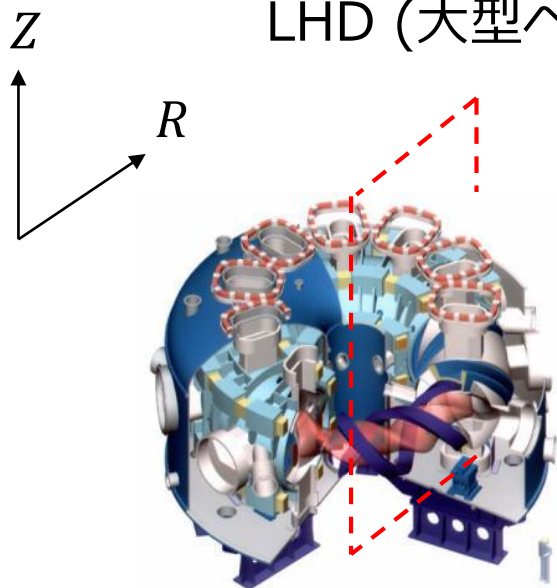


LHDプラズマ中電子密度の トムソン散乱計測結果に対するガウス過程回帰

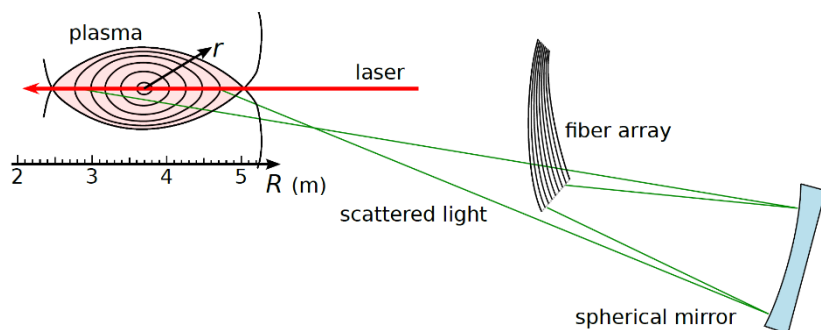
中村紀彦^A, 大杉拓也^A, 山田一博^B, 蓮尾昌裕^A, 藤井恵介^A

京都大^A, 核融合研^B

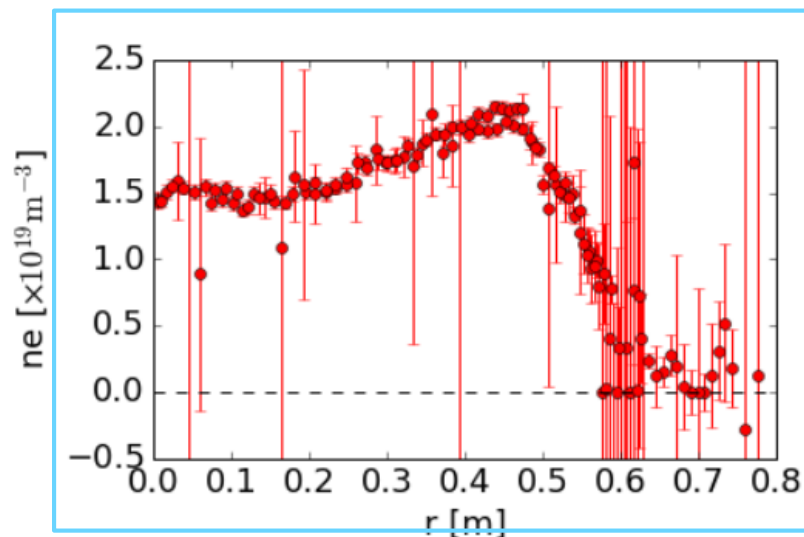
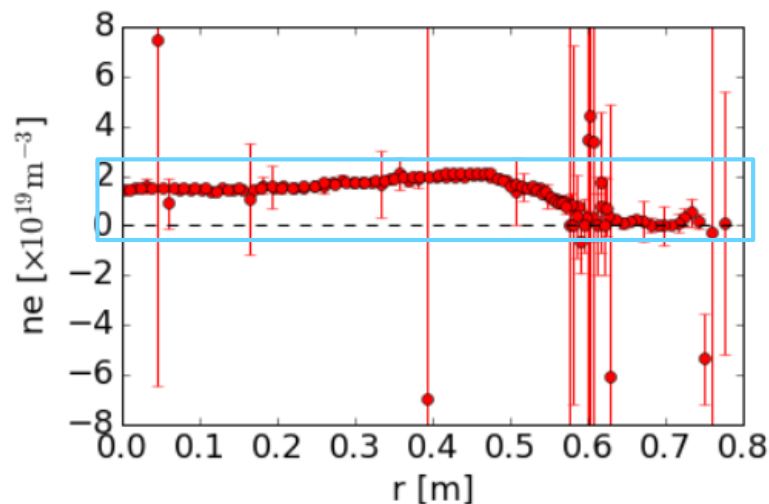
LHD (大型ヘリカル装置)



ポロイダル断面



トムソン散乱計測結果

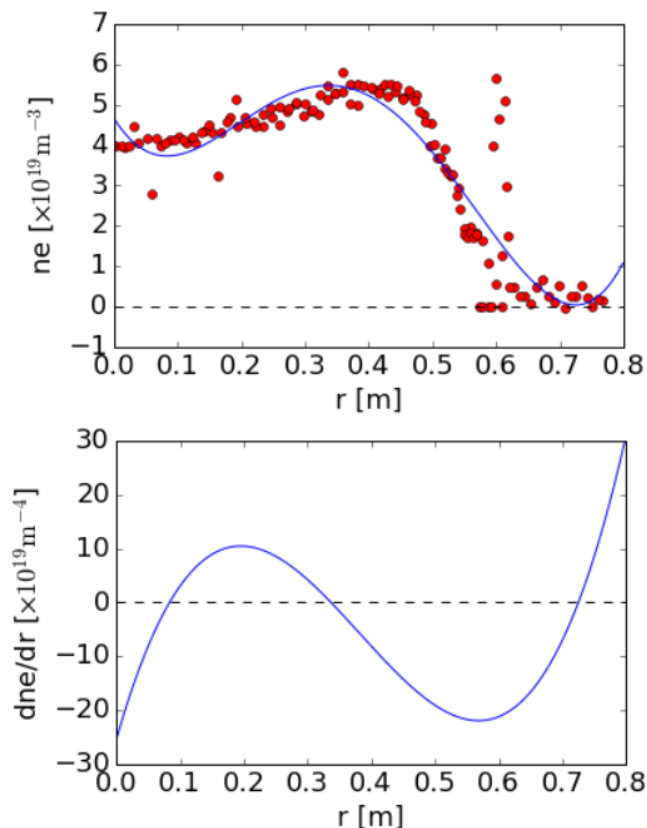


◆ トムソン散乱計測システム

- 電子温度、電子密度が計測されている

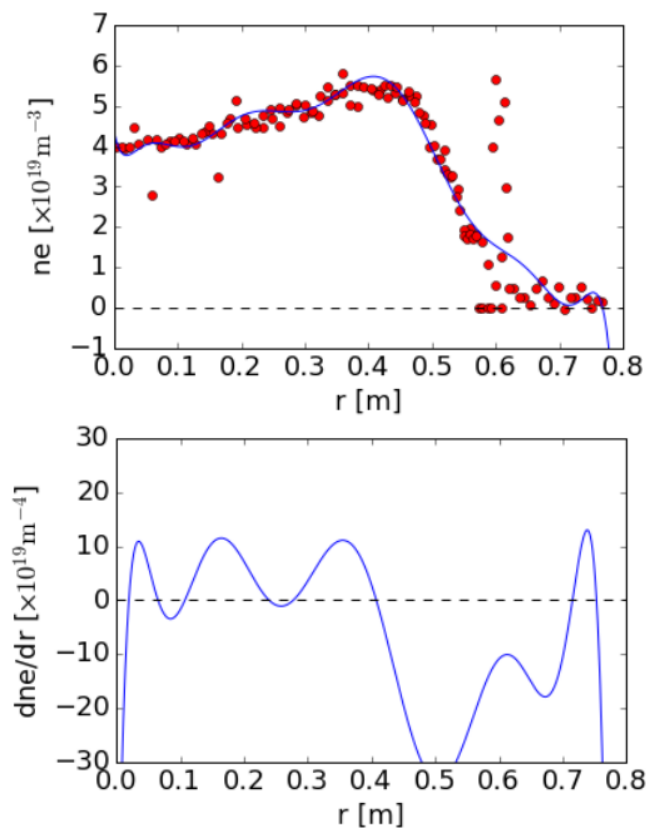
従来の手法（多項式近似）

4次多項式



アンダーフィッティング

12次多項式



オーバーフィッティング

◆ 空間勾配はモデルの選択に強く影響を受ける

ガウス過程回帰の利点

従来の手法

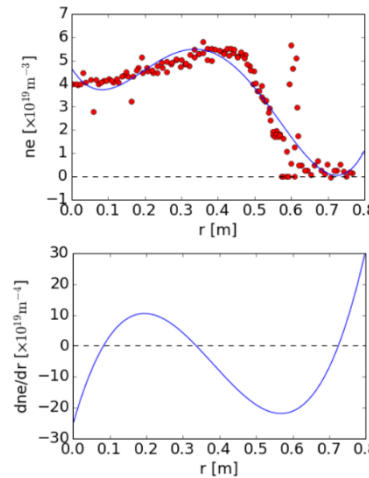
- どの次数を選ぶかが人為的
- フィットの期待値しか分からない

ガウス過程回帰

◆ ガウス過程回帰はベイズ統計的手法の一つである

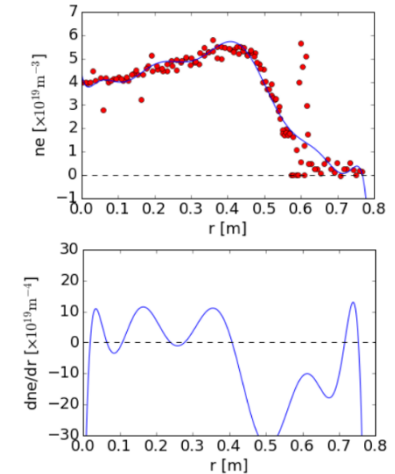
- モデルの複雑さを統計的に選択でき、空間分解能と不確かさの最適なトレードオフが行える
- フィットの不確かさも求められる

4次多項式



アンダーフィッティング

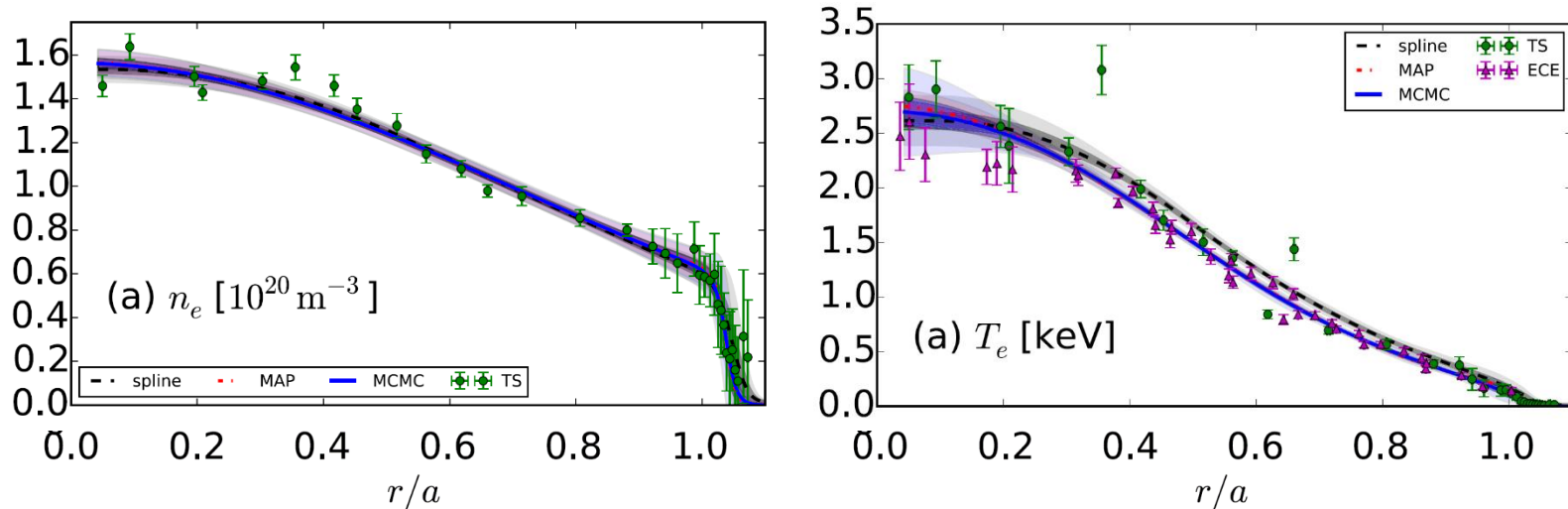
12次多項式



オーバーフィッティング

- ◆ 近年、ガウス過程回帰はデータから背後の関数を推定するために使われ始めている

Alcator C-Modにおける電子密度・電子温度データのフィッティング[1]



研究目的：

- LHDにおけるトムソン散乱計測結果へのガウス過程回帰の適用
- ガウス過程回帰を拡張したモデルの構築

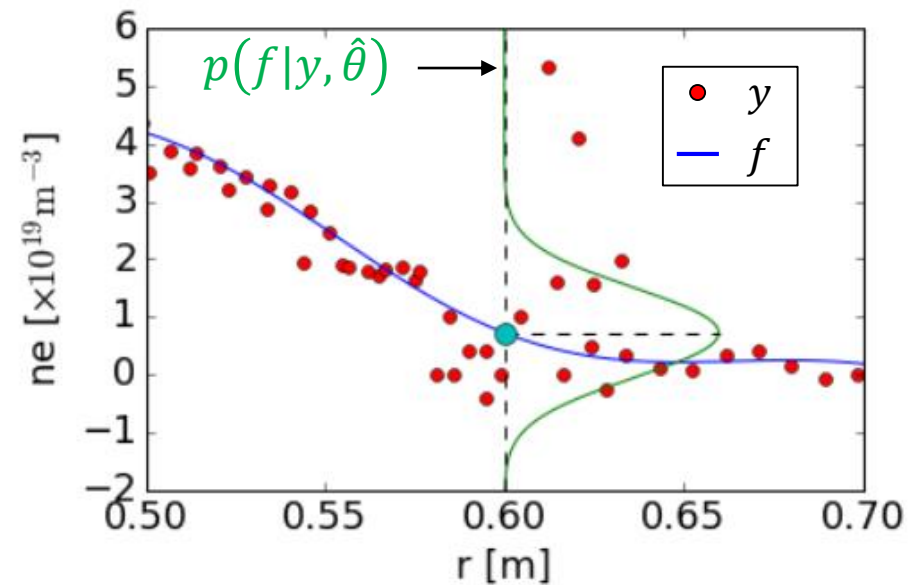
[1] M. A. Chilenski, M. Greenwald, Y. Marzouk, N. T. Howard, A. E. White, J. E. Rice and J. R. Walk, Nucl. Fusion **55**, 023012 (2015).

- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

- ◆ 計測データ y が与えられたとき、背後の関数 f の条件付き分布（予測分布）はベイズの定理に基づき計算される

$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$



- $p(f|y, \hat{\theta})$: 予測分布 「計測データ y がある状態での背後の関数 f が従う分布」
- $p(y|f, \hat{\theta})$: 尤度 「背後の関数 f を仮定したとき計測データ y が従う分布」
- $p(f|\hat{\theta})$: 事前分布 「計測データ y が何もない状態での背後の関数 f が従う分布」
- $p(y|\hat{\theta})$: 周辺尤度 「計測データ y が従う分布」

- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

ガウス過程回帰の利点①： モデルの複雑さの統計的選択

◆ ガウス過程回帰はベイズ統計的手法の一つである

- モデルの複雑さを統計的に選択でき、
空間分解能と不確かさの最適なトレードオフが行える
- フィットの不確かさも求められる

定義 関数 f が平均0・共分散 Σ のガウス過程に従う

↔ 入力 $x_1, x_2, \dots$ に対応する出力を並べたベクトル $(f(x_1), f(x_2), \dots)$ が以下の多変量ガウス分布に従う

$$f \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_N, x_1) & \cdots & k(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

- ・ ガウス過程の性質を決定する部分
「カーネル」

$$k(x_i, x_j) = \eta^2 \exp\left(-\frac{|x_i - x_j|^2}{2l^2}\right)$$

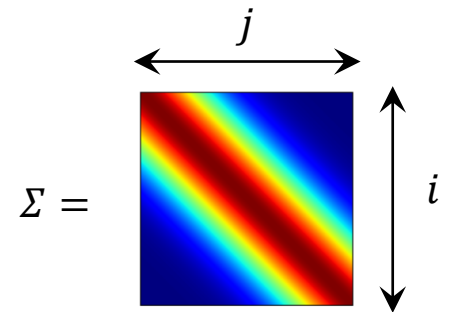
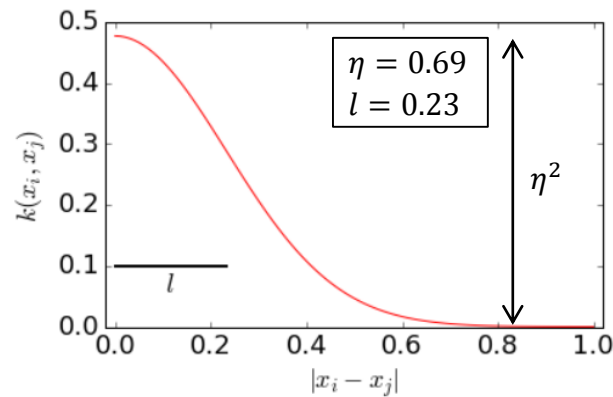
x : 計測データの座標

- ・ データに従う多変量ガウス分布は
カーネルパラメータ $\theta = (\eta, l)$ によって制御される

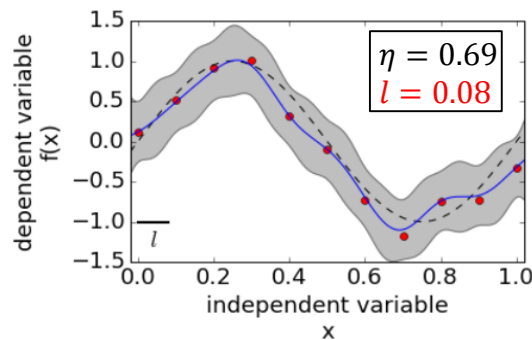
ガウスカーネルの特性

ガウスカーネル

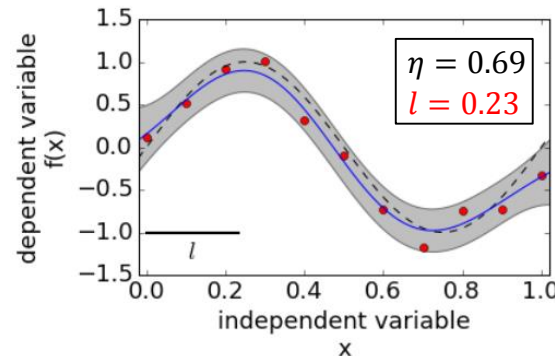
$$k(x_i, x_j) = \eta^2 \exp\left(-\frac{|x_i - x_j|^2}{2l^2}\right)$$



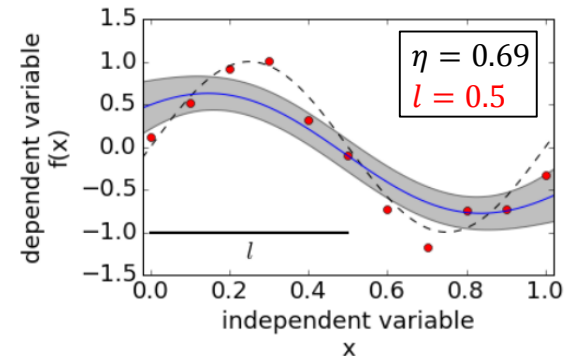
回帰の様子



オーバーフィット



最適解



アンダーフィット

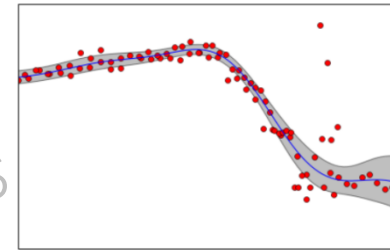
- l がモデルの空間分解能を定める
- $\theta = (l, \eta)$ は計測データからベイズ統計的に求められる

- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ **ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得**
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

ガウス過程回帰の利点②： フィットの不確かさの獲得

◆ ガウス過程回帰はベイズ統計的手法の一つである

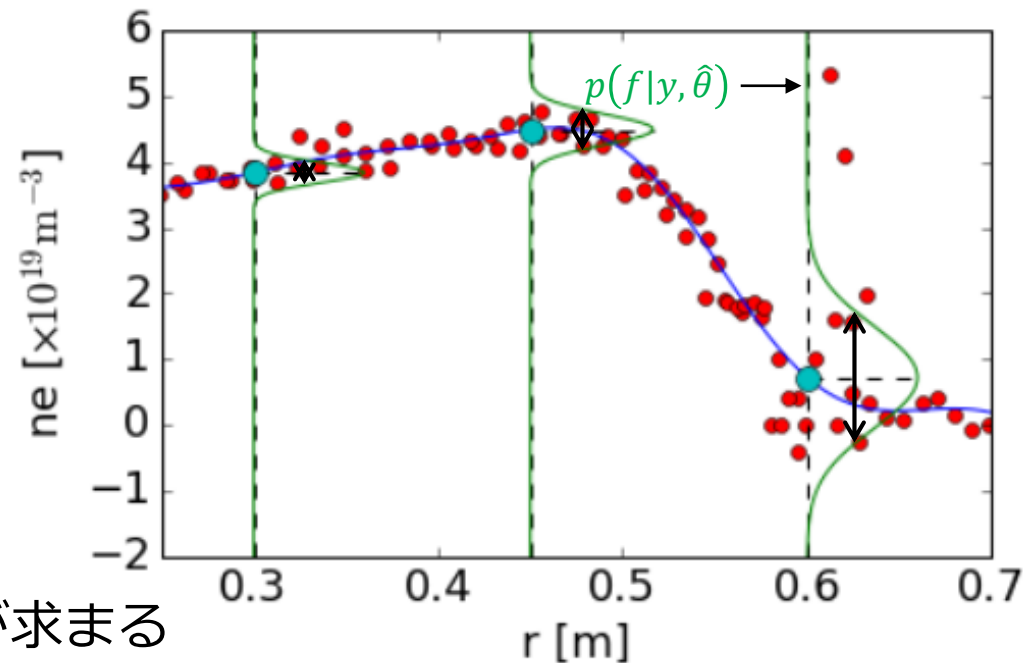
- モデルの複雑さを統計的に選択でき、空間分解能と不確かさの最適なトレードオフが行える
- **フィットの不確かさも求められる**



$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$

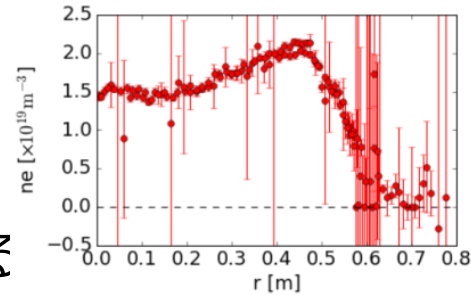
- フィットは確率分布に従う

➡ フィットの期待値・分散が求まる



- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

- ◆ 計測データは平均ゼロ・共分散 Σ のガウス過程に従う
- ◆ 各計測データ i には分散 σ_i^2 のガウシアンノイズが含まれる



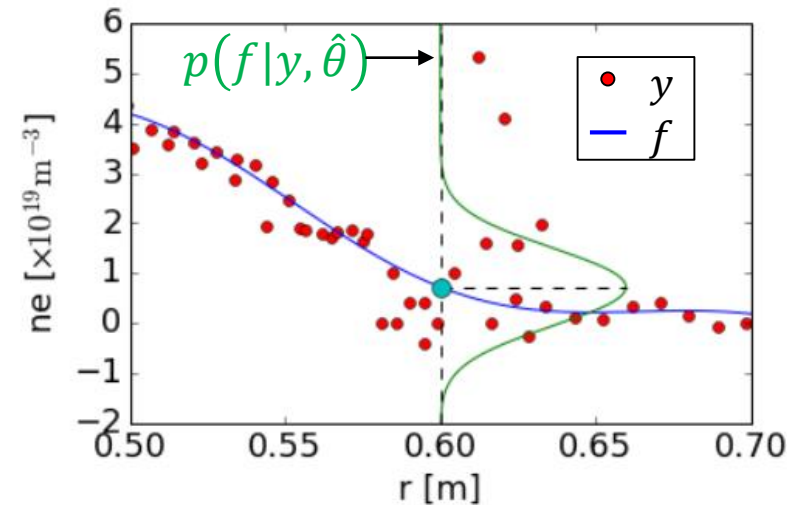
$$p(y|\theta) = \mathcal{N}(0, \Sigma + \Sigma_n)$$

$$p(f|\hat{\theta}) = \mathcal{N}(0, \Sigma)$$

$$p(y|f, \hat{\theta}) = \mathcal{N}(f, \Sigma_n)$$

$$\Sigma_n = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_N^2 \end{bmatrix}$$

$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$



- ◆ 計測データが従う分布を決める ➡ カーネルパラメータ θ の最適化

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} p(y|\theta) = \operatorname{argmax}_{\theta} \mathcal{N}(0, \Sigma + \Sigma_n)$$

尤度×事前分布=同時分布

$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$

◆ 計測データ y と予測の値 f の同時分布は以下の様に定義される

$$p(y|f, \hat{\theta}) \times p(f|\hat{\theta})$$

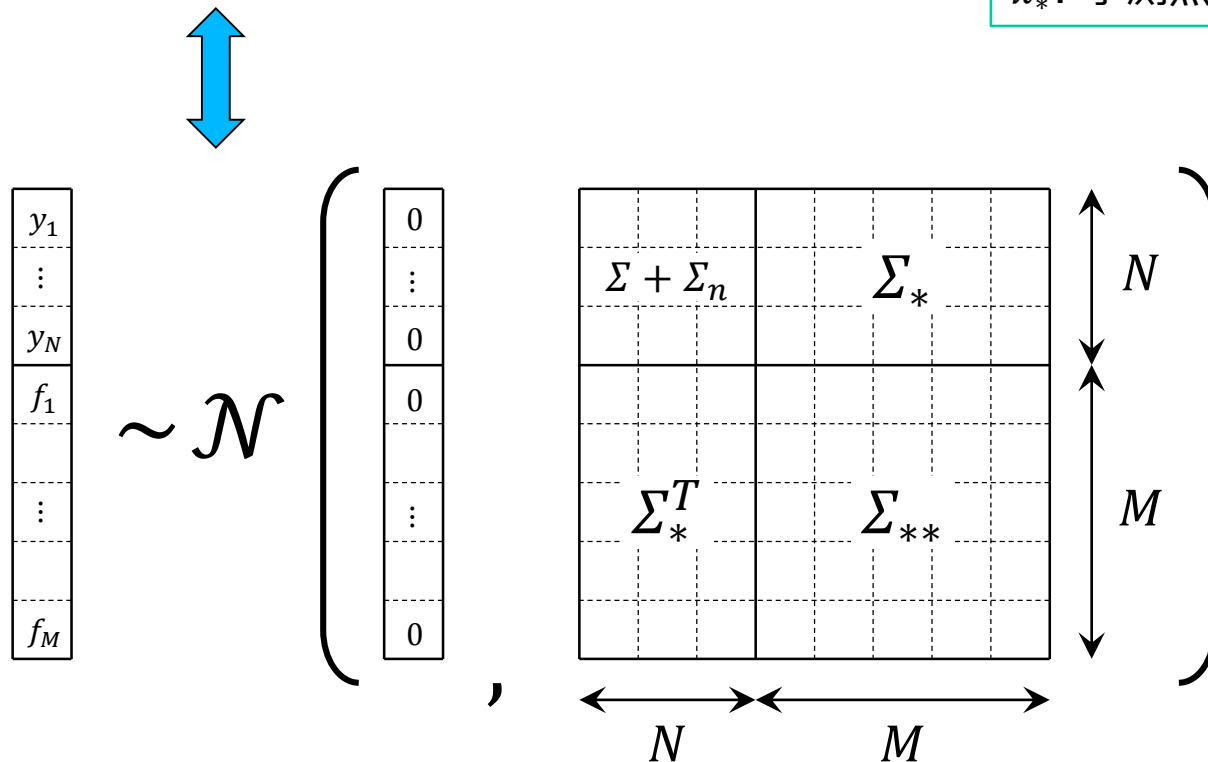
$$= \begin{bmatrix} y \\ f \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Sigma + \Sigma_n & \Sigma_* \\ \Sigma_*^T & \Sigma_{**} \end{bmatrix} \right)$$

N : 計測データの個数=140

M : 予測点の個数=161

x : 計測データの座標

x_* : 予測点の座標 (0,0.005,...0.795,0.8)



$$\Sigma = k(x_i, x_j)$$

$$\Sigma_* = k(x_i, x_{*j})$$

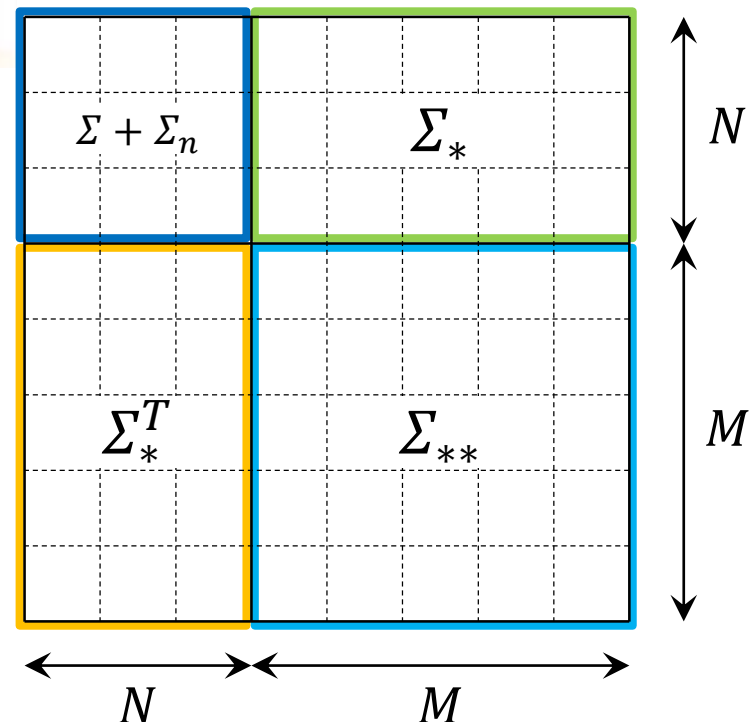
$$\Sigma_{**} = k(x_{*i}, x_{*j})$$

$$\Sigma_n = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_N^2 \end{bmatrix}$$

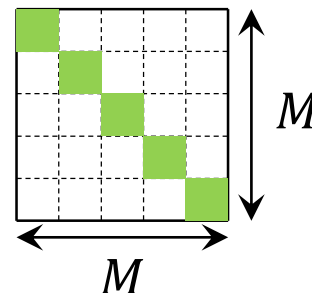
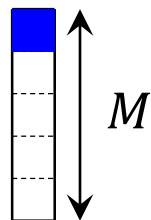
同時分布→予測分布

- 予測分布の平均・共分散は、同時分布の分割された共分散行列を用いて解析的に求まる

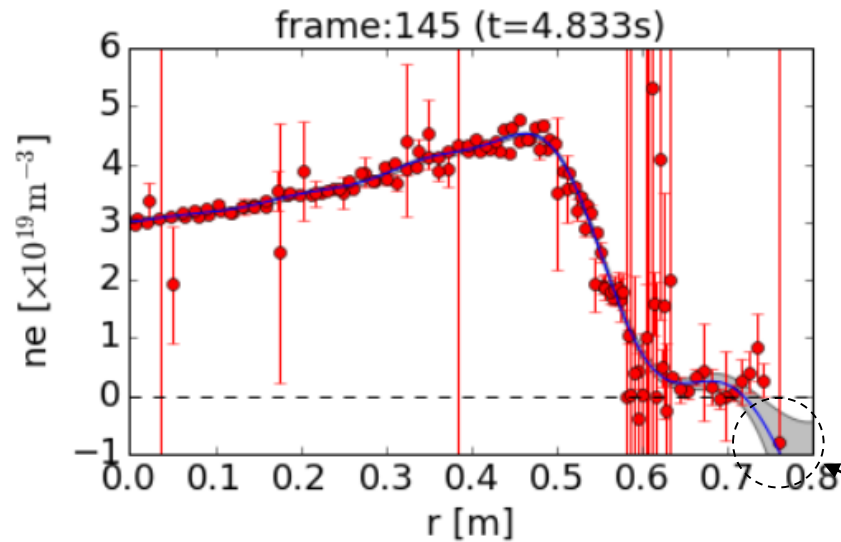
$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$



$$p(f|y, \hat{\theta}) = \mathcal{N}(\Sigma_*^T [\Sigma + \Sigma_n]^{-1} y, \Sigma_{**} - \Sigma_*^T [\Sigma + \Sigma_n]^{-1} \Sigma_*)$$

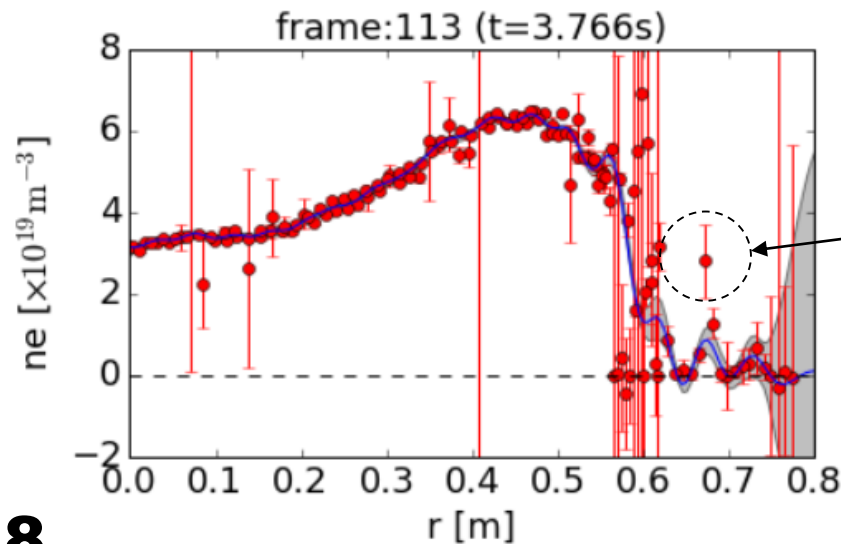


解析結果①



— 期待値
■ 期待値 $\pm$ 分散 $\times 2$

負の計測データに影響を受け、
正值から外れた回帰



外れ値に影響を受け、勾配が大
きな正負の値で頻繁に入れ替わ
る回帰

- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

モデルの改良

- 回帰結果を正值に限定 → 背後の関数 $\exp f$ の推定
- 外れ値に対して頑強に → 尤度関数にスチューデントt分布を採用

$$p(y|f, \hat{\theta}) = \mathcal{N}(f, \Sigma_n) \quad \Rightarrow \quad St(\exp f, \Sigma_n)$$

$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})}$$

$\propto$ (非ガウス分布) $\times$ (ガウス分布) $\neq$ (ガウス分布)

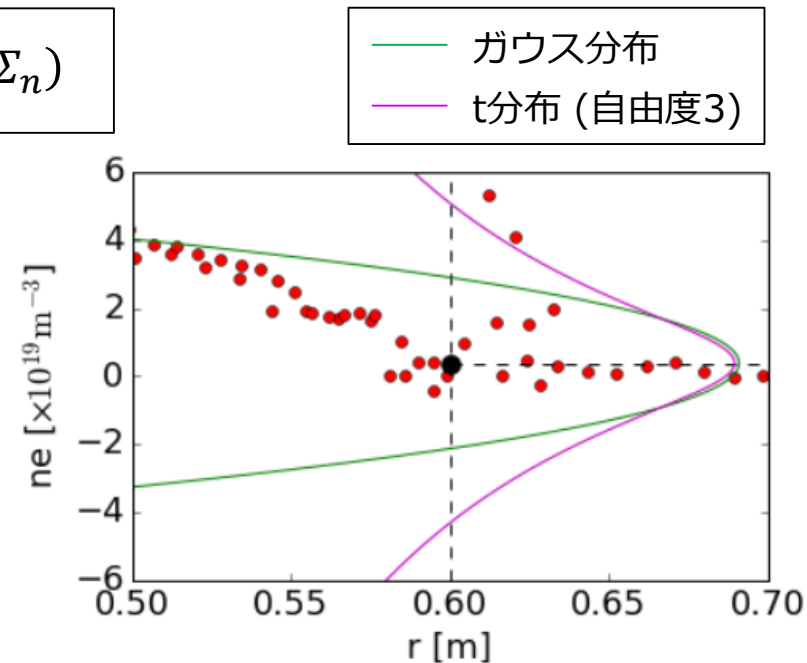
→ 予測分布 $p(f|y, \hat{\theta})$ は解析的に解けない

変分ベイズ法：予測分布をガウス分布で近似

$$p(f|y, \hat{\theta}) = \frac{p(y|f, \hat{\theta})p(f|\hat{\theta})}{p(y|\hat{\theta})} \cong \mathcal{N}(\Sigma \alpha, (\Sigma^{-1} + \Lambda)^{-1}) \equiv q(f)$$

➤ カーネルパラメータの最適化

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} p(y|\theta) = \arg \max_{\theta} \mathcal{N}(0, \Sigma + \Sigma_n) \quad \Rightarrow \quad \hat{\theta} = \arg \max_{\theta} (p(y|\theta) - KL[q||p])$$

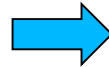
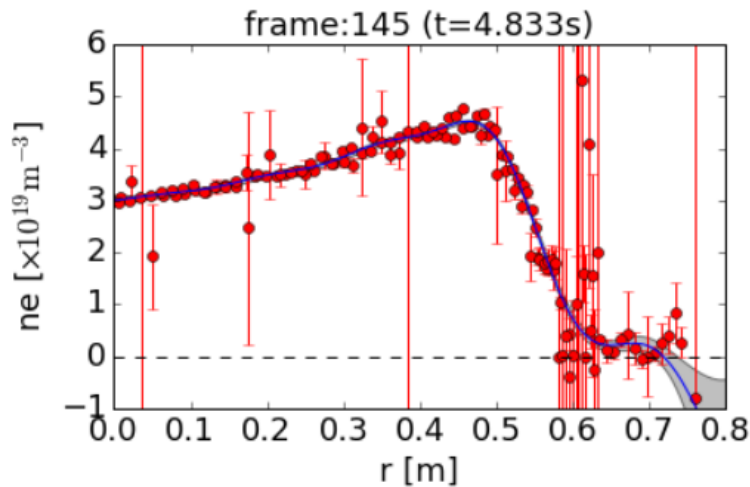


解析結果②

— 期待値
■ 期待値±分散×2

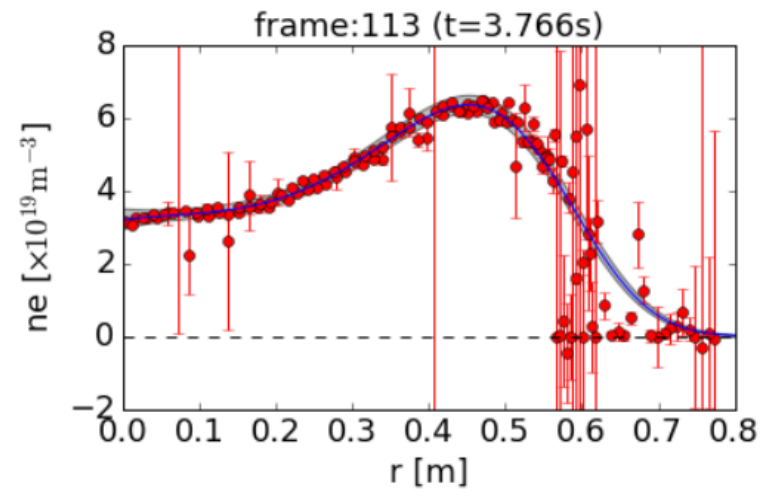
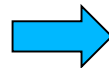
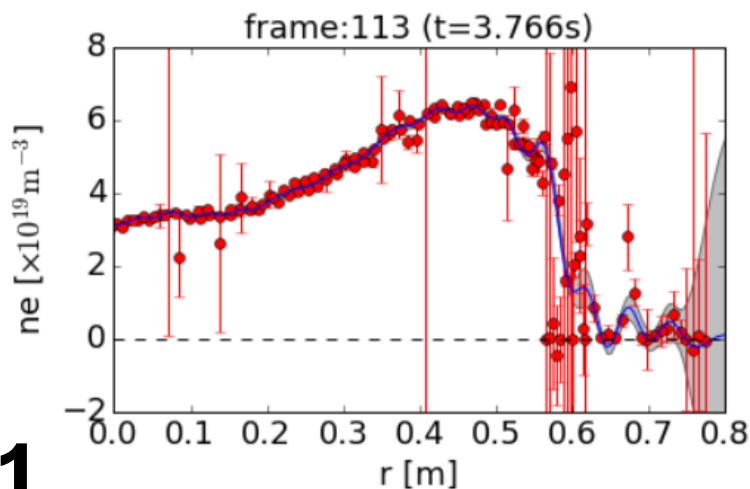
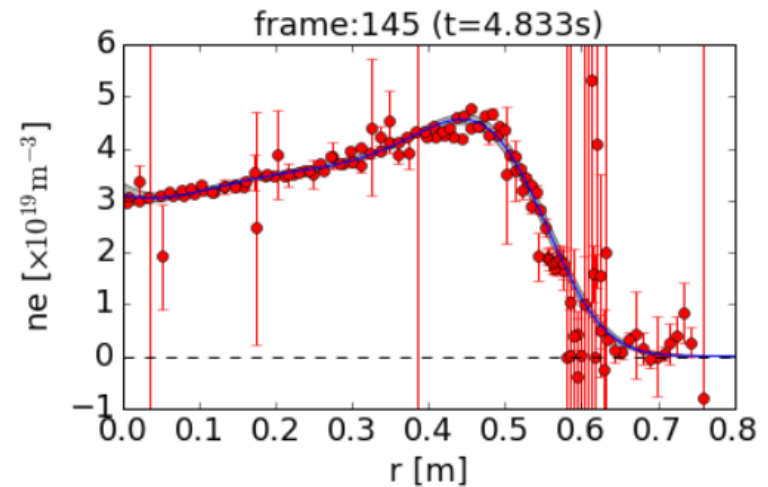
改良前

$$p(y|f, \hat{\theta}) = \mathcal{N}(f, \sigma_i^2 I_{ii})$$



改良後

$$p(y|f, \hat{\theta}) = St(\exp f, \sigma_i^2 I_{ii})$$



- ◆ ベイズの定理
- ◆ ガウス過程回帰の利点①：モデルの複雑さの統計的選択
- ◆ ガウス過程回帰の利点②：フィットの不確かさの獲得
- ◆ モデル化
- ◆ 解析結果①
- ◆ モデルの改良
- ◆ 解析結果②
- ◆ まとめ

- ◆ LHDにおけるトムソン散乱計測結果にガウス過程回帰を適用した
 - 計測時刻による、電子密度の大きさやその空間分布の形状の違いを定量的に推定できた

- ◆ ガウス過程回帰システムを改良した
 - 外れ値に頑強かつ正值に限定した回帰により、電子密度空間分布を推定できた