3 Tilastollista inversioteoriaa

Edellisessä luvussa käsitelty tomografiaongelma on esimerkki analyyttisten menetelmien soveltamisesta inversio–ongelmiin. Suora teoria, tässä tapauksessa funktion Radon–muunnos, tunnetaan analyyttisesti hyvin, ja tavoitteena on hakea suljetussa muodossa inversiokaava, joka joudutaan mahdollisesti regularisoimaan käytännön sovelluksissa. Tässä luvussa inversio–ongelmia käsitellään *parametrin estimointiongelmana*. Oletetaan, että haluamme tietoa suureesta, jota ei suoraan voida mitata, mutta josta saadaan epäsuoraa, kohinaista ja mahdollisesti epätäydellistä informaatiota mittaamalla jokin toinen suure. Mitattavan suureen ei tarvitse määräytyä edes periaatteessa yksikäsitteisesti siitä suureesta, jota halutaan estimoida. Vastaavasti inversio–ongelmalla ei oleteta olevan yksikäsitteistä ratkaisua. Tilastollisessa inversioteoriassa pyritään selvittämään, minkä verran informaatiota estimoitavasta suureesta mittaus antaa. Informaatiota kuvaillaan tässä jakaumilla. Niinpä sekä estimoitava suure että mitattava suure tulkitaan satunnaismuuttujiksi.

Taustatiedoksi tarvitaan joitakin todennäköisyyslaskennan peruskäsitteitä, jotka käydään läpi kursorisesti ja ilman todistuksia. Pääpaino tässä luvussa on tilastollisen lähestymistavan perusfilosofian ymmärtämisessä.

3.1 Peruskäsitteitä

Merkitsemme kolmikolla $(\Omega, \mathfrak{S}, P)$ todennäköisyysavaruutta, jossa

1. $\Omega \neq \emptyset$ on näyteavaruus.
2. $\mathfrak{S}$ on tapahtumien joukko. Se koostuu Ω:n osajoukoista, ja toteuttaa seuraavat ehdot:

   a) $\Omega \in \mathfrak{S}$,

   b) Jos $A \in \mathfrak{S}$, niin $\Omega \setminus A \in \mathfrak{S}$,

   c) Jos $A_i \in \mathfrak{S}, i \in \mathbb{N}$, niin $\bigcup\limits_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathfrak{S}$.

3. P on todennäköisyysmitta, eli kuvaus $P : \mathfrak{S} \to \mathbb{R}_+$, jolle on voimassa ehdot

   a) $P(\Omega) = 1$,

   b) Jos joukot $A_i \in \mathfrak{S}$ ovat erillisiä, $i \in \mathbb{N}$, (s.o. $A_i \cap A_j = \emptyset$, jos $i \neq j$), niin

$$P(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i).$$

Tapahtumien joukkoa $\mathfrak{S}$ koskevat ehdot 2a)–2c) sanovat, että joukon Ω osajoukot muodostavat *σ–algebran.* Mitan P ominaisuutta 3b) sanotaan mitan P *σ–additiivisuudeksi.*

Rajoitutaan seuraavassa satunnaismuuttujiin äärellisulotteisissa avaruuksissa. Tämä rajoitus on lähinnä esitystekninen, jolla vältetään ääretönulotteisten avaruuksien (esim. funktioavaruuksien) topologian käsittely. Perusavaruutena on siten jatkossa $\mathbb{R}^n$, joka varustetaan Borelin joukkojen σ–algebralla. Tämä on pienin σ–algebra, joka sisältää $\mathbb{R}^n$:n avoimet joukot.

Satunnaismuuttujaksi $\mathbb{R}^n$:ssä kutsutaan mitallista kuvausta

$$x : \Omega \to \mathbb{R}^n.$$

Mitallisuus tulee ymmärtää Borelin joukkojen suhteen, s.o. $x^{-1}(B) \in \mathfrak{S}$ kaikilla $\mathbb{R}^n$:n Borelin joukoilla $B \subset \mathbb{R}^n$.

Olkoon x satunnaismuuttuja $\mathbb{R}^n$:ssä. Tällöin x indusoi $\mathbb{R}^n$:ään todennäköisyysmitan μ,

$$\mu(B) = P(x^{-1}(B)) = \text{todennäköisyys sille, että } x \in B.$$

Mittaa μ sanotaan x:n *jakaumaksi.*

Olkoot μ_1 ja μ_2 kaksi $\mathbb{R}^n$:n mittaa. Sanotaan, että mitta μ_1 on *absoluuttisesti jatkuva* mitan μ_2 suhteen mikäli ehdosta $\mu_2(B) = 0$ seuraa $\mu_1(B) = 0$, kun $B \subset \mathbb{R}^n$ on mitallinen. Osoittautuu, että mitan μ_2 suhteen absoluuttisesti jatkuva mitta μ_1 voidaan esittää integraalina mitan μ_2 suhteen. Seuraava lause tunnetaan nimellä *Radon–Nikodymin lause.*

Lause 3.1 *Olkoot μ_1 ja μ_2 mittoja $\mathbb{R}^n$:ssä, ja oletetaan, että μ_1 on absoluuttisesti jatkuva μ_2:n suhteen. Tällöin on olemassa mitallinen funktio $\rho : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$, jolle*

$$\mu_1(B) = \int_B \rho(t) d\mu_2(t)$$

Funktiota ρ sanotaan μ_1:n Radon-Nikodymin derivaataksi μ_2:n suhteen, ja merkitään

$$\rho(t) = \frac{d\mu_1(t)}{d\mu_2(t)}.$$

Erityisesti jos satunnaismuuttujan x jakauma μ on absoluuttisesti jatkuva $\mathbb{R}^n$:n Lebesguen mitan suhteen, niin voimme kirjoittaa jakauman integraalina

$$\mu(B) = \int_B \rho(t) dt.$$

Funktiota ρ sanotaan tällöin x:n *tiheysfunktioksi* $\mathbb{R}^n$:ssä. Se siis ilmaisee, millä todennäköisyydellä x:n arvot jakautuvat avaruuteen. Luonnollisesti

$$\int_{\mathbb{R}^n} \rho(t) dt = 1,$$

mikä seuraa mitan P ominaisuudesta 3a).

Jatkossa tarkastellaan useita satunnaismuuttujia samanaikaisesti. Omaksutaan seuraava merkintätapa, joka on jonkin verran epästandardi, mutta on osoittautunut inversio–ongelmien yhteydessä käyttökelpoiseksi. Olkoot $x_0, x_1, x_2, ...$ satunnaismuutujia

$$x_j : \Omega \to \mathbb{R}^{n_j}.$$

Merkitään x_j:n todennäköisyysjakumaa

$$\mu(B_j) = P(x_j^{-1}(B_j)), \quad B_j \in \mathbb{R}^{n_j}.$$

Siis se, minkä satunnaismuuttujan jakaumasta on kysymys, selviää vain joukon alaindeksistä. Alaindeksi varataan jatkossa vain tähän käyttöön. Satunnaismuuttujan x_j saamia *arvoja* eli realisaatioita merkitään muuttujalla $t_j \in \mathbb{R}^{n_j}$. Siis täsmällisesti

$$x_j(\omega) = t_j, \quad \omega \in \Omega.$$

Käytännössä näyteavaruuden piste ω jätetään yleensä kirjoittamatta näkyviin, ja merkitään lyhyesti $x_j = t_j$. Vastaavasti satunnaismuuttujan jakauman suhteen integroitaessa käytetään merkintää

$$\mu(B_j) = \int_{B_j} d\mu(t_j).$$

Olkoot x_0 ja x_1 satunnaismuuttujia

$$x_j : \Omega \to \mathbb{R}^{n_j}, \quad j = 0, 1.$$

Satunnaismuuttujien *yhteisjakauma* määritellään kaavalla

$$\mu(B_0, B_1) = P(x_0^{-1}(B_0) \cap x_1^{-1}(B_1)).$$

Luku $\mu(B_0, B_1)$ ilmoittaa todennäköisyyden sille, että samanaikaisesti $x_0 \in B_0$ ja $x_1 \in B_1$ eli tapahtumien B_0 ja B_1 todennäköisyyden.

Satunnaismuuttujia x_0 ja x_1 sanotaan *riippumattomiksi*, mikäli pätee

$$\mu(B_0, B_1) = \mu(B_0)\mu(B_1),$$

eli sanallisesti todennäköisyys taphtumalle $(x_0, x_1) \in B_0 \times B_1$ on toisistaan riippumattomien tapahtumien $x_0 \in B_0$ ja $x_1 \in B_1$ todennäköisyyksien tulo. Jos yhteisjakauma $\mu(B_0, B_1)$ voidaan ilmaista tiheysfunktion $\rho(t_0, t_1)$ avulla, merkitsee riippumattomuus sitä, että

$$\rho(t_0, t_1) = \rho_0(t_0)\rho_1(t_1).$$

Jatkossa tarvitaan *ehdollisen jakauman* käsitettä. Intuitiivisesti x_0:n jakauma ehdolla $x_1 = t_1$ tarkoittaa x_0:n jakaumaa, kun on rajoitettu niiden tapahtumien piiriin, jossa x_1 saa annetun arvon t_1. Alkeistodennäköisyyslaskennassa määritellään tapahtuman $A \subset \Omega$ todennäköisyys ehdolla $B \in \mathfrak{S}$, $P(B) \neq 0$ kaavalla

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

Ongelmalliseksi tämän kaavan soveltamisen tekee se, että taphtuma $B = x_1^{-1}(\{t_1\})$ saattaa olla nollamittainen. Siksi ehdollinen jakauma joudutaan määrittelemään sopivan rajaprosessin kautta. Voimme ajatella, että x_0:n jakauma ehdolla $x_1 = t_1$ saadaan seuraavasti. Oletetaan, että x_1:lle on mitattu arvo t_1. Valitaan jono pieneviä joukkoja $B_1^{(j)}$ siten, että

$$B_1^{(1)} \supset \ldots B_1^{(j)} \supset B_1^{(j+1)} \supset \ldots, \quad \bigcap_{j=1}^{\infty} B_1^{(j)} = \{t_1\}$$

ja joille

$$\mu(B_1^{(j)}) > 0 \quad \text{kaikilla } j \in \mathbb{N}.$$

Tuntuu luonnolliselta, että x_0:n jakauma siinä joukossa, jossa $x_1 = t_1$ tulisi ainakin formaalisti olla

$$\mu(B_0|t_1) = \lim_{j \to \infty} \frac{P(x_0^{-1}(B_0) \cap x_1^{-1}(B_1^{(j)}))}{P(x_1^{-1}(B_1^{(j)}))}.$$

Perusajatus osoittautuu oikeaksi. Täsmällisesti ehdollinen jakauma määritellään edellä esitetyn Radon–Nikodymin lauseen avulla.

Kiinnitetään joukko B_0, ja tarkastellaan mittaa

$$B_1 \mapsto \mu(B_0, B_1)$$

Koska

$$x_0^{-1}(B_0) \cap x_1^{-1}(B_1) \subset x_1^{-1}(B_1),$$

niin

$$\mu(B_0, B_1) \leq \mu(B_1) \quad \text{kaikille } B_1.$$

Radon–Nikodymin lauseesta seuraa siten, että on olemassa funktio $t_1 \mapsto \mu(B_0|t_1)$ siten, että

$$\mu(B_0|B_1) = \int_{B_1} \mu(B_0|t_1) d\mu(t_1).$$

Ehdollisen jakauman määritelmä saadaan seuraavasta lauseesta. Lauseen todistus on melko työläs, ja se sivuutetaan tässä.

Lause 3.2 *Merkitään $\mathfrak{S}_0$:lla $\mathbb{R}^{n_0}$:n Borelin joukkojen σ–algebraa. Funktio*

$$\mathfrak{S}_0 \times \mathbb{R}^{n_1} \to \mathbb{R}_+, \quad (B_0, t_1) \mapsto \mu(B_0 \mid t_1)$$

voidaan määritellä siten, että

1. *Kuvaus $B_0 \mapsto \mu(B_0|t_1)$ on mitta kaikilla $t_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$,*
2. *Kuvaus $t_1 \mapsto \mu(B_0|t_1)$ on Borel–mitallinen kuvaus kaikilla $B_0 \in \mathfrak{S}_0$.*

Ongelmakohta edellä esitetyn lauseen todistuksessa on se, että Radon–Nikodymin lause toteaa vain melkein kaikkialla määritellyn funktion $t_1 \mapsto \mu(B_0|t_1)$ olemassaolon. Nollamittainen poikkeusjoukko voi riippua joukosta B_0, joita on yleensä ylinumeroituva määrä, ja ylinumeroituvan monen nollamittaisen joukon unioni ei välttämättä ole enää nollamittainen. Edellinen lause sanoo, että voidaan kuitenkin löytää B_0–joukoista riippumaton nollamittainen poikkeusjoukko.

Saatua mitta–arvoista funktioita $\mu(\,\cdot\,|t_1)$ sanotaan siis x_0:n *ehdolliseksi jakaumaksi ehdolla* $x_1 = t_1$, jolle voidaan antaa tulkinta

$$\mu(B_0|t_1) = \text{todennäköisyys, että } x_0 \in B_0, \text{ kun } x_1\text{:llä on arvo } t_1.$$

Erityisen yksinkertainen ehdollinen jakauma on silloin, kun x_0 ja x_1 ovat riippumattomia. Tällöin nimittäin

$$\mu(B_0 \mid t_1) = \mu(B_0),$$

eli x_0:n jakauma on sama, sai x_1 minkä arvon hyvänsä. Mainitaan vielä, että jos yhteisjakaumalla on tiheysfunktio $\rho(t_0, t_1)$, niin

$$\mu(B_0 \mid t_1) = C \int_{B_0} \rho(t_0, t_1) dt_0,$$

missä $C > 0$ on t_1:stä riippuva vakio, joka lasketaan ehdosta $\mu(\mathbb{R}^{n_0} \mid t_1) = 1$, mikä takaa, että ehdollinen jakauma määrää kaikilla t_1 todennäköisyysmitan. Siis ehdollisen jakauman tiheysfunktio saadaan jäädyttämällä yhteisjakauman tiheysfunktiossa toinen muuttuja kiinni.

Siirytään seuraavaksi tarkastelemaan inversio–ongelmia jakaumien näkökulmasta

3.2 Inversio–ongelmat ja Bayesin kaava

Tarkastellaan nyt yleisesti inversio–ongelmaa, jossa tavoitteena on estimoida suuretta $x_0 \in \mathbb{R}^{n_0}$ perustuen suureen $x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ mittaukseen. Mallinnetaan sekä suuretta x_0 että suuretta x_1 satunnaismuuttujina. Oletetaan, että suureiden x_0 ja x_1 riippuvuus toisistaan voidaan ilmaista kaavalla

$$F(x_0, x_1, \omega) = 0, \tag{1}$$

missä näyteavaruuden piste ω on kirjoitettu eksplisiittisesti näkyviin muistuttamaan siitä, että x_0:n ja x_1:n välinen riippuvuus voi olla ei–deterministinen. Näin on esimerkiksi silloin, kun mittaus on kohinainen tai mallissa on tuntemattomia parametreja.

Oletetaan, että estimoitavasta suureesta x_0 on olemassa jotain ennakkotietoa eli *a priori*–tietoa. Bayesiläisessä tilastollisessa lähestymistavassa oletetaan, että tämä tieto voidaan ilmaista ns. *priorijakaumana* $\mu_{\mathrm{pr}}(B_0)$. Priorijakauma ilmaisee todennäköisyyden sille, että x_0 on annetussa joukossa ilman, että minkäänlaista mittausta on tehty.

Tarkastellaan nyt tilannetta, jossa estimoitava parametri x_0 on kiinnitetty. Olkoon $x_0 = t_0 \in \mathbb{R}^{n_0}$. Tällöin voimme ainakin periaatteessa laskea ehdollisen jakauman $\mu(B_1 \mid t_0)$ lähtien yhtälöstä (1). Ehdollinen jakauma ilmaisee mitattavan parametrin jakauman kohinoineen ja mallinnusvirheineen sillä oletuksella, että estimoitava parametri saa tunnetun arvon. Yhteisjakauma $\mu(B_0, B_1)$ voidaan nyt kirjoittaa integraalina

$$\mu(B_0, B_1) = \int_{B_0} \mu(B_1 \mid t_0) d\mu_{\mathrm{pr}}(t_0).$$

Ehdollinen mitta $\mu(B_1 \mid t_0)$ on tämän kaavan mukaan yhteisjakauman $\mu(B_0, B_1)$ Radon–Nikodymin derivaatta priorimitan suhteen,

$$\mu(B_1 \mid t_0) = \frac{d\mu(t_0, B_1)}{d\mu_{\mathrm{pr}}(t_0)}.$$

Lasketaan nyt mitattavan suureen x_1 jakauma, kun estimoitava suure saa mielivaltaisia arvoja. Nähdään, että

$$\mu(B_1) = \mu(\mathbb{R}^{n_0}, B_1) = \int_{\mathbb{R}^{n_0}} \mu(B_1 \mid t_0) d\mu_{\mathrm{pr}}(t_0).$$

Määritelmän mukaan estimoitavan suureen ehdollinen jakauma ehdolla $x_1 = t_1$ voidaan nyt laskea, sillä

$$\mu(B_0 \mid t_1) = \frac{d\mu(B_0, t_1)}{d\mu(t_1)}.$$

Tilastollisessa inversioteoriassa saatu *posteriorijakauma* on inversio–ongelman täydellinen ratkaisu. Se ilmaisee täsmällisesti, miten paljon tietoa muuttujan x_0 arvoista voidaan saada mittaukseen $x_1 = t_1$ pohjautuen.

Kun posteriorijakauma tunnetaan, sen avulla voidaan laskea parametrille x_0 estimaatti integraalina

$$\tilde{x}_0(t_1) = \int_{\mathbb{R}^{n_0}} t_0 d\mu(dt_0 \mid t_1).$$

Kyseessä on siten posteriorimitan määräämän todennäköisyysjakauman suhteen laskettu odotusarvo. Vastaavasti voidaan laskea muita posteriorijakaumaa kuvaavia suureita. Posteriorikovarianssi, joka on $n_0 \times n_0$–matriisi, lasketaan integraalina

$$C_{\text{post}}(t_1) = \int_{\mathbb{R}^{n_0}} (t_0 - \tilde{x}_0)(t_0 - \tilde{x}_0)^T d\mu(t_0 \mid t_1).$$

Posteriorijakauma edellä esitetyssä yleisessä muodossa tulee havainnollisemmaksi, mikäli oletetaan, että jakaumia voidaan kuvailla tiheysfunktioiden avulla. Olkoot siis

$$\mu(B_1 \mid x_0) = \int_{B_1} \rho(t_1 \mid t_0) dt_1, \quad B_1 \subset \mathbb{R}^{n_1},$$

ja

$$\mu_{\text{pr}}(B_0) = \int_{B_0} \rho_{\text{pr}}(t_0) dt_0, \quad B_0 \subset \mathbb{R}^{n_0},$$

jolloin yhteisjakauma saadaan integraalina

$$\mu(B_0, B_1) = \int_{B_0} \left(\int_{B_1} \rho(t_1 \mid t_0) dt_1 \right) \rho_{\text{pr}}(t_0) dt_0.$$

Siis yhteisjakauman tiheysfunktio on

$$\rho(t_0, t_1) = \rho_{\text{post}}(t_0) \rho(t_1 \mid t_0).$$

Mittauksen x_1 jakauman tiheysfunktio $\rho(t_1)$ luetaan integraalista

$$\mu(B_1) = \mu(\mathbb{R}^{n_0}, B_1) = \int_{B_1} \left(\int_{\mathbb{R}^{n_0}} \rho(t_1 \mid t_0) \rho_{\text{pr}}(t_0) dt_0 \right) dt_1,$$

eli

$$\rho(t_1) = \int_{\mathbb{R}^{n_0}} \rho(t_1 \mid t_0) \rho_{\text{pr}}(t_0) dt_0.$$

Kirjoitetaan yhteisjakauma nyt muotoon

$$\mu(B_0, B_1) = \int_{B_1} \int_{B_0} \frac{\rho(t_0, t_1)}{\rho(t_1)} dt_0 \rho(t_1) dt_1,$$

ja toisaalta muotoon

$$\mu(B_0, B_1) = \int_{B_1} \int_{B_0} \rho(t_0 \mid t_1) dt_0 \rho(t_1) dt_1,$$

mistä vertaamalla tiheyksiä nähdään, että

$$\rho(t_0 \mid t_1) = \frac{\rho(t_0, t_1)}{\rho(t_1)} = \frac{\rho_{\text{pr}}(t_0) \rho(t_1 \mid t_0)}{\rho(t_1)}.$$

Tämä kaava tunnetaan *Bayesin kaavan* nimellä.

Seuraavien esimerkkien tarkoitus on valaista, miten Bayesin kaavassa esiintyvä ehdollinen tiheusfunktio $\rho(t_1 \mid t_0)$ eräissä erikoistapauksissa voidaan määrätä.

Esimerkki: Tarkastellaan tilannetta, jossa mitattava suure $x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ riippuu estimoitavasta suureesta $x_0 \in \mathbb{R}^{n_0}$ tunnetun deterministisen funktion f kautta. Oletetaan lisäksi, että mittaus sisältää additiivisen satunnaisen virheen. Kaava (1) voidaan kirjoittaa nyt muotoon

$$x_1 = f(x_0) + \eta, \tag{2}$$

missä η on satunnaisvirhe. Oletetaan, että virheen jakaumaa kuvaava tiheysfunktio tunnetaan. Olkoon

$$P(\eta \in B) = \int_B \pi(t)dt.$$

Jos edelleen oletetaan, että satunnaismuuttujat x_0 ja η ovat riippumattomat, niin tällöin yhtälöstä (2) voidaan päätellä, että

$$\rho(t_1 \mid t_0) = \pi(t_1 - f(t_0)),$$

toisin sanoen kiinteällä x_0:n arvolla t_0 muuttuja x_1 voi vaihdella arvon $f(t_0)$ ympärillä täsmälleen kohinan ilmoittaman määrän. Bayesin kaava saa nyt muodon

$$\rho(t_0 \mid t_1) = \frac{\rho_{\mathrm{pr}}(t_0)\pi(t_1 - f(t_0))}{\rho(t_1)}. \tag{3}$$

Esimerkki: Olkoot t_0 ja t_1 reaaliarvoisia satunnaismuuttujia, ja oletetaan, että x_1:n mittauksessa tehdään multiplikatiivinen virhe. Olkoon siis malli

$$x_1 = (1 + \eta)f(x_0), \quad f(x_0) > 0. \tag{4}$$

missä jälleen kohinan η tiheysfunktio π tunnetaan. Oletetaan jälleen, että estimoitava parametri x_0 ja kohina η ovat riippumattomat. Kiinnitetään arvoon t_0. Olkoon $a \in \mathbb{R}$. Tarkastellaan ehtoa

$$x_1 = (1 + \eta)f(t_0) < a,$$

joka on yhtäpitävää ehdon

$$\eta < \frac{a}{f(t_0)} - 1$$

kanssa. Nähdään, että

$$\mu((-\infty, a) \mid t_0) = \int_{-\infty}^{a/f(t_0)-1} \pi(t)dt = \frac{1}{f(t_0)} \int_{-\infty}^{a} \pi(\frac{t_1}{f(t_0)} - 1)dt_1,$$

mistä päätellään, että ehdollisen jakauman $\mu(B_1 \mid t_0)$ tiheysfunktion $\rho(t_1 \mid t_0)$ täytyy olla muotoa

$$\rho(t_1 \mid t_0) = \frac{1}{f(t_0)}\pi(\frac{t_1}{f(t_0)} - 1).$$

Määritellään vielä *marginaalijakauman* käsite. Oletetaan, että $n_0 \geq 2$, ja kirjoitetaan satunnaismuuttuja x_0 kahteen osaan,

$$x_0 = \begin{pmatrix} x_0' \\ x_0'' \end{pmatrix}, \quad x_0' \in \mathbb{R}^k,\ x_0'' \in \mathbb{R}^{n_0-k}.$$

Oletetaan, että olemme kiinnostuneita vain muuttujasta x_0'. Muuttujan x_0' marginaalijakauma ehdolla $x_1 = t_1$ saadaan integroimalla muuttuja x_0'' jakaumasta pois. Jos $B_0' \subset \mathbb{R}^k$, niin määritellään x_0':n marginaalijakauma kaavalla

$$\mu(B_0' \mid t_1) = \mu(B_0' \times \mathbb{R}^{n_0-k} \mid t_1),$$

eli muuttuja x_0'' saa saada minkä arvon hyvänsä. Tiheyksien avulla ilmaistuna muuttujan x_0' marginaalitiheys $\rho(t_0' \mid t_1)$ määritellään integraalina

$$\rho(t_0' \mid t_1) = \int_{\mathbb{R}^{n_0-k}} \rho(t_0 \mid t_1) dt_0'', \quad t_0 = \begin{pmatrix} t_0' \\ t_0'' \end{pmatrix}.$$

Harjoitustehtäviä:

1. Mitataan reaaliarvoista muuttujaa x huonolla mittalaitteella, joka kertoo muuttujan x satunnaisluvulla ja lisää vielä kohinaa. Mittaus on siten muotoa

$$y = \alpha x + \eta.$$

   Oletetaan, että α, x ja η ovat keskenään riippumattomia. Lisäksi tehdään seuraavat oletukset: (i) Luku α on välille $[0, 1]$ tasaisesti jakautunut satunnaismuuttuja; (ii) Kohinan η tiheusfunktio $\pi(t)$ on

$$\pi(t) = Ce^{-\frac{1}{2\sigma^2}t^2}, \quad \sigma > 0,\ C = \text{vakio}$$

   ja (iii) x:n tiedetään a priori saavan minkä tahansa arvon välillä $[0, 1]$ samalla todennäköisyydellä.

   Kirjoita tiheysfunktio $\rho(x, \alpha \mid y)$ ja laske tästä x:n marginaalitiheys $\rho(x \mid y)$.

2. Tarkastellaan lineaarista mallia

$$x_1 = Ax_0 + \eta, \quad x_0, x_1 \in \mathbb{R}^2.$$

   Oletetaan, että 2×2–matriisi A on huonosti tunnettu, ja se pyritään määräämään *kalibrointimittauksella*: Tunnetulla syötteellä $x_0 = t_0$ mitataan vaste x_1 ja estimoidaan A:ta. Kirjoita Bayesin kaavan mukainen tiheysfunktio $\rho(A \mid x_1)$, kun kohinan η tiheysfunktio $\pi(t)$ tunnetaan.

3. Seuraava tehtävä on yksinkertainen malli *sokeasta dekonvoluutio–ongelmasta*: Olkoon annettu lineaarinen malli

$$y = Ax + \eta, \quad x, y \in \mathbb{R}^2$$

missä matriisi A on muotoa

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix}.$$

Oletetaan, että sekä matriisin A elementit a_1, a_2 että itse signaali x ovat tuntemattomia, ja halutaan estimoida x:ää. Priori–informaationa on annettu vektoreiden x ja $a = (a_1, a_2)^T$ priorijakaumat sekä kohinan η jakauma. Olettaen x, a ja η riippumattomiksi kirjoita x:n posteriorijakauma $\rho(x \mid y)$. Laske jakauma eksplisiittisesti, kun η:n jakauma on

$$\pi(t) = Ce^{-\frac{1}{2\sigma^2}t^T t}, \quad C = \text{vakio},$$

ja a:n priorijakauma on

$$p(t) = Ce^{\frac{1}{2\sigma^2}(t-\overline{a})^T(t-\overline{a})}, \quad C = \text{vakio}, \ \overline{a} \in \mathbb{R}^2.$$

3.3 Gaussinen lineaarinen teoria

Olkoon $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ kiinteä piste ja $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ positiividefiniitti symmetrinen matriisi. Siis C toteuttaa ehdot

$$C^T = C, \quad z^T Cz > 0$$

kaikilla $z \in \mathbb{R}^n$, $z \neq 0$. Matriisin C positiividefiniittisyydestä seuraa, että C on kääntyvä, joten sen determinantti on positiivinen. Merkitään C:n determinanttia lyhyesti $|C|$:llä. Olkoon $x : \Omega \to \mathbb{R}^n$ satunnaismuuttuja. Sanotaan, että x on *Gaussinen satunnaismuuttuja*, mikäli sen tiheysfunktio on

$$\rho(t) = \left(\frac{1}{2\pi|C|}\right)^{n/2} e^{-\frac{1}{2}(t-\overline{x})^T C^{-1}(t-\overline{x})}.$$

Pistettä $\overline{x}$ sanotaan jakauman *keskipisteeksi* ja matriisia C sen *kovarianssimatriisiksi*. Keskipiste ja kovarianssimatriisi liittyvät satunnaismuuttujan odotusarvoon ja kovarianssiin yksinkertaisesti siten, että

$$\mathrm{E}x = \int_{\mathbb{R}^n} t\rho(t)dt = \overline{x}$$

ja

$$\mathrm{E}(x-\overline{x})(x-\overline{x})^T = \int_{\mathbb{R}^n} (t-\overline{x})(t-\overline{x})^T \rho(t)dt = C.$$

Tässä luvussa tarkastellaan tilannetta, jossa mittauksen ja estimoitavan välillä vallitsee lineaarinen riippuvuus additiivista virhettä vaille. Olkoot siis x_0 ja x_1 satunnaismuuttujia $\mathbb{R}^{n_0}$:ssa ja $\mathbb{R}^{n_1}$:ssä, ja pätee

$$x_1 = Ax_0 + \eta,$$

missä A on $n_1 \times n_0$–matriisi. Oletetaan, että x_0 ja η ovat riippumattomia Gaussisia satunnaismuuttujia. Olkoot x_0:n prioritiheys $\rho_{\rm pr}(t_0)$ ja kohinan η tiheysfunktio $\pi(t)$ annettu kaavoilla

$$\rho_{\rm pr}(t_0) = \left(\frac{1}{2\pi|C_0|}\right)^{n_0/2} e^{-\frac{1}{2}(t_0-\overline{x}_0)^T C_0^{-1}(t_0-\overline{x}_0)}$$

ja

$$\pi(t) = \left(\frac{1}{2\pi|D|}\right)^{n_1/2} e^{-\frac{1}{2}t^T D^{-1} t}.$$

Kohinan oletetaan siis olevan nollakeskistä. Voimme nyt soveltaa edellisessä luvussa esitettyä aditiivisen riippumattoman virheen antamaa kaavaa (3) posteriorijakauman laskemiseksi. Posterioritiheys on muotoa

$$\rho(t_0|t_1) = \alpha(t_1) e^{-\frac{1}{2}(t_0-\overline{x}_0)^T C_0^{-1}(t_0-\overline{x}_0) - \frac{1}{2}(t_1-At_0)^T D^{-1}(t_1-At_0)},$$

missä $\alpha(t_1)$ on normitusvakio,

$$\alpha(t_1) = \frac{1}{\rho(t_1)} \left(\frac{1}{2\pi|C_0|}\right)^{n_0/2} \left(\frac{1}{2\pi|D|}\right)^{n_1/2}.$$

Koska mitatun suureen arvo on kiinteä ja siten $\alpha(t_1)$ on kiinteä luku, ei tällä kertoimella ole posterioritiheyden muodon kannalta merkitystä.

Kirjoitetaan posterioritiheyden eksponentissa esiintyvä neliömuoto t_0:n suhteen normaalimuotoon. Järjestellään aluksi termit t_0:n asteen mukaan, jolloin

$$\begin{aligned}
&(t_0-\overline{x}_0)^T C_0^{-1}(t_0-\overline{x}_0) + (t_1-At_0)^T D^{-1}(t_1-At_0) \\
&= t_0^T(C_0^{-1} + A^T D^{-1} A)t_0 \\
&\quad - \big(t_0^T(C_0^{-1}\overline{x}_0 + A^T D^{-1} t_1) + (\overline{x}_0^T C_0^{-1} + t_1^T D^{-1} A)t_0\big) \\
&\quad + \overline{x}_0^T C_0^{-1}\overline{x}_0 + t_1^T D^{-1} t_1.
\end{aligned}$$

Määritellään matriisi Q kaavalla

$$Q = C_0^{-1} + A^T D^{-1} A.$$

Todetaan, että matriisi Q on positiividefiniitti, sillä

$$t^T Q t = t^T C_0^{-1} t + (At)^T D^{-1}(At) \geq t^T C_0^{-1} t > 0,$$

kun $t \neq 0$. Siis Q on kääntyvä, ja voidaan määritellä vektori $\bar{t}_0$ kaavalla

$$\bar{t}_0 = \bar{t}_0(t_1) = Q^{-1}(C_0^{-1}\bar{x}_0 + A^T D^{-1} t_1).$$

Näillä merkinnöillä eksponentissa esiintyvä polynomi on muotoa

$$t_0^T Q t_0 - (t_0^T Q \bar{t}_0 + \bar{t}_0^T Q t_0) + \bar{x}_0^T C_0^{-1} \bar{x}_0 + t_1^T D^{-1} t_1$$

$$= (t_0 - \bar{t}_0)^T Q (t_0 - \bar{t}_0) + \bar{x}_0^T C_0^{-1} \bar{x}_0 + t_1^T D^{-1} t_1 - \bar{t}_0^T Q \bar{t}_0.$$

Siis posterioritiheys on muotoa

$$\rho(t_0 | t_1) = \beta(t_1) e^{-\frac{1}{2}(t_0 - \bar{t}_0)^T Q (t_0 - \bar{t}_0)},$$

missä $\beta(t_1)$ on epäoleellinen normitusvakio,

$$\beta(t_1) = \alpha(t_1) e^{-\frac{1}{2}(\bar{x}_0^T C_0^{-1} \bar{x}_0 + t_1^T D^{-1} t_1 - \bar{t}_0^T Q \bar{t}_0)}.$$

Tästä esityksestä nähdään, että Gaussisessa lineaarisessa tapauksessa posteriorijakauma on myös Gaussinen jakauma, jonka kovarianssimatriisi on

$$C = Q^{-1} = (C_0^{-1} + A^T D^{-1} A)^{-1},$$

ja keskipiste on

$$\bar{t}_0 = Q^{-1}(C_0^{-1}\bar{x}_0 + A^T D^{-1} t_1).$$

Tämä keskipiste on siis kaikkein todennäköisin arvo satunnaismuuttujalle x_0 ehdolla $x_1 = t_1$. Sitä sanotaankin *suurimman uskottavuuden estimaattoriksi (engl. maximum likelihood estimator).*

Johdetaan seuraavaksi vaihtoehtoinen esitysmuoto posteriorikovarianssille. Aloitetaan yksinkertaisesta aputuloksesta.

Lemma 3.1 *Olkoon B mielivaltainen matriisi. Tällöin pätee identiteetti*

$$(1 + BB^T)^{-1} = 1 - B(1 + B^T B)^{-1} B^T. \tag{5}$$

Todistus: Todetaan ensin, että väitteessä esiintyvät käänteismatriisit ovat olemassa, sillä

$$t^T (1 + BB^T) t = \|t\|^2 + \|B^T t\|^2 > 0$$

kaikilla t, $t \neq 0$, joten $(1 + BB^T)$ on positiividefiniitti. Samoin nähdään, että $(1 + B^T B)$ on positiividefiniitti. Lasketaan matriisitulo

$$(1 + BB^T)(1 - B(1 + B^T B)^{-1} B^T)$$
$$= 1 - B(1 + B^T B)^{-1} B^T + BB^T - B(B^T B)(1 + B^T B)^{-1} B^T.$$

Koska

$$\begin{aligned} B(B^TB)(1+B^TB)^{-1}B^T &= B((1+B^TB)-1)(1+B^TB)^{-1}B^T \\ &= BB^T - B(1+B^TB)^{-1}B, \end{aligned}$$

niin

$$(1+BB^T)(1-B(1+B^TB)^{-1}B^T) = 1.$$

Vastaavasti osoitetaan, että

$$(1-B(1+B^TB)^{-1}B^T)(1+BB^T) = 1,$$

joten väite on todistettu. □

Seuraavan lauseen todistuksessa käytetään merkintää $C^{1/2}$, kun C on symmetrinen positiividefiniitti matriisi. Tämä määritellään singulaariarvohajotelman avulla seuraavasti: Jos

$$C = UDU^T, \quad D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \ldots, d_n),$$

niin

$$C^{1/2} = UD^{1/2}U^T, \quad D^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \ldots, \sqrt{d_n}).$$

Vastaavasti matriisilla $C^{-1/2}$ tarkoitetaan matriisia $(C^{-1})^{1/2}$.

Lause 3.3 *Posteriorikovarianssimatriisi C voidaan esittää muodossa*

$$C = Q^{-1} = C_0 - C_0A^T(AC_0A^T + D)^{-1}AC_0.$$

Todistus: Sovelletaan edellistä aputulosta matriisiin

$$B = C_0^{1/2}A^TD^{-1/2}.$$

Yhtälön (5) vasen puoli on tällöin

$$\begin{aligned} (1+BB^T)^{-1} &= (1+C_0^{1/2}A^TD^{-1}AC_0^{1/2})^{-1} \\ &= C_0^{-1/2}(C_0^{-1} + A^TD^{-1}A)^{-1}C_0^{-1/2}. \end{aligned}$$

Oikealla puolella esiintyvä matriisitulo on puolestaan

$$\begin{aligned} &B(1+B^TB)^{-1}B^T \\ &= C_0^{1/2}A^TD^{-1/2}(1+D^{-1/2}AC_0A^TD^{-1/2})^{-1}D^{-1/2}AC_0^{1/2} \\ &= C_0^{1/2}A^T(D+AC_0A^T)^{-1}AC_0^{1/2}. \end{aligned}$$

Siis

$$\begin{aligned}
(C_0^{-1} + A^T D^{-1} A)^{-1} &= C_0^{1/2}(1 + BB^T)^{-1} C_0^{1/2} \\
&= C_0 - C_0^{1/2} B (1 + B^T B)^{-1} B^T C_0^{1/2} \\
&= C_0 - C_0 A^T (D + A C_0 A^T)^{-1} A C_0,
\end{aligned}$$

kuten väitettiin. □

Lemman antama esitys on valaiseva seraavassa mielessä: Kaikilla $x \in \mathbb{R}^{n_0}$ pätee arvio

$$\begin{aligned}
x^T C x &= x^T C_0 x - x^T C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} A C_0 x \\
&\leq x^T C_0 x,
\end{aligned}$$

mikä yleensä ilmaistaan lyhyemmin sanomalla

$$0 \leq C \leq C_0.$$

Konkreettinen tulkinta tälle on se, että posterioritiheyden määräämä Gaussinen jakauma on kapeampi kuin prioritiheyttä vastaava. Siten saadaan matemaattinen formulointi selvältä tuntuvalle asialle, että lisäinformaatio ei koskaan lisää epävarmuutta estimoitavasta suureesta.

Myös posterioritiheyden keskipisteen lauseketta voidaan muokata edelleen. Sijoittamalla edellä saatu Q^{-1}:n lauseke $\overline{t}_0$:n kaavaan saadaan

$$\begin{aligned}
\overline{t}_0 &= (C_0 - C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} A C_0)(C_0^{-1} \overline{x}_0 + A^T D^{-1} t_1) \\
&= \overline{x}_0 - C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} A \overline{x}_0 \\
&\quad + (C_0 A^T D^{-1} - C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} A C_0 A^T D^{-1}) t_1.
\end{aligned}$$

Käyttämällä identiteettiä

$$\begin{aligned}
(A C_0 A^T + D)^{-1} A C_0 A^T &= (A C_0 A^T + D)^{-1}((A C_0 A^T + D) - D) \\
&= 1 - (A C_0 A^T + D)^{-1} D
\end{aligned}$$

päästään muotoon

$$\overline{t}_0 = \overline{x}_0 - C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} A \overline{x}_0 + C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} t_1.$$

Erityisesti jos prioritiheys on nollakeskinen eli $\overline{x}_0 = 0$, saadaan yksinkertainen kaava

$$\overline{t}_0 = C_0 A^T (A C_0 A^T + D)^{-1} t_1.$$

Tästä kaavasta nähdään yhteys ensimmäisessä luvussa esitettyyn Tihonovin regularisaatioon. Oletetaan, että priorikovarianssi ja kohinan kovarianssi ovat verrannollisia yksikkömatriisiin,

$$C_0 = \alpha \mathbf{1}_{n_0}, \quad D = \delta \mathbf{1}_{n_1}.$$

Tällöin estimaattori $\overline{t}_0$ saa muodon

$$\overline{t}_0 = \alpha A^T (\alpha A A^T + \delta \mathbf{1}_{n_0})^{-1} t_1 = (AA^T + \varepsilon \mathbf{1}_{n_0})^{-1} A^T t_1,$$

missä suuretta $\varepsilon = \delta/\alpha$ voidaan pitää jonkinlaisena kohina–signaalisuhteena. Edellä käytettiin identiteettiä

$$A^T (AA^T + \varepsilon \mathbf{1}_{n_0})^{-1} = (AA^T + \varepsilon \mathbf{1}_{n_0})^{-1} A^T,$$

joka todistetaan esimerkiksi A:n singulaariarvohajotelmaa käyttäen.

Saatu kaava antaa juuri Tihonovin regularisointimenetelmällä lasketun pseudoinverssin, ja tuloksen johto antaa tilastollisen tulkinnan regularisaatioparametrin valinnalle.

Harjoitustehtäviä:

1. Osoita, että Gaussisen tiheysfunktion integraali yli $\mathbb{R}^n$:n on yksi.

2. Laske Gaussisen tiheysfunktion Fourier–muunnos.

3. Tarkastellaan Gaussista tiheysfunktiota $\mathbb{R}$:ssä,

   $$\rho_\sigma(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} t^2}.$$

   Osoita, että kun $\sigma \to 0$, niin tiheysfunktio lähestyy Diracin deltaa, eli

   $$\lim_{\sigma \to 0} \int \rho_\sigma(t) \varphi(t) dt = \varphi(0),$$

   missä φ on nopeasti vähenevä testifunktio.

4. Olkoot C ja D symmetrisiä positiividefiniittejä matriiseja, joille pätee

   $$0 < C < D.$$

   Osoita, että tällöin

   $$0 < D^{-1} < C^{-1}.$$

   (Vihje: Osoita ensin: Jos $0 < C < 1$, niin $C^{-1} > 1$. Kirjoita $C = C^{1/2} C^{1/2}$ ja $D = D^{1/2} D^{1/2}$.)

3.4 Sovellus: Lähteen inversio–ongelma

Esimerkkinä Bayesin kaavan käytöstä tarkastellaan epälineaarista ongelmaa, joka on eräänlainen vahvasti idealisoitu versio EEG–mittauksen tulkinnasta. Oletetaan, että kappaleen sisällä on sähköinen virtalähde, joka halutaan identifioida mittaamalla lähteen aiheuttama jännitejakauma kappaleen pinnalla. EEG–mittauksessa lähteenä toimii aivot, ja mittaus tehdään elektrodeilla päänahan pinnalla. Idealisoidussa esimerkissämme yksinkertaistetetaan oletuksia rajusti: Oletetaan ensiksikin, että kappale tiedetään johtavuudeltaan homogeeniseksi. Lisäksi oletetaan, että virtalähde tiedetään dipoliksi, jonka voimakkuus on tunnettu. Lopuksi laskennallisista syistä rajoitutaan tasoalueeseen, ja valitaan kappaleeksi yksikkökiekko.

Olkoon siis kappale

$$D = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid |x| < 1\}.$$

Merkitään suorassa ongelmassa esiintyvää sähkönjohtavuutta σ:lla, $\sigma(x) > 0$, kun $x \in D$. Olkoon u sähköinen potentiaali D:ssä, ja merkitään $\vec{J}$:llä sähköisen virtalähteen virrantiheyttä D:ssä. Tällöin potentiaalia ja virrantiheyttä sitoo yhteen jatkuvuusyhtälö

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla u) = \nabla \cdot \vec{J}.$$

Yhtälön vasen puoli kuvaa Ohmisten virtojen nieluja ($-\nabla u = \vec{E} =$ indusoitunut sähkökenttä); Oikea puoli puolestaan kuvaa lähdevirran lähteitä. Yhtälö sanoo siis, että lähdevirran lähteet ovat Ohmisen virran nieluja ja päinvastoin.

Kappaletta ympäröivä aine, esimerkiksi ilma, oletetaan sähköä johtamattomaksi. Siten sähköä ei virtaa ulos kappaleesta, mikä antaa reunaehdoksi Neumannin ehdon

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\partial D} = 0.$$

Jatkuvuusyhtälö ja Neumannin reunaehto koskevat vain funktion u derivaattoja, ja siten mikä tahansa vakio voidaan lisätä u:hun. Jotta potentiaali tulisi yksikäsitteisesti kiinnitetyksi, vaaditaan vielä, että

$$\int_{\partial D} u(x) dS(x) = 0.$$

Jatkossa siis oletetaan että $\sigma(x) = 1$, ja että $\vec{J}(x) = \delta(x - x_0)\vec{\alpha}$, missä $\delta(x - x_0)$ on pisteeseen $x_0 \in D$ asetettu Diracin deltadistribuutio ja $\vec{\alpha}$ on yksikkövektori, jonka suunta määrää virtadipolin suunnan. Jatkuvuusyhtälö yksinkertaistuu muotoon

$$\Delta u = \nabla \cdot (\delta(x - x_0)\vec{\alpha}), \tag{6}$$

ja reunaehto muotoon

$$\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\partial D} = 0. \tag{7}$$

Tarkoituksena on hakea eksplisiittinen ratkaisu reuna–arvo–ongelmalle (6)–(7). Olkoon

$$g_0(x-y) = \frac{1}{2\pi}\log|x-y|.$$

Funktio g_0 on tunnetusti tason $\mathbb{R}^2$ Laplace–operaattorin Greenin funktio, eli pätee

$$\Delta_x g_0(x-y) = \delta(x-y).$$

Olkoon $y \in D$. Määritellään pisteen y peilipiste y^* kiekon ulkopuolella kaavalla

$$y^* = \frac{y}{|y|^2}.$$

Peilipistettä käyttäen määritellään nyt funktio g_N asettamalla

$$g_N(x,y) = g_0(x-y) + g_0(x-y^*), \quad x \in D.$$

Todistetaan seuraava aputulos koskien funktiota g_N.

Lemma 3.2 *Funktiolla g_N on seuraavat ominaisuudet:*

$$\Delta_x g_N(x,y)|_{x\in D} = \delta(x-y), \tag{8}$$

ja

$$\frac{\partial g_N}{\partial n(x)}(x,y)\Big|_{x\in\partial D} = \frac{1}{2\pi}. \tag{9}$$

Edellä esiintyvä ominaisuus (8) tarkoittaa tarkalleen sanottuna seuraavaa. jos $\varphi \in C^\infty$ ja supp$\varphi \subset D$, niin

$$\int \Delta\varphi(x) g_N(x,y)dx = \varphi(y).$$

Funktiota g_N sanotaan Laplace–operaattorin *Neumannin Greenin funktioksi* kiekossa D.

Lemman todistus: Ominaisuus (8) seuraa suoraan siitä, että funktiolla $g_0(x-y)$ on mainittu ominaisuus, ja koska $y^* \notin D$, niin $g_0(x-y^*)$ on harmoninen D:ssä.

Ominaisuuden (9) todistamiseksi lasketaan aluksi g_N:n gradientti. Suora lasku antaa

$$\nabla_x g_N(x,y) = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{x-y}{|x-y|^2} + \frac{x-y^*}{|x-y^*|^2}\right), \quad x \in D.$$

Viedään nyt x kiekon reunalle. Koska D oletettiin yksikkökiekoksi, niin tällöin pisteeseen x kuuluva yksikkönormaali $\vec{n}(x)$ yhtyy x:ään:

$$\frac{\partial g_N}{\partial n(x)}(x,y)\Big|_{x\in\partial D} = x \cdot \nabla_x g_N(x,y)|_{x\in\partial D}.$$

Mutta kun $|x| = 1$, on

$$\frac{x \cdot (x-y)}{|x-y|^2} = \frac{1 - x \cdot y}{1 - 2x \cdot y + |y|^2},$$

ja y^*:n määritelmän nojalla

$$\frac{x \cdot (x-y^*)}{|x-y^*|^2} = \frac{1 - \frac{x \cdot y}{|y|^2}}{1 - 2\frac{x \cdot y}{|y|^2} + \frac{1}{|y|^2}} = \frac{|y|^2 - x \cdot y}{1 - 2x \cdot y + |y|^2},$$

joten

$$\frac{\partial g_N}{\partial n(x)}(x,y)\Big|_{x \in \partial D} = \frac{1}{2\pi} \frac{1 - x \cdot y + |y|^2 - x \cdot y}{1 - 2x \cdot y + |y|^2} = \frac{1}{2\pi},$$

kuten väitettiin. □

Oletetaan, että u on reuna–arvo–ongelman (6)– (7) ratkaisu. Sovelletaan Greenin kaavaa funktioihin g_N ja u. Greenin kaavan mukaan pätee

$$\begin{aligned} \int_D (g_N(x,y)\Delta u(x) \quad &- \quad u(x)\Delta_x g_N(x,y))dx \\ &= \int_{\partial D} \left(g_N(x,y)\frac{\partial u}{\partial n}(x) - u(x)\frac{\partial g_N}{\partial n(x)}(x,y) \right) dS(x). \end{aligned}$$

Mutta u:n ja g_N:n toteuttamista differentiaaliyhtälöistä seuraa, että

$$\begin{aligned} &\int_D (g_N(x,y)\Delta u(x) - u(x)\Delta_x g_N(x,y))dx \\ &\quad = \int_D (g_N(x,y)(\nabla_x \cdot (\vec{\alpha}\delta(x-x_0))) - u(x)\delta(x-y))dx \\ &\quad = -(\vec{\alpha} \cdot \nabla_x g_N)(x_0,y) - u(y), \end{aligned}$$

kun taas reunaehdoista seuraa, että Greenin kaavan oikea puoli antaa

$$\int_{\partial D} \left(g_N(x,y)\frac{\partial u}{\partial n}(x) - u(x)\frac{\partial g_N}{\partial n(x)}(x,y) \right) dS(x) = -\frac{1}{2\pi}\int_{\partial D} u(x)dS(x) = 0.$$

Siis u:lle on löydetty lauseke

$$u(y) = -(\vec{\alpha} \cdot \nabla_x g_N)(x_0,y) = -\frac{1}{2\pi}\left(\frac{\vec{\alpha} \cdot (x_0 - y)}{|x_0 - y|^2} + \frac{\vec{\alpha} \cdot (x_0 - y^*)}{|x_0 - y^*|^2} \right).$$

Mittausdata kerätään kiekon D reunalla, joten viedään y reunalle. Tällöin luonnollisesti $y^* \to y$, ja u reunalla saa yksinkertaisen muodon

$$u(y)|_{\partial D} = -\frac{1}{\pi}\frac{\vec{\alpha} \cdot (x_0 - y)}{|x_0 - y|^2}. \tag{10}$$

Parametrisoidaan nyt virtadipolin paikka tason napakoordinaateilla r ja θ, $0 \leq r < 1$, $0 \leq \theta < 2\pi$, kirjoittamalla

$$x_0 = (r\cos\theta, r\sin\theta).$$

Vastaavasti parametrisoidaan virtadipolin suunta parametrilla φ, $0 \leq \varphi < 2\pi$, missä

$$\vec{\alpha} = (\cos\varphi, \sin\varphi).$$

Kirjoitetaan parametrisointi eksplisiittisesti näkyviin merkitsemällä

$$u(y)|_{\partial D} = u(y; r, \theta, \varphi), \quad y \in \partial D.$$

Oletetaan, että potentiaali on mitattu N:ssä reunapisteessä $y_i \in \partial D$, $1 \leq i \leq N$, ja mittausvirhe on additiivista kohinaa. Mikäli lähdedipolin todellinen sijainti ja suunta on annettu parametreilla r_0, θ_0 ja φ_0, niin todelliset mittausarvot ovat kirjoitettavissa muotoon

$$m_i = u(y_i; r_0, \theta_0, \varphi_0) + \eta_i, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Inversio–ongelmana on estimoida parametrien

$$(r, \theta, \varphi) \in [0, 1[\times[0, 2\pi[\times[0, 2\pi[$$

posteriorijakaumaa näiden mittausten pohjalta.

Oletetaan, että kohina on Gaussista, ja että

$$\mathrm{E}\eta_i = 0, \quad \mathrm{E}\eta_i\eta_j = \sigma^2\delta_{i,j}.$$

Edelleen oletetaan, että estimoitavista parameteriesta ei ole mitään priori–informaatiota. Tämä voidaan ilmaista siten, että valitaan

$$\rho_{\mathrm{pr}}(r, \theta, \varphi) = \text{vakio},$$

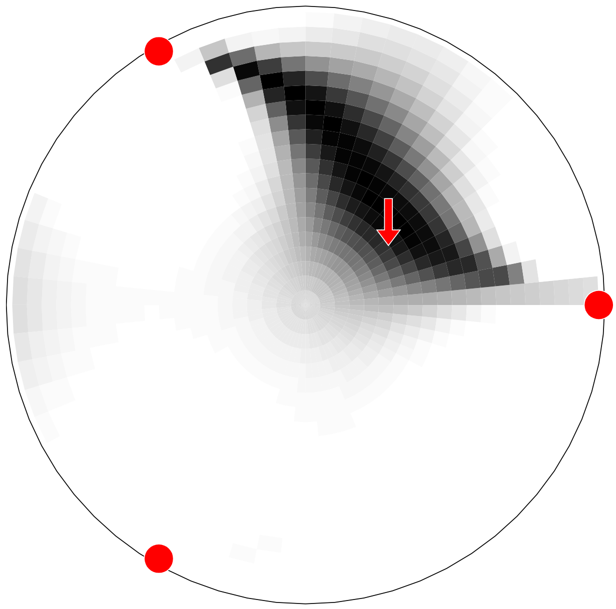
s.o. jokainen arvo on *a prioiri* yhtä todennäköinen. Sovelletaan nyt Bayesin kaavaa. Posterioiritiheys on siis muotoa

$$\rho(r, \theta, \varphi \mid m) \sim e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(m_i - u(y_i; r, \theta, \varphi))^2},$$

missä merkintä $\sim$ tarkoittaa, että funktiot ovat normitusvakiota vaille samat, ja $u(y_i; r, \theta, \varphi)$ lasketaan kaavasta (10).

Oletetaan, että olemme kiinnostuneita vain dipolin sijainnista. Tutkitaan, miten suuri merkitys tällöin on sillä, tunnetaanko dipolin suunta vai ei. Oletetaan aluksi, että dipolin suunta $\varphi = \varphi_0$ on tunnettu. Tällöin voidaan sijoittaa posterioritiheyteen tunnettu suuntaparametri. Dipolin paikkajakauman määrää nyt tiheys

$$\rho(r, \theta \mid \varphi_0, m) \sim \rho(r, \theta, \varphi_0 \mid m) \sim e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(m_i - u(y_i; r, \theta, \varphi_0))^2}.$$



Kuva 1. Dipolin paikan posteriorijakauma, kun dipolin suunta on oletettu tunnetuksi.

Vertailun vuoksi tarkastellaan tapausta, jossa dipolin suunnasta ei ole mitään tietoa. Tällöin siis mikä tahansa φ:n arvo on yhtä todennäköinen. Voidaan laskea parametrien r ja θ marginaalitiheys, joka määritellään kaavalla

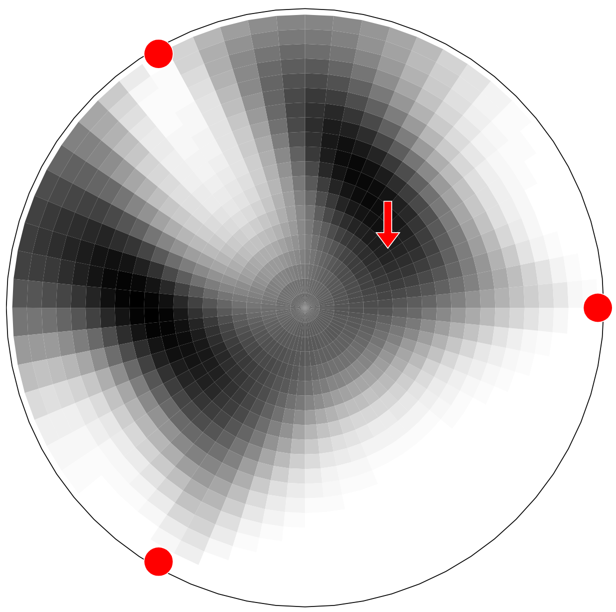
$$\rho(r, \theta \mid m) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(r, \theta, \varphi \mid m) d\varphi.$$

Tämä tiheys vastaa siis kysymykseen, mikä on r:n ja θ:n tiheusjakauma, kun φ saa olla mikä hyvänsä, ja mittaustulos on annettu.

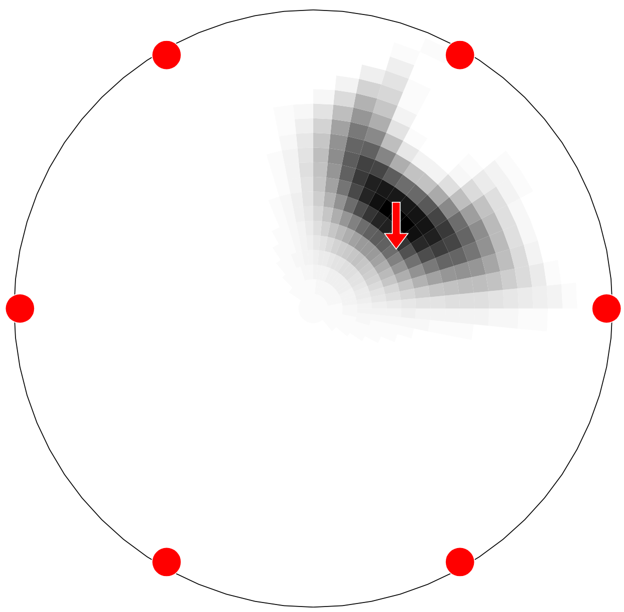
Kuva 1 esittää tiheyttä $\rho(r, \theta \mid \varphi_0, m)$, kun reunalla ∂D on tehty kolme mittausta. Mittauspisteet on merkitty kuvaan täplinä. Todellinen dipoli, jota käyttäen itse data on generoitu, on merkitty kuvaan nuolella. Tässä laskussa virheen varianssiksi oletettiin $\sigma^2 = 0.1$, mutta itse mittausdata laskettiin ilman satunnaisvirhettä.

Kuvassa 2 on vastaavin oletuksin laskettu marginaalitiheys $\rho(r, \theta \mid m)$ jossa siis tuntematon dipolin suunta on integroitu pois. Nähdään, että dipolin sunnan tuntemisella on merkittävä vaikutus estimaatin luotettavuuteen.

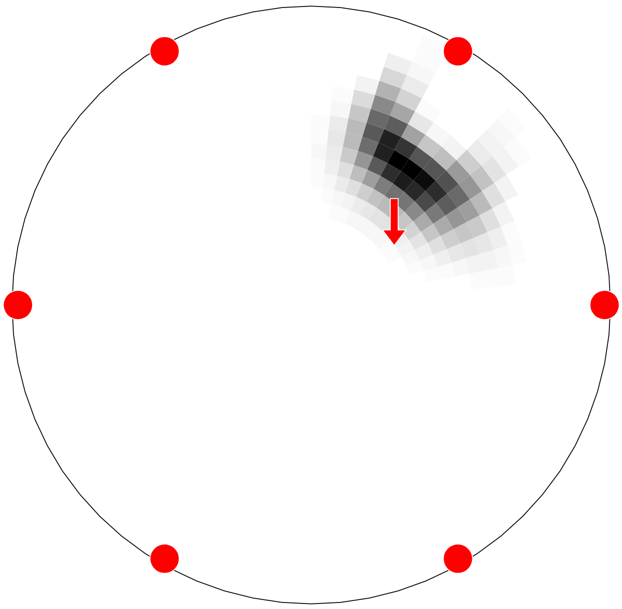
Kuvassa 3 on kuvaa 2 vastaava marginaalijakauma, kun mittauspisteitä on kaksinkertainen määrä. Kuvan 4 jakauma poikkeaa kuvan 3 jakaumasta siinä, että laskettuun dataan on lisätty Gaussista satunnaisvirhettä varianssilla $\sigma^2 = 0.1$.



Kuva 2. Dipolin paikan posteriorijakauma, kun dipolin suunta on tuntematon. Tuntematon suunta on integroitu jakaumasta pois, joten kyseessä on dipolin paikan marginaalijakauma.



Kuva 3. Kuvan 2 vastine, kun mittauspisteitä on kaksi kertaa enemmän.



Kuva 4. Kuvan 3 tilannetta vastaava marginaalijakauma, kun laskettuun mittausdataan on lisätty keinotekoista Gaussista virhettä.

Harjoitustehtäviä:

1. Määritellään funktio $g_D(x,y)$ kaavalla

$$g_D(x,y) = g_0(x-y) - g_0(x-y*), \quad x, y \in D.$$

Osoita, että g_D on kiekon D *Dirichlet'n Greenin funktio*, s.o. g_D toteuttaa yhtälön

$$\Delta_x g_D(x-y)|_{x\in D} = \delta(x-y),$$

ja reunaehdon

$$g_D(x,y)|_{x\in\partial D} = 0.$$

Kirjoita kiekon D Dirichlet'n ongelman

$$\Delta u = f, \quad u|_{\partial D} = 0$$

ratkaisu g_D:n avulla.