

LHD実験データを利用した タンクステン多価イオンの 発光スペクトル形状推定

榎阪 武彦^[1], 鈴木 千尋^[2], 村上 泉^[2, 3], 森田 繁^[2, 3]
蓮尾 昌裕^[1], 藤井 恵介^[1]

[1] 京都大学大学院工学研究科

[2] 自然科学研究機構 核融合科学研究所

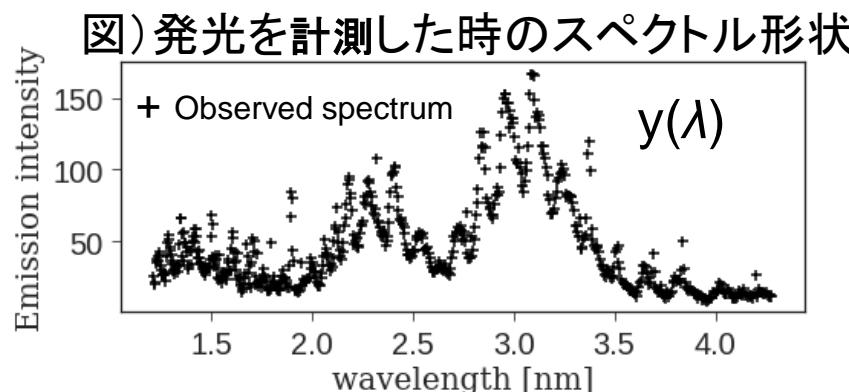
[3] 総合研究大学院大学

研究背景

- Wがプラズマ中に混入する時、数種類の W^{q+} イオンが生じる。
(本研究では $q=22-36$ の 15 種類のイオンが生じると仮定)



- 15種類の W^{q+} イオンがそれぞれ発光し、プラズマ温度を低下させる



波長範囲: 1.0nm-4.5nm

計測点: 600 (分光計の波長分解能に依存)

15種類の W^{q+} からの発光の重ね合わせ

$y(\lambda) = \sum_q n_q \Phi_q + \varepsilon$

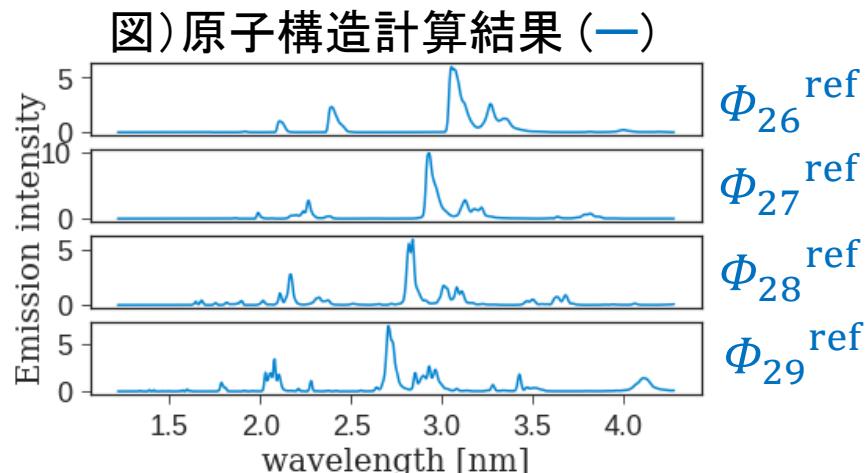
ノイズ

計測スペクトル W^{q+} 密度 W^{q+} の発光スペクトル

Wイオン輸送をモニターするために、計測スペクトル $y(\lambda)$ を分解して、
プラズマ中に含まれる 15 種類の W^{q+} イオンの n_q と Φ_q を決定することが必要

従来の手法(NNLS)による n_q , Φ_q の決定

- ① Φ_q を原子構造計算によって決定
(以降 Φ_q^{ref} と表示)

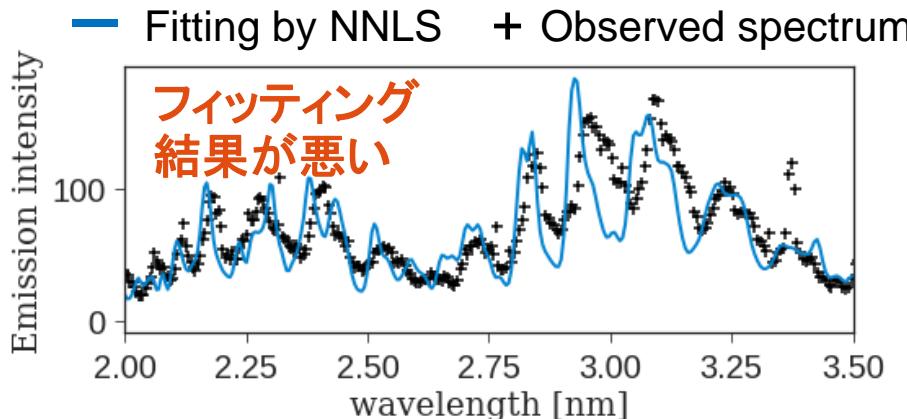


- ②NNLS(non-negative-linear)と呼ばれる手法で, 15種類の n_q を推定

$$y(\lambda) = \sum_q n_q \Phi_q^{\text{ref}}$$

/ 既知 推定 固定

図) 従来の手法(NNLS)で最適化を行った結果



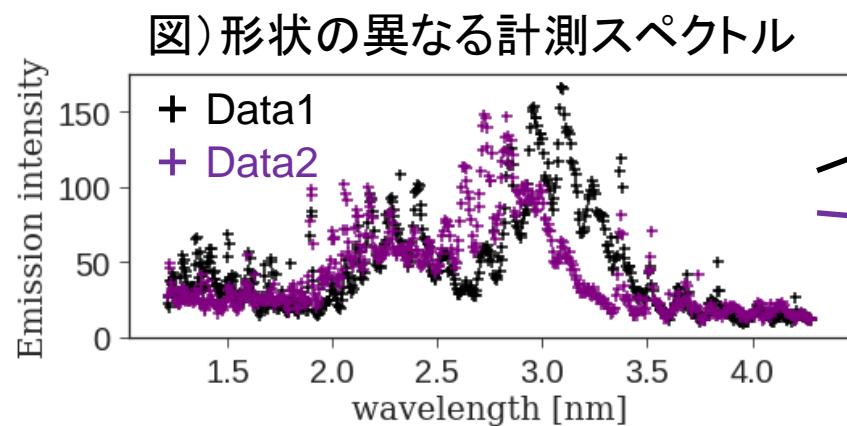
(問題点)

Φ_q^{ref} を固定してしまったため,
フィッティング結果が悪い

↓
もっと計測スペクトルに忠実な
 Φ_q , n_q を求める必要がある.

複数のデータを利用して n_q , Φ_q を決定

LHDには、異なる電子温度条件下で計測スペクトル形状が異なっている様子が複数得られている。



(データ間 Φ_q 共通の仮定)

電子温度が異なっても、15種類の発光スペクトル (Φ_q)は変化しないと仮定し、全データで Φ_q は共通であるとした。

$$\begin{aligned}
 y^{(1)}(\lambda) &= \sum_q n_q^{(1)} \Phi_q \\
 y^{(2)}(\lambda) &= \sum_q n_q^{(2)} \Phi_q \\
 y^{(3)}(\lambda) &= \sum_q n_q^{(3)} \Phi_q \\
 &\vdots
 \end{aligned}
 \quad \left. \begin{array}{l} \text{既知} \\ \text{既知} \\ \text{既知} \end{array} \right\} \quad \left. \begin{array}{l} \Phi_q \\ \Phi_q \\ \Phi_q \end{array} \right\} \quad \left. \begin{array}{l} \text{大量の} \\ \text{データ} \end{array} \right\}$$

全ての n_q , Φ_q を推定 全データで
共通と仮定

本手法では、大量のデータを一度に扱うことで、 n_q と Φ_q を推定出来ると考えた。

NMFによるNとΦの推定

複数のデータを一度に扱うために、行列形式で考える

Y : 計測スペクトル行列

$$Y = N \Phi$$

N : イオン密度行列

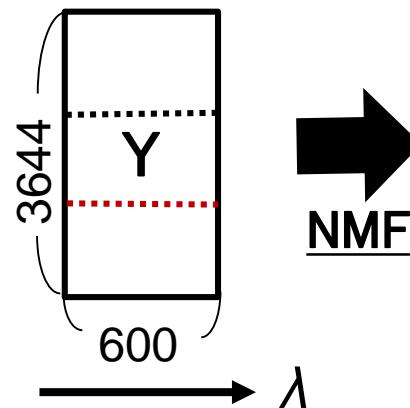
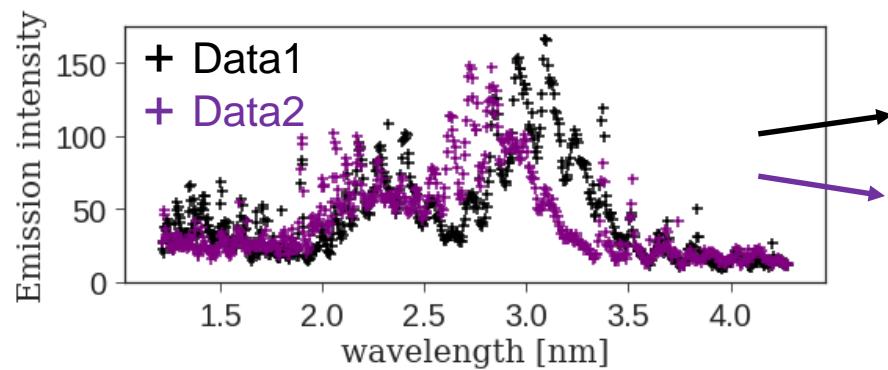
Φ : W^{q+} 発光スペクトル行列

本研究では**非負行列因子分解(NMF)**を Y に適用し、 N と Φ を決定した。

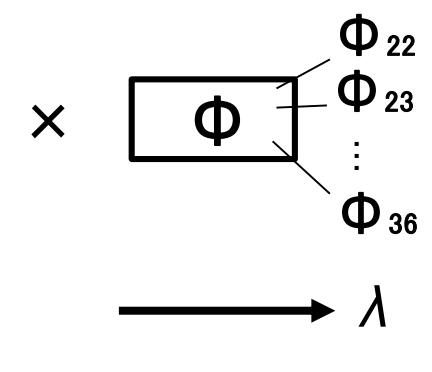
NMF

ある行列を2つの行列の積に分解する手法。
但し、分解した2つの行列の要素は全て正。

図) NMFのイメージ図



※ N と Φ の要素
は全て正



N, Φ決定に用いられる通常の誤差式

Yの要素を $y_{m,k}$, Nの要素を $n_{m,q}$, Φの要素を $\phi_{q,k}$ で表す.

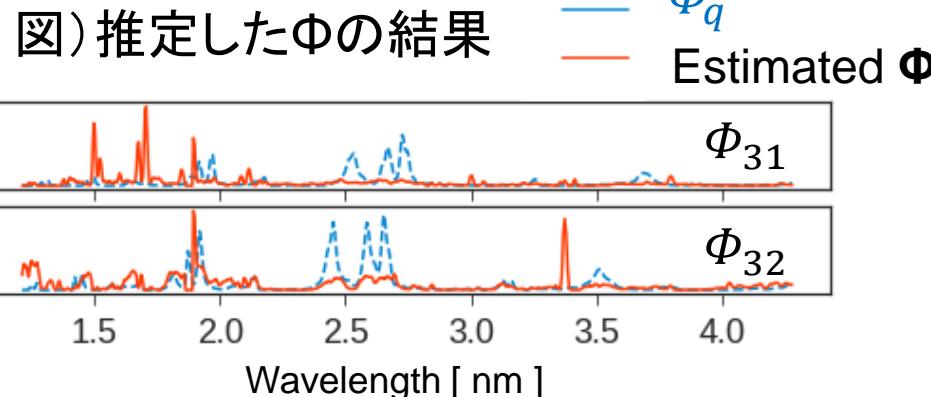
● 通常NMFで用いる誤差式

$$\text{Loss} = \sum_{m,k}^{3644, 600} \left[y_{m,k} - \sum_q^{15} n_{m,q} \phi_{q,k} \right]^2$$

NMFは, Lossを最小にする
 $n_{m,q}$, $\phi_{q,k}$ を推定



NMF



通常の誤差式の場合,
計測スペクトルに忠実であるが,
物理的に不適切なΦが推定されてしまう

- ① 形状が量子力学の計算と大きく異なる
- ② 価数のラベル付けが行われていない.

N, Φ 決定に用いた本手法での誤差式

物理的により適切な Φ を推定するため、
本研究では以下の誤差式を用いてNMFを実行した。

●本研究で用いた誤差式

$$\text{Loss} = \sum_{m,k} D_I(y_{m,k} | x_{m,k}) + \alpha \sum_{q,k} D_I(\phi_{q,k}^{\text{ref}} | \phi_{q,k})$$

$y_{m,k}$ の生成モデルを考慮した、
より適切な $y_{m,k}$ と $x_{m,k}$ 間の誤差指標

$$\text{但し, } x_{m,k} = \sum_q n_{m,q} \phi_{q,k}$$

$$D_I(a|b) = a \log\left(\frac{a}{b}\right) - a + b$$

正則化項の影響度
(50に設定)

推定する ϕ_q が ϕ_q^{ref} と
似た形状をとるように
追加した正則化項

計測スペクトルに忠実かつ原子構造計算
に近い形状の Φ を推定可能

※価数のラベル付けの働きもする

物理的情報を与えて Φ が推定可能に

$n_{m, q}, \phi_{q, k}$ の更新計算

$$\text{Loss} = \sum_{m,k} D_I(y_{m,k} | x_{m,k}) + \alpha \sum_{q,k} D_I(\phi_{q,k} | \phi_{q,k}^{\text{ref}}) \quad \dots \quad (1)$$

Lossを最小にする $n_{m, q}$ や $\phi_{q, k}$ は初期値を与えて、更新しながら探索する

● ①式中には $\log(x_{m,k})$ という非線形項が存在する。Jensenの不等式を利用して、

$$\log(x_{m,k}) \xrightarrow{\text{置換}} \sum_q \lambda_{m,q,k} \log\left(\frac{n_{m,q} \phi_{q,k}}{\lambda_{m,q,k}}\right) \quad (\lambda_{m,q,k} = \frac{n_{m,q} \phi_{q,k}}{x_{m,k}})$$

非線形項

線形項

● $\phi_{q, k}$ の更新式導出

$$\frac{\partial}{\partial \phi_{q,k}} (\text{Loss}) = \sum_{q,k} \left\{ \frac{-1}{\phi_{q,k}} \left(\sum_m y_{m,k} \lambda_{m,q,k} + \alpha \phi_{q,k}^{\text{ref}} \right) + \sum_m n_{m,q} + \alpha \right\} \quad \cdots \text{②}$$

②式を0にする $\phi_{a,k}$ に繰り返し更新する。

($\phi_{q,k}^{(n)}$: 更新前, $\phi_{q,k}^{(n+1)}$: 更新後)

$$\phi_{q,k}^{(n+1)} \leftarrow \frac{\phi_{q,k}^{(n)} \sum_m (n_{m,q} \frac{y_{m,k}}{x_{m,k}}) + \alpha \phi_{q,k}^{\text{ref}}}{\sum_m n_{m,q} + \alpha}$$

計算の実行の流れ

$$\text{Loss} = \sum_{m,k} D_I(y_{m,k} | x_{m,k}) + \alpha \sum_{q,k} D_I(\phi_{q,k} | \phi_{q,k}^{\text{ref}})$$

① Φ と N に初期値を設定する。

$$\phi_{q,k}^{(0)} \leftarrow \text{原子構造計算結果} (\phi_q^{\text{ref}})$$

$n_{m,q}^{(0)} \leftarrow \text{原子構造計算結果} (\phi_q^{\text{ref}}) \text{を用いて従来の手法 (nnls) で推定した値}$

② Φ と N の更新計算を繰り返し行う。

$$\phi_{q,k}^{(n+1)} \leftarrow \frac{\phi_{q,k}^{(n)} \sum_m (n_{m,q} \frac{y_{m,k}}{x_{m,k}}) + \alpha \phi_{q,k}^{\text{ref}}}{\sum_m n_{m,q} + \alpha}$$

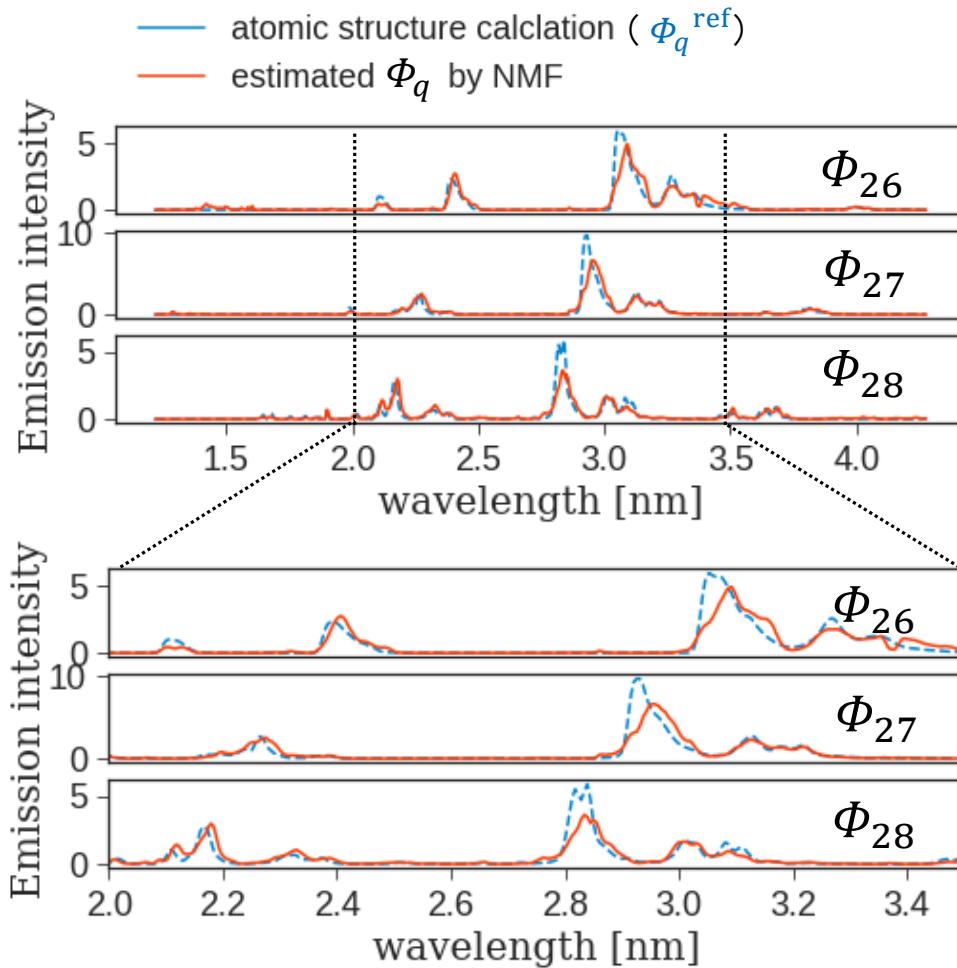
$$n_{m,q}^{(n+1)} \leftarrow \frac{n_{m,q}^{(n)} \sum_k (\phi_{q,k} \frac{y_{m,k}}{x_{m,k}})}{\sum_k \phi_{q,k}}$$

※1セット更新を行うと、Lossが単調に減少する事が数学的に確認されている。

③ Lossがある閾値を下回れば収束と判定

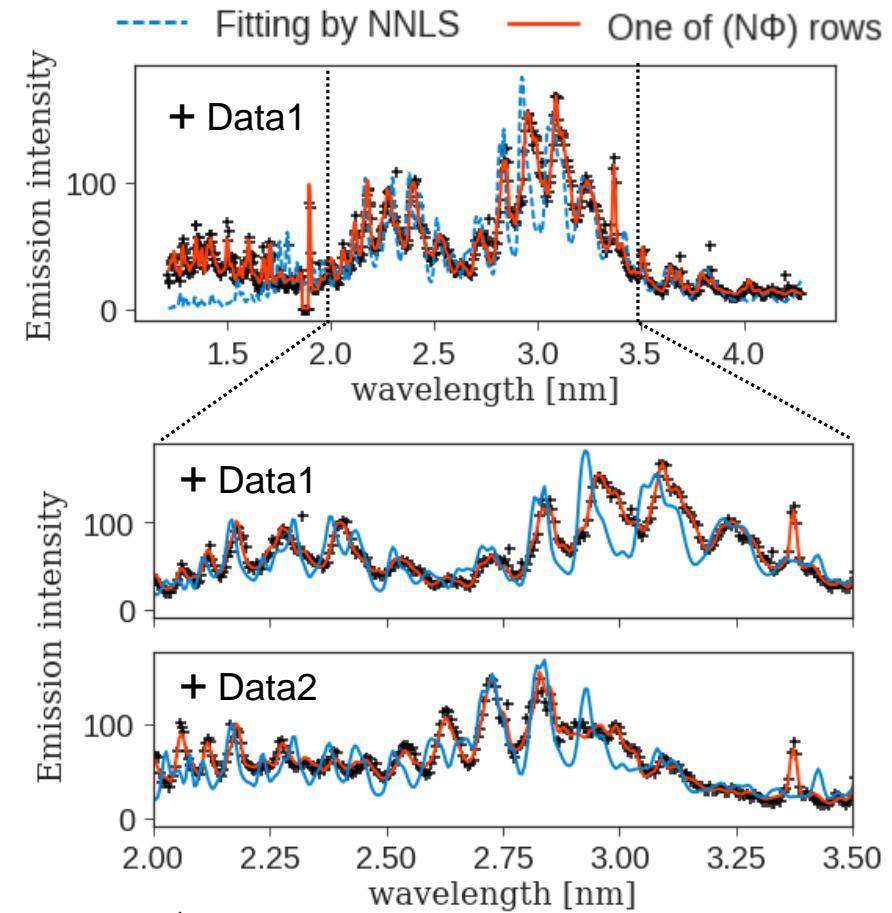
本手法のNMFによって推定した Φ の結果

図) 推定した Φ の例



推定した Φ_q と原子構造計算結果 (Φ_q^{ref}) は似た形状をとっている。

図) 推定した($N\Phi$)行列の行成分でフィッティング



※他データでも計測スペクトルを上手く表現

推定した Φ_q の方が、従来よりもうまく計測スペクトルを表現可能

まとめ

- 複数のデータを同時に扱うことが出来るNMFを計測スペクトル行列 Y に適用する事で, 密度行列 N と W^{q+} 発光スペクトル行列 Φ が計算可能.
- 誤差式を変更して, 計測スペクトルに忠実かつ原子構造計算結果を考慮した Φ が推定可能になった.
- 本手法で推定された Φ は, 従来に比べて計測スペクトルを上手く表現できており, 実験データにより忠実な W^{q+} 発光スペクトルが推定出来たと考えらえる.