (vrt. kuva 7). Kuvasta (b) nähdään, että singulaariarvot suppenevat nopeasti kohti nollaa.

⁷⁹Siis joitakin ns. *inverse crime* -ominaisuuksia on vielä tietoisesti jäänyt näihin alustaviin simulaatioihin. Esimerkiksi kohina ei ole oikeasti valkoista kohinaa (vrt. kuvat 8 ja 14).



Kuva 7: Transmittanssin gradientti CO_2 :n skaalafunktion ja korkeuksien suhteen eräässä pisteessä: y -akselilla on korkeus ja x -akselilla aaltoluku, kun taas derivaatan suuruusluokka on värikoodattu (ks. kuvassa esitetty kaava). Kuvaajassa voi nähdä CO_2 :n absorptiopiikit (vrt. kuva 3). Lisäksi absorptio on voimakkaampaa alhaisilla korkeuksilla, koska CO_2 :n määrä on siellä suurempaa (vrt. kuva 4).



Kuva 8: Suoran mallin antaman ML-estimaatin (skaalatekijämenetelmä) ja FTIR-mittauksen erotus. Ylemmässä kuvassa mustalla käyrällä on esitetty mallin antama transmittanssi ja punaisina pisteinä FTIR-mittaus. Alemmassa kuvassa on laskettu mallin ja mittauksen erotus eli residuaalit. Kuvaajasta nähdään, että malli ja mittaus eivät vastaa täysin toisiaan.

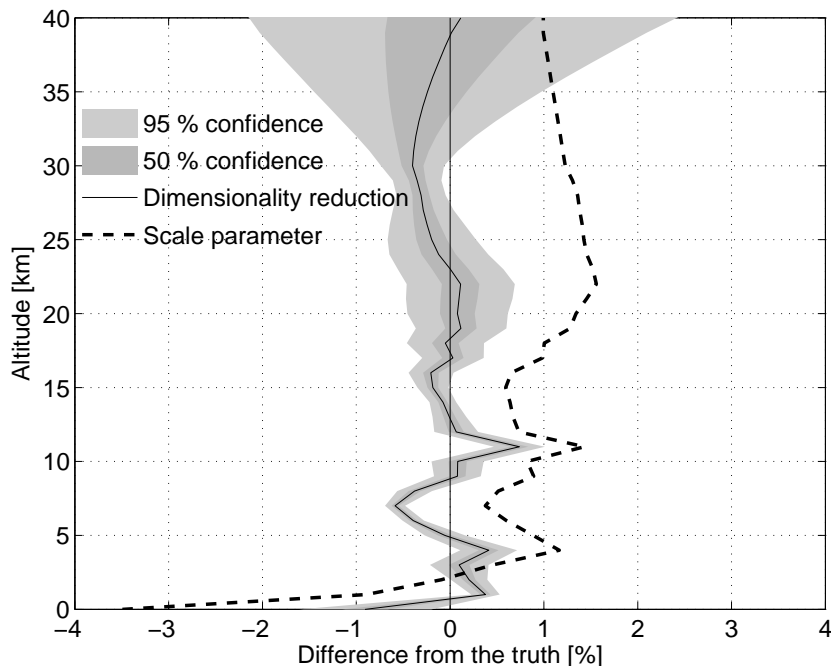
Inversio 1: AirCore-simulaatio / LMA

Simuloimme tässä kohinallisen mittauksen (additiivista valkoista kohinaa, jonka kokoluokka on 0.02%), jossa todellinen CO_2 -profiili perustuu AirCore-mittaukseen (interpo-

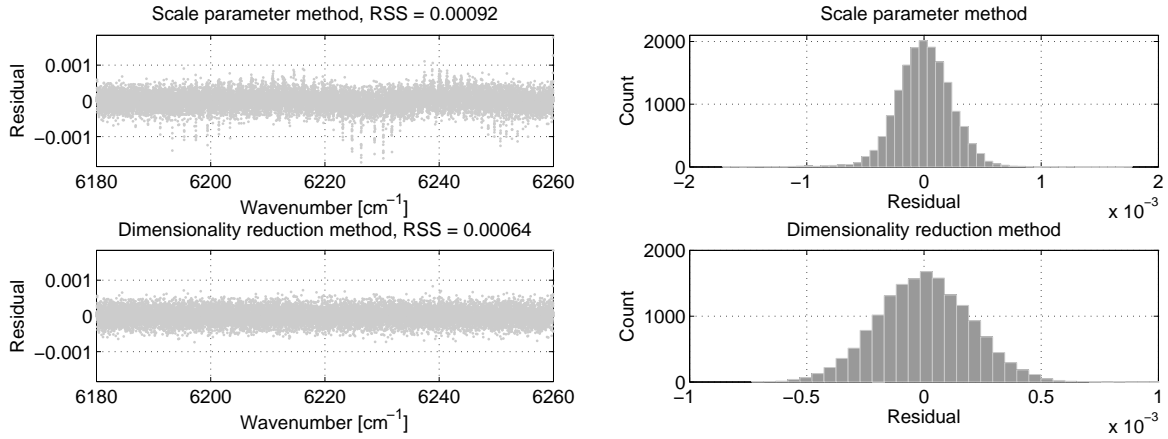
loitu mallille sopivaan muotoon). Prioriprofiilin muoto on jo valmiiksi oikea muille mallissa oleville kaasuille (H_2O , HDO ja CH_4). Käyttämämme CO_2 -prioriprofiili ei siis vastaa muodoltaan totuutta, vaikka profiilit kuitenkin ovat hyvin lähellä toisiaan (vrt. CO_2 , kuva 2). Tilanne on siis jo hyvin lähellä realistista. Simulaatio osoittaa, että redusoiuihin skaalafunktioihin perustuva LMA-inversio tuottaa parempia tuloksia ja löytää korkeusinformaatiota. Huomaamme kuitenkin myös, että redusoinnin ja mahdollisesti joidenkin muiden syiden vuoksi eri korkeuksia koskevat virhearviot eivät ole realistisia.

Kuvasta 10a voi nähdä, että skaalafunktiomenetelmä (alempi kuvaaja) saavuttaa pienemmän neliösumman kuin skaalatekijämenetelmä. Lisäksi pystymme löytämään residuaaleja vertaamalla sellaisia piikkejä, joista voimme saada tiheysprofiilien korkeusinformaatiota. Kuvasta 10b voi huomata, että skaalafunktiomenetelmän (alempi kuvaaja) ratkaisun residuaalit noudattavat likimain kohinan jakaumaa, kun taas skaalatekijämenetelmässä residuaalien jakaumaan jää pitkät hännät.

Tuloksia esitetään tavallisesti myös *viivatiheyksinä* (määritellään integraalina, kuten kaavassa (5.7)), joka kertoo molekyylien määrän mittaussinjalla. Tässä simulaatioissa todellinen viivatiheys on $8.4039e^{21}$ molekyyliä/ cm^2 . Skaalatekijämenetelmän ratkaisema viivatiheys on $8.4281e^{21}$ molekyyliä/ cm^2 ja skaalafunktiomenetelmän $8.4030e^{21}$ molekyyliä/ cm^2 , mitä voidaan pitää sovelluksen kannalta merkittävänä erona. Useissa muissakin simulaatioissa viivatiheyden ratkaiseminen on ollut vakaata, ja pääsääntöisesti tarkempi tulos on saavutettu skaalafunktiomenetelmällä.



Kuva 9: LMA-inversion tuloksia CO_2 :lle, kun totuus vastaa AirCore-mittausta: y-akselilla on korkeus ja x-akselilla sitä vastaava inversion tuloksen suhteellinen ero todelliseen profiiliin. Yhdenäinen käyrä esittää skaalafunktiomenetelmään perustuvan inversion ML-estimaatin. Tummanharmaa alue esittää ML-estimaatin ympäristössä Jacobin matriisiin ja Gaussiseen approksimaatioon perustuvan 50 %:n luottamusalueen ja vaaleanharmaa 95 %:n. Katkoviivallinen käyrä on skaalatekijämenetelmään perustuva ML-estimaatti.



(a) Ratkaisujen residuaalit.

(b) Residuaalien jakaumat.

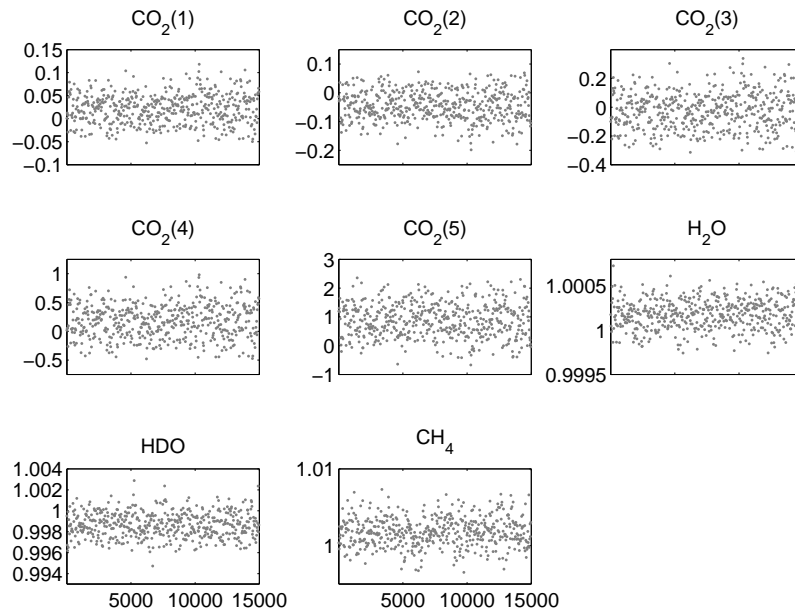
Kuva 10: Skaalatekijä- ja skaalafunktiomenetelmiin perustuvat residuaalit ja neliösummat (RSS). Kuvassa (a) x -akselilla on aaltoluku ja y -akselilla sitä vastaava mallin ML-estimaatin ja AirCore-simulaation erotus. Huomaa, että kuvaajassa (b) skaalatekijämenetelmässä (ylempi kuvaaja) residuaalien jakaumalla on pidemmät hännät.

Inversio 2: AirCore -simulaatio / AM

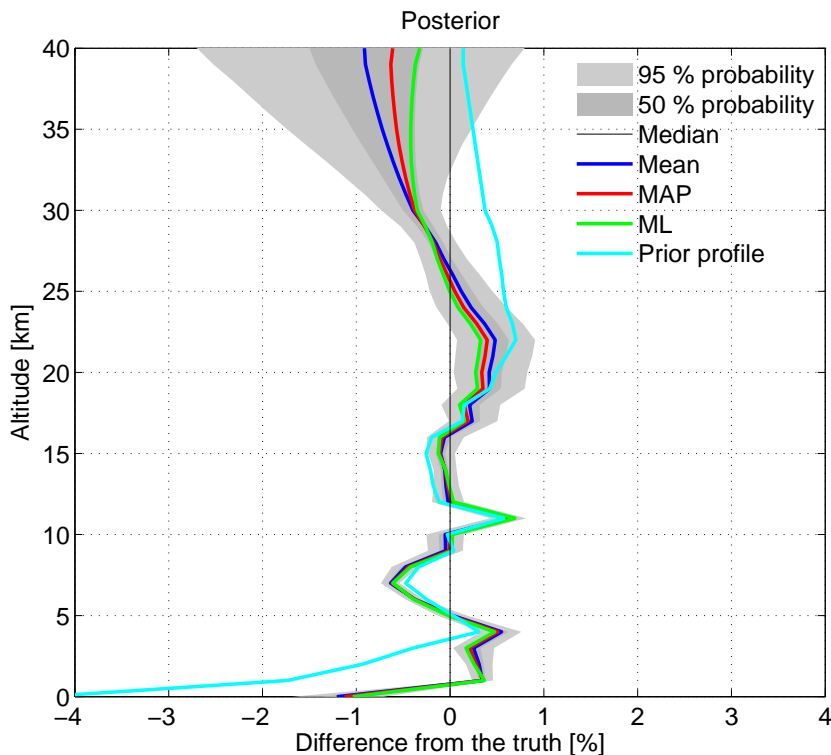
Asetamme inversio-ongelman, kuten edellisessä inversiossa. Kuitenkin nyt teemme inversion käyttäen AM-algoritmia. Pyrkimyksenämme on tutkia posteriorijakaumaa ja saada sitä kautta realistisemmat virherajat tuntemattomalle. Esitämme nyt kuitenkin vain skaalafunktiomenetelmään perustuvan inversion. Olemme oletaneet virhemalliksi $E \sim \mathcal{N}(0, 1.01\sigma^2)$, missä $\sigma = 0.0002$ simuloitu kohina⁸⁰ ja eri koordinaatit eivät korreloi keskenään.

Simuloimamme MCMC-ketjun pituus on 20 000. Burn-in-ajan vuoksi jätämme MCMC-ketjun analysoinnissa pois ensimmäiset 5000 pistettä. Ketjun hylkäysprosentti on 67,1 %. MCMC-ketju myös liikkuu hyvin (ks. kuva 11). Posteriorijakauma näyttäisi MCMC-ketjun perusteella olevan hyvin symmetrinen, sillä mediaani ja CM ovat lähes identtiset (ks. kuva 12). Kuvan 13 perusteella voidaan nähdä, että redusoidut CO₂ parametrit 1–5 korreloivat keskenään, mutta loput parametreista ovat lähes korreloimattomia. Eri kaasujen korreloimattomuus ja posteriorijakaumien symmetrisyys ovat mielenkiintoisia havaintoja.

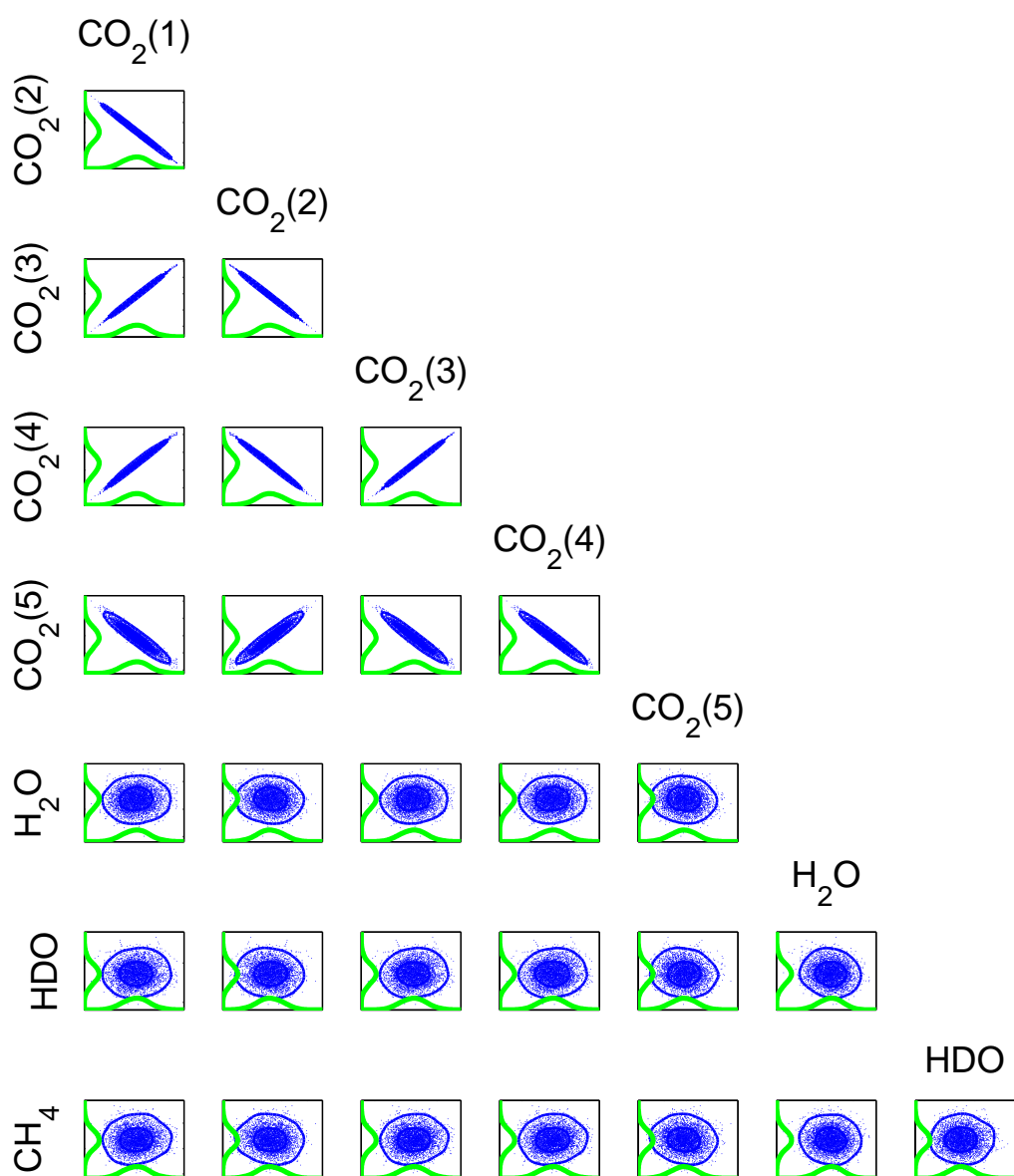
⁸⁰Redusoinnin ja mittausvektorin/instrumentin erojen vuoksi olemme arvioineet virhettä maltillisesti ylöspäin.



Kuva 11: AM-inversioon liittyvä MCMC-ketju: parametrit 1–5 vastaavat CO_2 :n skaalafunktion redusoituja parametreja ja loput kolme H_2O :n, HDO :n ja CH_4 :n skaalatekijöitä.



Kuva 12: AM-inversioon liittyvän MCMC-ketjun perusteella määritetyt MAP, CM, posteriorin mediaani sekä 50 %:n ja 95 %:n posteriorin todennäköisyysalueet. Lisäksi kuvassa on LM-inversiolla laskettu ML-estimaatti ja prioriprofiili. Kaikki arvot ovat suhteessa totuuteen.

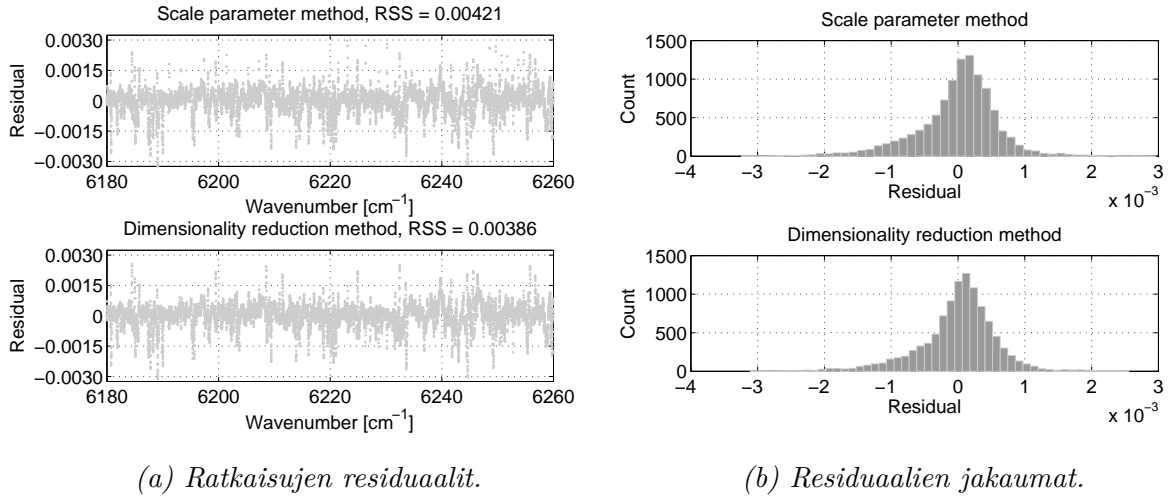


Kuva 13: AM-inversioon liittyvien parametriparien MCMC-ketjun pisteparvet: parametrit 1–5 vastaavat CO₂:n skaalafunktion redusoituja parametreja ja loput kolme H₂O:n, HDO:n ja CH₄:n skaalatekijöitä. Vihreät käyrät ovat parametrien ydinestimoituja marginaalijakaumia ja siniset käyrät vastaavat 50 %:n sekä 95 %:n todennäköisyysalueita.

Inversio 3: FTIR-data / LMA

Olemme verranneet tässä skaalatekijöihin ja redusoituihin skaalafunktioihin perustuvia aidon FTIR-mittauksen LMA-inversioita. Tarkastelemme ainoastaan residuaaleja ja neliösummien kokoluokkia, sillä todellista ilmakehää ei mittaushetkeltä tunneta. Nämä alustavat tulokset näyttävät lupaavilta. Menetelmän käytännön testaaminen ja optimointi vaativat kuitenkin vielä jatkossa lisätyötä.

Kuvasta 14a voi nähdä, että skaalafunktiomenetelmä (alempi kuvaaja) saavuttaa pienemmän neliösumman kuin skaalatekijämentelmä. Lisäksi pystymme löytämään residuaaleja vertaamalla sellaisia piikkejä, joista voimme saada tiheysprofiilien korkeusinformaatiota. Kuvasta 14b voi huomata, että residuaalien jakaumissa on vain pieniä eroja skaalafunktiomenetelmän (alempi kuvaaja) eduksi.



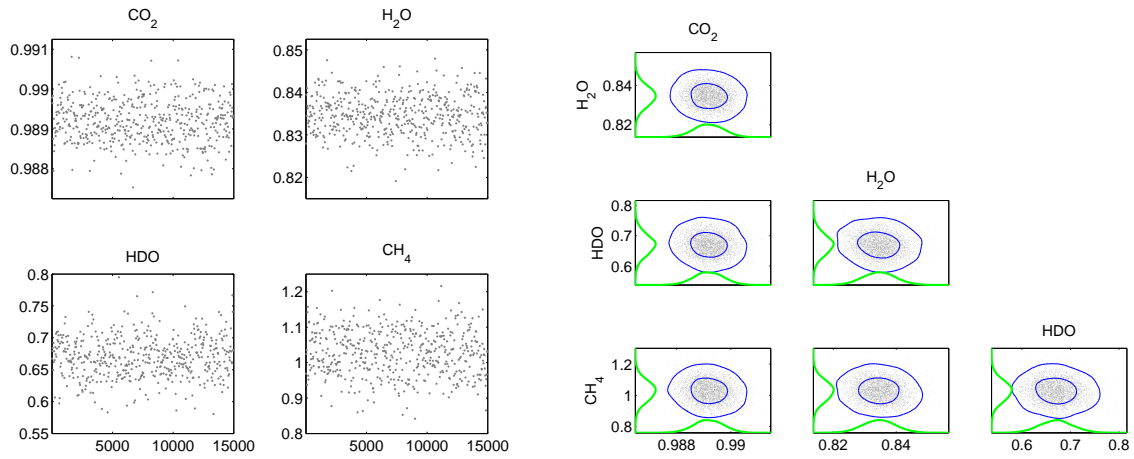
Kuva 14: Skaalatekijä- ja skaalafunktiomenetelmiin perustuvat residuaalit ja neliösummat (RSS). Kuvassa (a) x-akselilla on aaltoluku ja y-akselilla sitä vastaava mallin ML-estimaatin ja FTIR-mittauksen erotus.

Inversio 4: FTIR-data ja GGG-algoritmi / AM

Asetamme inversio-ongelman, kuten edellisessä inversiossa. Nyt teemme inversion kuitenkin käyttäen AM-algoritmia. Esitämme ratkaisut vain skaalatekijämentelmälle. Tällöin voimme verrata inversiomme tuloksia helpommin operatiivisen GGG-algoritmin vastaaviin tuloksiin. Olemme yksinkertaisuuden vuoksi oletaneet virhemalliksi $E \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, missä $\sigma = 0.001$ ja eri koordinaatit eivät korreloi keskenään (vrt. kuva 14). Kaikkien skaalatekijöiden priorijakaumaksi olemme asettaneet log-normaali-jakauman $\log \mathcal{N}(0, 0.1^2)$.

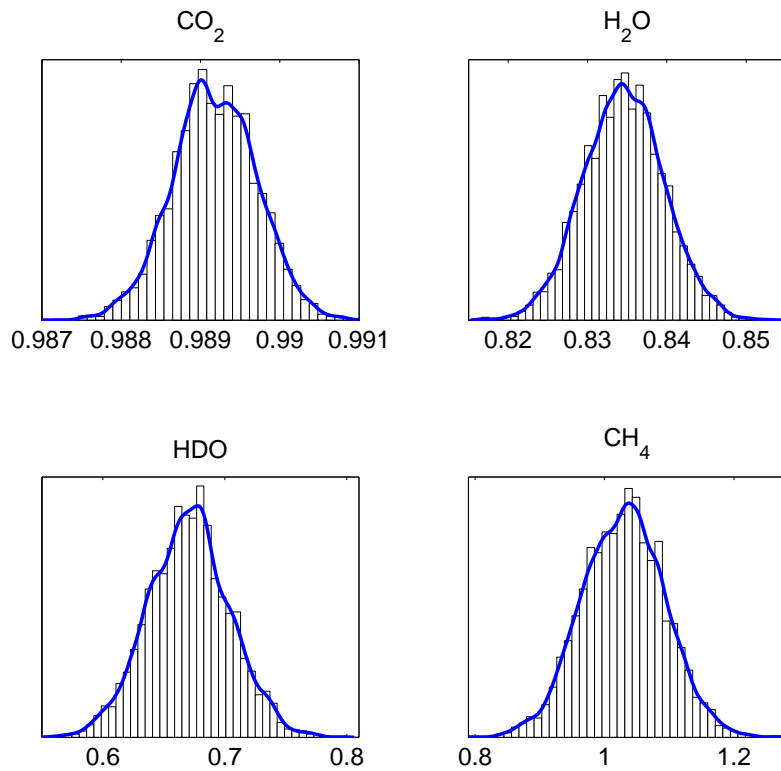
Simuloimamme MCMC-ketjun pituus on 20 000. Burn-in-ajan vuoksi jätämme MCMC-ketjun analysoinnissa pois ensimmäiset 5000 pistettä. Ketjun hylkäysprosentti on 67,25 %. MCMC-ketju myös liikkuu hyvin (ks. kuva 15a). Eri kaasujen parametrit eivät näytä korreloivan keskenään (ks. kuva 15b).

Prioriprofiilin viivatiheys on $8.3570e^{21}$ molekyyliä/cm². Voimme kuvassa 16 esitettyjen jakaumien perusteella laskea viivatiheydelle posteriorijakauman yksinkertaisella kertolaskulla (olemme vain skaalanneet kiinteää profilia). Vastaavan FTIR-datan kanssa GGG-algoritmin ratkaisema viivatiheys on virherajoinen $8.2669e^{21} \pm 0.68$ % molekyyliä/cm². Inversiomme antaa pienemmän virherajan ja posteriorijakauman odotusarvo (likimain $8.265e^{21}$ molekyyliä/cm²) sijoittuu lähes GGG-algoritmin ratkaisun päälle. Emme kuitenkaan ole ottaneet kaikkia mahdollisia virhelähteitä huomioon inversiossamme, joten nämä tulokset ovat vasta alustavia. Lisäksi suoran mallin kehitys on edelleen kesken.

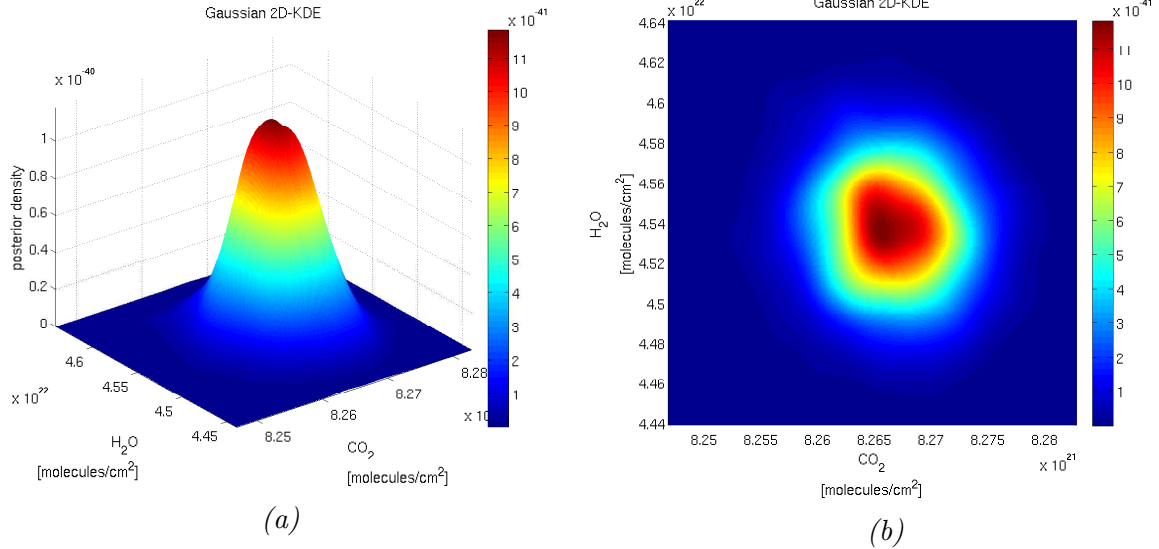


(a) AM-inversioon liittyvät MCMC-ketju. (b) MCMC-ketjun parametriparien pisteparvet.

Kuva 15: Kwissa parametrin vastaavat CO_2 :n, H_2O :n, HDO :n ja CH_4 :n skaalatekijöitä. Kuvasa (b) vihreät käyrät ovat parametrien ydinestimoituja marginaalijakaumia ja siniset käyrät vastaavat 50 %:n sekä 95 %:n todennäköisyysalueita.



Kuva 16: AM-inversioon liittyvien skaalatekijöiden (CO_2 , H_2O , HDO , CH_4) MCMC-ketjusta määritetyt histogrammit ja ydinestimoitujen posteriorin marginaalijakaumat.



Kuva 17: AM-inversioon liittyvien CO_2 :n ja H_2O :n skaalatekijöiden posteriorin yhteismarginaalijakauman ydinestimaatti (vrt. kuvat 15b ja 16). Kuvissa (a) ja (b) esitetään sama jakauma kahdesta eri kuvakulmasta.

5.4.1 Kehitys- ja tutkimusideoita

Vaikka kehittämämme suora malli ja siihen liittyvät inversio-menetelmät ovatkin lupaavia, niin edelleen kehitettävää ja tutkittavaa riittää. Mahdollisia jatkokehityskohteita ovat:

- Priorin kovarianssimatriisin valinta tulisi tehdä systemaattisemmin. Tulisi selvittää mittauksien perusteella tiheysprofiilien realistisia vaihteluvälejä ja muutosnopeuksia eri korkeuksissa. Regularisoinnin näkökannalta olisi tärkeää kehittää sellaisia menetelmiä, mitkä mahdollistaisivat uskottavuusfunktioista saatavan informaation tehokkaan käytön. Lähestyminen voisi perustua mallin derivaattoihin tai yksinkertaisemmin prioriprofilissa oleviin suuruuseroihin.
- Dimension redusointia tulisi pohtia myös vaihtoehtoisilla tavoilla. Esimerkiksi voitaisiin miettiä sellaisen skaalafunktion $c(s; x_1, \dots, x_n)$ konstruointia, jossa on n tuntematonta parametria (ratkaistaan inversio-ongelmassa). Näiden parametrien x_1, \dots, x_n tulisi vaikuttaa ilmakehän eri korkeuksilla suhteessa saatavan informaation määrään, mutta olla samalla myös mahdollisimman riippumattomia toisistaan.
- Inversio-ongelman ratkaisemisessa voisi testata (ja implementoida) vaihtoehtoisia inversio-algoritmeja, kuten erilaisia hybridi-menetelmiä. MCMC-menetelmistä potentiaalisia vaihtoehtoja olisivat DRAM-algoritmi, joka laajentaa AM-algoritmia, ja myös HMC (*Hybrid MCMC*, ks. esim. [21, Radford]), mikä hyödyntää uskottavuusfunktion derivaattatietoa. Analyttisistä algoritmeista tulevat kyseeseen vaihtoehtoiset derivaattatietoa hyödyntävät algoritmit. Näistä menetelmistä ei välttämättä ole suurta apua inversion tuloksissa, mutta ne voivat säästää laskenta-aikaa.
- Olisi mielenkiintoista tutkia, miltä korkeuksilta voimme odottaa realistisia tiheysprofiili-inversioita eli miten suuria epävarmuuksia eri korkeuksiin ja kaasuihin liittyy. Nyt esitettyjä menetelmiä tulisi testata kattavasti myös muilla kiinnostavilla kaasuilla, ja tulisi tutkia käytettyjen aaltolukuikkunoiden vaikutusta inversion tuloksiin. Menetelmiä tulisi kehittää ja testata myös satelliittimittauksia varten.

Loppupuhe

Koska pro gradu -tutkielman valmiiksi saattaminen tarkoittaa osaltani myös filosofian maisteriksi valmistumista, niin haluan aluksi kiittää Tampereen yliopiston matematiikan oppiaineen henkilökuntaa saamastani laadukkaasta opetuksesta ja kannustavasta ilmapiiristä. Erityisesti haluan kiittää professori Lauri Hellaa, joka on hoitanut mutkattomasti Tampereen yliopiston puolesta tähän tutkielmaan liittyviä käytännön asioita. Haluan tässä yhteydessä kiittää myös Helsingin yliopiston professori Samuli Siltasta, joka suostui tämän työn toiseksi tarkastajaksi.

Tämän tutkielman teko on ollut antoisa tutkimusmatka laskennallisten inversio-ongelmien ja ilmakehän kaukokartoituksen maailmoihin. Se on ollut myös enemmän, mahdollisuus tutustua Ilmatieteen laitokseen ja ilmakehän kaukokartoituksen tutkimusryhmään, jonka työilmapiiri on ollut erittäin viihtyisä ja kannustava. Kiitän DI Simo Tukiasta lukuisista vinkeistä liittyen MATLAB-ohjelmointiin, perehdyttämisestä ilmakehän kaukokartoituksen fysiikkaan ja ennen kaikkea sujuvasta yhteistyöstä. Seuraavaksi kiitän FT Marko Lainetta hänen ohjeistaan ja avustuksestaan liittyen MCMC-laskentaan ja tilastotieteeseen.

Lopuksi kiitän työni ohjaajaa FT Johanna Tammista, joka mahdollisti osallistumiseni Ilmatieteen laitoksen kasvihuonekaasujen kaukokartoituksen tutkimusprojektiin. Hän myös kannusti tutustumaan teoreettisiin aiheisiin ja antoi rakentavaa palautetta työstäni sen eri vaiheissa. Ilman häntä tätä pro gradu -tutkielmaa ei olisi ikinä syntynyt.

Kiitos vielä ystäville, opettajille, työtovereille ja muille, joiden nimi on jäänyt mainitsematta. Viimeinen vuosi ja sitä edeltävät kolme vuotta ovat olleet osaltani hienoja!

Viitteet

- [1] Abadir, K. M., Magnus, J. R. *Matrix Algebra*, vol. 1. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [2] Ash, R. B. *Real Analysis and Probability*. New York: Academic Press, Inc., 1972.
- [3] Beezer, R. A. *A First Course in Linear Algebra*, version 2.99. Tacoma, Washington: University of Puget Sound, Dept. of Mathematics and Computer Sci., 2012. Saatavilla: <http://linear.ups.edu> [11.06.2013].
- [4] Calvetti, D., Somersalo, E. *Introduction to Bayesian Scientific Computing*. New York: Springer Science+Business Media, 2007.
- [5] Crisp, D., Boesch, H., Brown, L., Castano, R., Christi, M., Connor, B., Frankenberg, C., McDuffie, J., Miller, C., Natraj, V., O'Dell, C., O'Brien, D., Polonski, I., Oyafuso, F., Thompson, D., Toon, G., Spurr, R. *Orbiting Carbon Observatory (OCO)-2 Level 2 Full Physics Algorithm Theoretical Basis Document*, version 1.0. Pasadena, California: Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, 2010. Saatavilla: <http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/acdisc/documentation/ACOS.shtml> [13.5.2014].
- [6] Debnath, L., Mikusiński, P. *Hilbert Spaces with Applications*, 3rd edition. San Diego: Elsevier Academic Press, 2005.
- [7] Gilks, W. R., Richardson, S., Spiegelhalter, D. J. *Markov Chain Monte Carlo in Practice*, 1st edition. London: Chapman & Hall, 1996.
- [8] Haario, H., Saksman, E., Tamminen, J. *An adaptive Metropolis algorithm*. Bernoulli, **7**, s. 223–242, 2001. Saatavilla: <http://projecteuclid.org/euclid.bj/1080222083> [11.5.2014].
- [9] Haario, H., Laine, M., Mira, A., Saksman, E. *DRAM: Efficient adaptive MCMC*. Statistics and Computing, **16**, s. 339–354, 2006. Saatavilla (preprint): <http://www.math.helsinki.fi/reports/Preprint374.pdf> [13.5.2014].
- [10] Hochstadt, H. *Integral equations*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1973.
- [11] Kaipio, J., Somersalo, E. *Statistical and Computational Inverse Problems*. New York: Springer Science+Business Media, Inc., 2005.
- [12] Kallenberg, O. *Foundations of modern probability*. New York: Springer, cop., 1997.
- [13] Karion, A., Sweeney, C., Tans, P., Newberger, T. *AirCore: An Innovative Atmospheric Sampling System*. J. Atmos. Oceanic Technol., **27**, s. 1839–1853, 2010. Saatavilla: <http://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/2010JTECHA1448.1> [13.5.2014].
- [14] Laine, M. *MCMC toolbox for Matlab*. Verkko sivusto/Matlab-toolbox, Ilmatieteen laitos, 27.8.2013. <http://helios.fmi.fi/~lainema/mcmc/> [8.2.2014].
- [15] Liou, K. N. *An Introduction to Atmospheric Radiation*, 2nd edition. San Diego: Elsevier, 2002.

- [16] Madsen, K., Nielsen, H. B., Tingleff, O. *Methods for Non-Linear Least Squares Problems*, 2nd edition. Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 2004. Saatavilla: http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/views/publication_details.php?id=3215 [4.5.2014].
- [17] Marzouk, Y. M., Najm, H. N. *Dimensionality reduction and polynomial chaos acceleration of Bayesian inference in inverse problems*. Journal of Computational Physics **228**, s. 1962–1902, 2009. Saatavilla: <http://dspace.mit.edu/handle/1721.1/59814> [13.5.2014].
- [18] Mueller, J. L., Siltanen, S. *Linear and Nonlinear Inverse Problems with Practical Applications*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2012.
- [19] Nocedal, J., Wright, S. J. *Numerical Optimization*. New York: Springer-Verlag, Inc., 1999.
- [20] Protter, P., Jacod, J. *Probability Essentials*, 1. painos. New York: Springer-Verlag, 2002.
- [21] Radford, M. N. *MCMC using Hamiltonian dynamics*. Chapman & Hall/CRC Press: Chapter 5 of the Handbook of Markov Chain Monte Carlo, 2011. Saatavilla: <http://arxiv.org/abs/1206.1901> [14.5.2014].
- [22] Rodgers, C. D. *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000.
- [23] Rudin, W. *Functional Analysis*. New York: McGraw-Hill Book Co., 1973.
- [24] Rudin, W. *Real and Complex Analysis*, 2nd ed. New York: McGraw-Hill Book Co., 1974.
- [25] Solonen, A. *A tutorial on dimensionality reduction in inverse problems via truncating the prior covariance matrix*. Ilmatieteen laitoksella 2013 pidetty esitelmä sekä siihen liittyvä moniste.
- [26] Tamminen, J. *MCMC methods for inverse problems*. Lisensiaatin tutkielma, Helsingin yliopisto, 1999.
- [27] 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/> [13.5.2014].
- [28] Yoshida, Y., Ota, Y., Eguchi, N., Kikuchi, N., Nobuta, K., Tran, H., Morino, I., Yokota, T. *Retrieval algorithm for CO₂ and CH₄ column abundances from short-wavelength infrared spectral observations by the Greenhouse gases observing satellite*. Copernicus Publications, Atmos. Meas. Tech., **4**, s. 717–734, 2011. Saatavilla: <http://www.atmos-meas-tech.net/4/717/2011/amt-4-717-2011.html> [13.5.2014].
- [29] Veefkind, J. P., Aben, I., McMullan, K., Förster, H., de Vries, J., Otter, G., Claas, J., Eskes, H. J., de Haan, J. F., Kleipool, Q., van Weele, M., Hasekamp, O. R. Hoogeveen, Landgraf, J., Snel, R., Tol, P., Ingmann, P., Voors, R., Kruizinga, B., Vink, R., Visser, H., Levelt, P. F. *TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications*. Elsevier, Remote Sensing of Environment, **120**, s. 70–83, 2012.

- [30] Volterra, V. *Theory of Functionals and of Integral and Integro-Differential Equations*. New York: Dover Publications, Inc., 1959.
- [31] Wunch, D., Toon, G. C., Blavier, J-F. L., Washenfelder, R. A., Notholt, J., Connor, B. J., Griffith, D. W. T., Sherlock, V., Wennberg, P. O. *The Total Carbon Column Observing Network*. Phil. Trans. R. Soc. A, **369**, s. 2087–2112, 2011. Saatavilla: <http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/369/1943/2087> [13.5.2014].
- [32] *Database of Arctic Research Centre: Greenhouse Gas Columns*. Verkkosivusto, Ilmatieteen laitos, 24.1.2014. http://litdb.fmi.fi/fts_greenhousegass.php [13.4.2014].
- [33] *The HITRAN Database*. Verkkosivusto, Harvard University, 11.10.2013. <http://www.cfa.harvard.edu/hitran/> [26.3.2014].

Liite A: Käytetyt merkit

Merkintä	Selitys
\triangle	Esimerkki päättyy, jos se ei pääty todistukseen
\square	Todistus päättyy
$\exists!$	On olemassa yksikäsitteinen
$:=$	Määritellään samaksi kuin
$A \subset B$	Joukko A on joukon B aito osajoukko
$A \subseteq B$	Joukko A on joukon B osajoukko
A^c	Joukon A komplementti, kun perusjoukko X on tunnettu
$\mathcal{P}(A)$	Joukon A potenssijoukko eli sen kaikkien osajoukkojen kokoelma
$f \upharpoonright A$	Funktion $f : A' \rightarrow B$ rajoittuma joukkoon $A \subseteq A'$
\equiv	Funktio määritellään kaikissa pisteissä samaksi kuin
1_A	Joukon A indikaattorifunktio, kun $1_A : A' \rightarrow B$ ja $A \subseteq A'$
$\text{span}(S)$	Vektorijoukon S virittämä vektorialiavaruus
Dom	Funktion määrittelyjoukko
Ran	Funktion maalijoukko
Im	Funktion kuvajoukko
Ker	Funktion ydin, kun kuvaus on sellaisten struktuurien välillä, joissa neutraalialkiot on määritelty
\mathbb{N}	Luonnolliset luvut $0, 1, 2, \dots$
\mathbb{Z}_+	Positiiviset kokonaisluvut $1, 2, 3, \dots$
\mathbb{R}_+	Positiiviset reaaliluvut $x \in \mathbb{R}, x > 0$
$[a, b]$	Suljettu reaaliväli $a, b \in \mathbb{R}, a \leq b$
$]a, b[$	Puoliavoin reaaliväli $a, b \in \mathbb{R}, a \leq b$, muut vastaavasti
$[-\infty, \infty]$	Laajennettu reaalilukujen joukko $\mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$
$B(a, r)$	a -keskinen r -säteinen avoin kuula (metrisessä avaruudessa)
$B[a, r]$	a -keskinen r -säteinen suljettu kuula (metrisessä avaruudessa)
$\ x\ $ ($\ x\ _X$)	Vektorin x normi (normivaruudessa X) tai lineaarikuvauksen normi (ovat myös vektoreita lineaarikuvausten avaruudessa)
$\ f\ _p$	Mitallisten kompleksifunktioiden p -normi
$L^p(\mu)$	Niiden funktioiden kokoelma, joille p -normi on äärellinen
$L^1(\mu)$	Tapaus $p = 1$; μ -integroituvien funktioiden luokka
$\ f\ _\infty$	Mitallisten kompleksifunktioiden supremum-normi
$L^\infty(\mu)$	Niiden funktioiden joukko, joille supremum-normi on äärellinen
$ x $	Vektorin x standardinormi euklidisessa avaruudessa \mathbb{R}^d tai \mathbb{C}
$\langle x, y \rangle$ ($\langle x, y \rangle_X$)	Vektorien x ja y sisätulo (sisätuloavaruudessa X)
\bar{x}, \bar{X}	Kompleksiluvun x kompleksikonjugaatti, topologisessa yhteydessä joukon X sulkeuma
$\arg \max_{x \in S} f(x)$	Niiden $x \in S \subseteq S'$ joukko, jotka tuottavat maksimin joukossa S , missä $f : S' \rightarrow \mathbb{R}$
$\arg \min_{x \in S} f(x)$	Niiden $x \in S \subseteq S'$ joukko, jotka tuottavat maksimin joukossa S , missä $f : S' \rightarrow \mathbb{R}$
f^+, f^-	Funktion $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ positiiviosa ja negatiiviosa
x^\perp, X^\perp	Vektorin x tai joukon X ortokomplementti sisätuloavaruudessa
$\mathcal{L}(X, Y)$	Rajoitettujen lineaarikuvausten $X \rightarrow Y$ joukko (normiavaruuksien välillä)

Rank	Lineaarikuvauksen aste, jos se on olemassa
L^*	Lineaarikuvauksen adjungoitu lineaarikuvaus
L^T	Euklidisen lineaarikuvauksen transpoosi
L^+	Euklidisen lineaarikuvauksen Mooren-Penrosen pseudoinverssi
$\text{cond}(A)$	Matriisin A ehtoluku
$D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$	Diagonaalimatriisi, jossa $D_{ii} = d_i$ ja $D_{ij} = 0$, jos $i \neq j$
F_α^+	Matriisin F α -typistetty SVD
$\sigma(A), \pi(A), \lambda(A)$	Kokoelman A virittämä σ -algebra, π -systeemi, λ -systeemi
$\mathcal{B}(\mathcal{T}), \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$	Topologian \mathcal{T} virittämä σ -algebra, euklidisen avaruuden Borel-joukkojen kokoelma
\mathcal{M}_d, m_d	Lebesgue-mitallisten joukkojen kokoelma, Lebesguen mitta (avaruudessa \mathbb{R}^d)
\mathcal{M}, m	Tapaus $d = 1$; Lebesgue-mitallisten joukkojen kokoelma, Lebesguen mitta (avaruudessa \mathbb{R})
$\mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}$	Mitallisten joukkojen \mathcal{X} ja \mathcal{Y} tulo eli $\sigma(X \times Y)$
$\lambda \ll \mu$	Mitta λ on absoluuttisesti jatkuva mitan μ suhteen
$\lambda \perp \mu$	Mitat λ ja μ ovat toisensa poissulkevat
$x \perp y$	Vektorit x ja y ovat kohtisuoria, ts. $\langle x, y \rangle = 0$ (sisätuloavaruudessa)
$\int_A f dm, \int_A f(x)m(dx)$	Mitallisen kuvauksen f mittaintegraali mitan m suhteen (yli mitallisen joukon A)
$\int_A f(x)dx$	Mitallisen kuvauksen f Lebesguen integraali (yli mitallisen joukon A)
df/dx	Mitan f Radonin-Nikodymin derivaatta mitan x suhteen
Δ_i	Differenssioperaattori i :nen koordinaatin suhteen
∇	Nabla eli $(\partial/\partial x_1, \dots, \partial/\partial x_n)$
$J_f(x)$	Vektorifunktion f Jacobin matriisi
$H_F(x)$	Skalaarikentän F Hessen matriisi
$O(f)$	Iso-O eli jotakin, minkä asymptoottinen kokoluokka on f
$C(n, k)$	Binomikerroin n yli k :n eli k -kombinaatioiden lukumäärä n :n alkion joukossa
P	Todennäköisyysmitta
$P(A B)$	Tapahtuman A todennäköisyys ehdolla B
δ_a	Joko Diracin mitta tai deltafunktio pisteessä a
$\mathbb{E}(X), \text{Var}(X)$	Satunnaismuuttujan X odotusarvo, varianssi
$\text{Cov}(X, Y)$	Satunnaismuuttujien X ja Y kovarianssi
$f \propto g$	f on verrannollinen g :hen eli $\exists c \in \mathbb{R} : f = cg$
$x \sim X$	Havainto x on satunnaisotos jakaumasta X
$Y \sim X$	Satunnaismuuttuja Y noudattaa satunnaismuuttujan X jakaumaa
$\mathcal{N}(\theta, \Sigma)$	Normaalijakauma parametrein $\theta \in \mathbb{R}^d, \Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ (keskiarvo, kovarianssi)
$\log \mathcal{N}(\theta, \Sigma)$	Log-normaalijakauma parametrein $\theta \in \mathbb{R}^d, \Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ (eivät ole yleisesti keskiarvo ja kovarianssi)
$X_n \xrightarrow{D} X$	Satunnaismuuttujajonon suppeneminen jakauman suhteen, ts. todennäköisyysmitat P_{X_N} suppenevat heikosti mittaan P_X
$m \bmod n$	Luvun $m \in \mathbb{N}$ jakojäännös jaettaessa luvulla $n \in \mathbb{N}$