ČESKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra matematiky

Stochastický model okraje plazmatu v tokamaku a jeho odhadování

Stochastic model of plasma boundary of a tokamak and its estimation

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Posluchač: Bc. Vít Škvára
Školitel: Doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D.
Rok: 2016

Sem patří zadání DP - jednou originál, zbytek kopie.

Čestné prohlášení

Prohlašuji na tomto místě, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

V Praze dne 6. května 2016 .....

Vít Škvára

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval svému školiteli, Doc. Ing. Václavu Šmídlovi, PhD., za jeho postřehy a vedení a svému konzultantovi, Ing. Jakubu Urbanovi, PhD., za jeho technickou pomoc při řešení problému, kterým se tato práce zabývá.

Dále bych chtěl poděkovat své rodině za podporu během mého dosavadního studia a při psaní této práce.

Název práce:
Stochastický model okraje plazmatu v tokamaku a jeho odhadování
Autor: Vít Škvára
Obor: Matematické inženýrství
Zaměření: Aplikované matematicko-stochastické metody
Druh práce: Diplomová práce
Vedoucí práce: Doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D., UTIA
Konzultant: Ing. Jakub Urban, Ph.D., ÚFP AV ČR
Abstrakt: Práce se zabývá rekonstrukcí okraje plazmatu v tokamaku. Je zde představen variačně bayesovský aparát, vedoucí k sestavení modelu, regularizujícího řešení problému lineární regrese. Ta je v kontextu rekonstrukce plazmatu použita k sestavení reprezentace magnetického toku pomocí dekompozice do toroidálních harmonik. V práci je představena numerická metoda, ukazující kompletní postup převedení znalosti měření z provozu tokamaku do rekonstrukce jeho okraje. Vyvinutý postup je validován proti konkurenčním metodám při použití dat, naměřených na tokamaku COMPASS.

Klíčová slova: tokamak, rekonstrukce plazmatu, variační Bayes, regularizace, COMPASS, toroidální harmoniky

Title:
Stochastic model of plasma boundary of a tokamak and its estimation
Author: Vít Škvára
Abstract: This thesis deals with plasma boundary reconstruction in a tokamak. Variational Bayes methods are used to describe and design a regularized linear regression model, which is used for construction of decomposition of magnetic flux in the tokamak into toroidal harmonics. A numerical method is presented that translates knowledge of direct plasma measurements into knowledge of the shape of plasma. The described approach is then validated against an existing method using data measured on COMPASS tokamak.

Key words: tokamak, plasma reconstruction, variational Bayes, regularization, COMPASS, toroidal harmonics

Obsah

Úvod **9**

1 Tokamak COMPASS **11**
1.1 Popis tokamaku 11
1.2 Rekonstrukce plazmatu 12
1.3 Data z tokamaku COMPASS a rekonstrukce pomocí EFIT 14

2 Rekonstrukce plazmatu toroidálními harmonikami **17**
2.1 Dekompozice magnetického toku ψ pomocí toroidálních harmonik 17
2.1.1 Analytický popis problému 17
2.1.2 Numerická metoda 18
2.2 Hledání ekvipotenciály v plazmatu 21
2.2.1 Hledání x-bodu 21
2.2.2 Gradientní sestup 21
2.2.3 Newtonova metoda hledání x-bodu 23
2.2.4 Newtonova metoda hledání ekvipotenciály 24

3 Regularizace a variační Bayes **27**
3.1 VB metoda 28
3.2 Aplikace VB metody 31
3.3 Skalární dekompozice pomocí VB metody 31
3.4 Variační Bayes a lineární regrese 33
3.4.1 Volba VB modelu 33
3.4.2 Odvození aposteriorních rozdělení parametrů modelu 34
3.4.3 Spodní odhad věrohodnosti modelu $L(\hat{p})$ 35
3.4.4 IVB algoritmus pro lineární regresi 37

4 Výsledky **39**
4.1 Srovnání VB a OLS, časový vývoj VB odhadu 40
4.2 Výběr optimálního VB modelu 42

Závěr **47**

A Použitá rozdělení pravděpodobnosti a speciální funkce **51**
A.1 Gaussovo n-rozměrné rozdělení 51
A.2 Gamma rozdělení 51
A.3 Speciální funkce 52
A.4 Přidružené Legendrovy funkce $P_\nu^\mu(x), Q_\nu^\mu(x)$ 53

A.5 Bipolární souřadnice 54

Úvod

Ovládnutí termojaderné reakce je velkým příslibem pro energetickou budoucnost lidstva. Nejpokročilejším zařízením pro výzkum termojaderné reakce v plazmatu je tokamak. Znalost tvaru sloupce plazmatu během výboje je pro jeho kontrolu nezbytná. S problémem rekonstrukce vlastností plazmatu jsou spjaty parciální diferenciální rovnice, jejichž řešení lze vyjádřit dekompozicí magnetického toku pomocí toroidálních harmonik. Tato práce se zabývá právě tímto způsobem modelování plazmatu a jeho okraje. Během jeho optimalizace je použita pokročilá technika odhadu stavového modelu, postavená na variačně bayesovských principech.

Cílem této práce je prozkoumat existující přístup k této problematice, popsaný v [7]. K tomu je třeba nejprve porozumět fungování tokamaku a specifikům tokamaku COMPASS, na němž je zkoumaná metoda testována. Posléze je třeba navrhnout stavový model, popisující chování plazmatu během výstřelu, a metodu jeho odhadu. Posledním úkolem je srovnání vlastních výsledků s výsledky konkurenčních postupů rekonstrukce plazmatu.

V první kapitole je stručně představen princip fungování tokamaku. Podrobněji jsou popsány parametry tokamaku COMPASS. Dále je uveden fyzikální popis chování plazmatu během výstřelu a příslušné rovnice, jejichž řešení popisuje jeho elektromagnetické charakteristiky. Zmíněno je několik různých přístupů k rekonstrukci plazmatu. Na konci první kapitoly jsou představena data, naměřená na tokamaku COMPASS, a výsledky rekonstrukce pomocí kódu EFIT, který v dalších částech slouží k validaci výsledků.

Ve druhé kapitole je podrobně popsána metoda rekonstrukce plazmatu pomocí řady toroidálních harmonik. Nejprve je uvedeno analytické řešení udávající prostorové rozložení magnetického toku ψ. Dále je rozebrána numerická metoda, která toto řešení aproximuje posloupností konečné délky pomocí údajů, naměřených na magnetických sondách v okolí komory tokamaku. Ve druhé části kapitoly je ukázáno, jak se znalostí magnetického toku nalézt okraj plazmatu. Zvláštní důraz je kladený na metodu hledání x-bodu. Ta byla oproti původnímu algoritmu upravena pro potřeby použití na COMPASSu. Ukázány jsou výsledky upravené metody identifikace okraje, srovnané s původní implementací a s výsledky získanými pomocí EFIT.

Součástí numerické metody je výpočet koeficientů rozvoje metodou nejmenších čtverců. Ve druhé kapitole je naznačena nutnost získané řešení regularizovat. Proto se třetí kapitola zabývá regularizační technikou odhadu, která je založena na variačně bayesovských principech, a která má nahradit metodu nejmenších čtverců. Nejprve je nastíněn princip variačně bayesovského přístupu k modelování směsí neznámých rozdělení pravděpodobnosti. Je uvedena hlavní věta VB metody, dávající návod k její aplikaci. Stručně je popsáno praktické použití této metody a je uveden jednorozměrný příklad, ilustrující dříve popsané postupy. Podle popsaných principů a tvaru zvoleného regresního modelu jsou odvozeny předpisy pro iterační algoritmus, hledající řešení lineárního problému z druhé kapitoly. Na konci třetí kapitoly jsou ukázány některé výsledky aplikace VB metody na datech z tokamaku COMPASS.

V poslední kapitole jsou ukázány výsledky kompletního kódu, složeného z části z původní metody a z části z postupů popsaných v kapitolách 2 a 3, získané jeho aplikací na data z tokamaku COMPASS. Srovnání výsledků rekonstrukce je provedeno oproti původní implementaci a oproti výsledkům EFIT. Z několika různých nastavení kódu je vybráno jedno, nejvíce se blížící výsledkům EFIT. Ve stručnosti je rozebrán časový vývoj VB modelu a je ukázáno, jak je možné využít jeho pomalé změny k optimalizaci výpočtu.

Kapitola 1

Tokamak COMPASS

V této kapitole se nejdříve seznámíme s principem fungování tokamaku a se specifiky zařízení COMPASS. Poté bude rozebrán problém měření a rekonstrukce vlastností plazmatu a fyzikální popis jeho chování. Budou zmíněny existující algoritmy rekonstruující plazma. Nakonec budou představeny výsledky rekonstrukce pomocí jednoho z nich na datech, naměřených na tokamaku COMPASS.

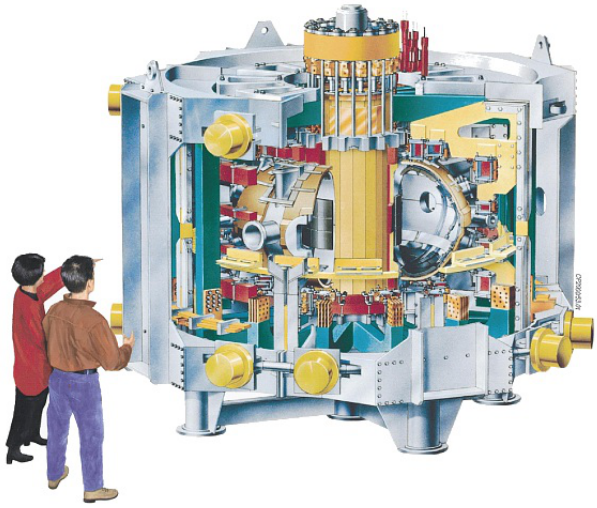
1.1 Popis tokamaku

Tokamak (TOroidalnaja KAmera i MAgnitnyjne Katuški - toroidální komora a magnetické cívky) je experimentální zařízení sloužící k tvorbě a kontrolování vysokoteplotního plazmatu pomocí magnetického pole. Hlavní termonukleární reakcí pro budoucí využití jako fúzní elektrárny je slučování deuteria a tricia, při němž vzniká helium a rychlý neutron, který je primárním nositelem výstupní energie. Pokud by se podařilo plazma v tokamaku efektivně udržet a tuto reakci kontrolovat, přebytečnou tepelnou energii by bylo možné využít k výrobě energie elektrické. Takovýto způsob získávání energie by byl vysoce účinný, ekologický a s prakticky nevyčerpatelnou zásobou paliva. Překážkou ke kontrolované termonukleární fúzi je podmínka vysoké teploty plazmatu a dostatečné doby udržení. Podle Lawsonova kritéria, které určuje podmínky pro samoudržitelnou termonukleární fúzi, je k překonání Coulombovské hranice (působení odpudivých elektromagnetických sil mezi částicemi) nutná teplota v řádu 10^8 K [12]. Protože přímý kontakt s jakýmkoliv jiným materiálem je při takovýchto teplotách vyloučen, v tokamaku se k udržení a tvarování sloupce plazmatu využívá silného magnetického pole.

Tokamak COMPASS (COMpact ASSembly, [17]) se nachází v Ústavu fyziky plazmatu AV ČR v Ládví. Původně byl spuštěn a provozován v anglickém Culhamu, kde sloužil anglické výzkumné agentuře UKAEA k výzkumu plazmatu. Parametry plazmatu v tokamaku COMPASS jsou v některých ohledech podobné těm v tokamaku ITER, nejambicióznějším projektu výzkumu termojaderné fúze. COMPASS je jedním z nejmenších tokamaků, schopných dosahovat H-módu[1] pouhým ohmickým ohřevem[2]. Je tedy vhodným kandidátem pro studium specifických jevů (ELM, pedestal, atd., viz [12], [16]), jež jsou důležité pro pochopení chování plazmatu a jeho udržení v rovnováze.

Komora tokamaku COMPASS má tvar toroidu, na průřezu ve tvaru písmena D. Primárním způsobem vytvoření plazmatu je ohmický ohřev. V tokamaku se nachází centrální

[1] Plazma ve vyšším energetickém stavu, kdy je snadnější dosáhnout samoudržitelného plazmatu.
[2] Ohřev plazmatu je způsoben elektrickým proudem, procházejícím ionizovaným plynem.



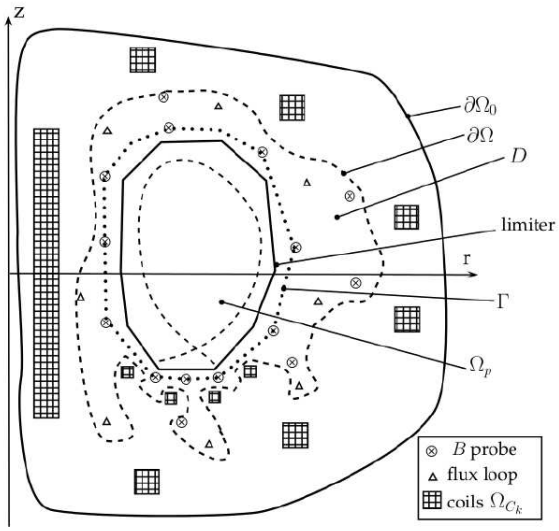
Obrázek 1.1.1: Průřez tokamakem COMPASS.

solenoid, napojený na primární vinutí. V komoře je pak rozptýlen slabě ionizovaný plyn, tvořící sekundární závit transformátoru. Při změně proudu v primárním vinutí se v plynu indukuje proud, což má za následek velmi rychlý ohřev plynu na teploty v řádu desítek milionů K a vznik plazmatu. Ohmický ohřev ale není dostatečný pro ohřev na teploty potřebné pro efektivní fúzní reakci. Je nutné použít další způsoby ohřevu, jako vstřikování proudu neutrálních částic (*neutral beam injection*, NBI) či ohřev pomocí mikrovln. Schematický průřez tokamakem COMPASS je na Obr. 1.1.1.

Základním stavem plazmatu je tzv. ekvilibrium, při jehož dosažení na plazma nepůsobí žádná síla. K dosažení ekvilibria v tokamaku je třeba vytvořit dodatečné vertikální magnetické pole pomocí vnějších, tzv. poloidálních cívek. K vytvoření určitého tvaru plazmatu, typicky elipsy nebo D-tvaru, a také vzhledem k nestabilitě plazmatu a nutnosti jeho udržení v dostatečné vzdálenosti od stěn komory (s ohledem na její erozi a na energetické ztráty) je nutné použití systému více poloidálních cívek, umístěných kolem tokamaku. Na tokamaku jsou také cívky toroidální, které ovšem zasahují do magnetické rovnováhy jen nepřímo. Názvy jsou dané směrem vytvářeného magnetického pole vzhledem ke geometrii komory. Toroidální cívky udržují plazma v oběhu v komoře tokamaku, poloidální pak slouží k jeho tvarování v poloidálním směru a udržování v dostatečné vzdálenosti od stěn. K stabilizaci plazmatu ve vertikálním směru slouží horizontální magnetické pole, tvořené proudy indukovanými v komoře a aktivními poloidálními cívkami.

1.2 Rekonstrukce plazmatu

Pro optimalizaci provozu tokamaku je nezbytné zavedení zpětnovazebného řízení tvarujících cívek v průběhu výstřelu. Zpětné řízení v tokamaku COMPASS v současnosti vychází ze základních údajů o výšce, šířce a poloze barycentra plazmatu [10]. Možnost v reálném čase dostatečně přesně rekonstruovat tvar okraje plazmatu by zlepšila robustnost kontrolního systému a rozšířila možnosti studia fyzikálních jevů, které závisí na tvaru plazmatu. K zjištění aktuálního stavu plazmatu je v okolí tokamaku umístěno množství cívek, měřících buď lokální magnetické pole B, nebo časovou změnu magnetického toku ψ. Na tokamaku COMPASS existuje poměrně velké množství magnetických diagnostik, pro rekonstrukci tvaru



Obrázek 1.2.1: Schéma průřezu tokamakem spolu s rozmístěním měřících a tvarujících cívek. *B probe* je označení cívky měřící velikost magnetického pole, *flux loop* je cívka měřící magnetický tok ψ a Ω_{C_k} je označení poloidální cívky tvarující plazma. Dále jsou naznačeny různé křivky, vztahující se k problému rekonstrukce plazmatu. *Limiter* je vnitřní povrch komory tokamaku. Množina označená Ω_p je samotné plazma, ohraničené čárkovanou hranicí. Ve spodní části se hranice kříží, toto místo se nazývá *x-bod*. Jeho sledování je důležité pro udržení stability plazmatu. Převzato z [7].

plazmatu se ale používá jen 16 Rogowského cívek měřících poloidální B a 4 sedlové cívky měřící ψ [25].

Kromě cívek, měřících B a ψ, jsou na tokamaku COMPASS instalovány další diagnostiky, umožňující přibližný odhad okraje plazmatu. Konkrétně se jedná o měření vlastností plazmatu Thomsonovým rozptylem laserového svazku [6] a svazkem lithiových iontů [2]. Použití těchto údajů k přibližnému určení okraje plazmatu je v principu možné, jejich nevýhodou je ale určení vzdálenosti plazmatu od okraje komory jen v jednom bodu.

Nyní bude popsán stručný postup rekonstrukce vlastností plazmatu během výstřelu. Budeme používat cylindrické souřadnice (r, ϕ, z). Díky symetrii plazmatu v toroidálním směru se můžeme omezit pouze na dvojici kartézských souřadnic (r, z). Při znalosti magnetického toku $\psi(r, z)$ můžeme určit Cauchyho okrajové podmínky na uzavřené křivce Γ (viz Obr. 1.2.1)

$$g = \psi, \tag{1.2.1}$$

$$h = \partial_n \psi, \tag{1.2.2}$$

kde ∂_n je hodnota parciální derivace ve směru normály Γ. Zadání okrajových podmínek je přitom netriviální z důvodu možné asymetrie křivky Γ, na které se nalézají měřící cívky, a z toho vyplývající nemožnosti prosté interpolace měření. Předpokládáme přitom, že křivka Γ se nachází v oblasti D (ohraničené vnitřní stranou komory a křivkou $\partial\Omega$), která neobsahuje ani poloidální cívky, ani plazma, a ve které tedy platí Gaussův zákon ve tvaru (viz např. [11])

$$-\Delta^* \psi = 0. \tag{1.2.3}$$

Diferenciální operátor Δ^* má tvar

$$\Delta^* = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{\mu_0 r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\mu_0 r}\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{1.2.4}$$

kde μ_0 je permeabilita vakua. Pro ostatní oblasti v tokamaku platí podobné vztahy, modifikované podle přítomnosti zdrojů proudu, ve tvaru

$$-\Delta^*\psi = j_p(\psi, r)\chi_{\Omega_p}, \text{ v } \Omega, \tag{1.2.5}$$

$$-\Delta^*\psi = j_p(\psi, r)\chi_{\Omega_p} + \sum_k j_{C_k}\chi_{\Omega_{C_k}}, \text{ v } \Omega_0, \tag{1.2.6}$$

kde j_p je proudová hustota v plazmatu, j_{C_k} je proudová hustota v k-té poloidální cívce Ω_{C_k} (kterou umíme měřit) a χ je indikátorová funkce.

Okrajové podmínky g, h jsou spolu se znalostí j_{C_k}, v dalším kroku použity pro vyřešení Grad-Schafranovovy rovnice [22],

$$\Delta^*\psi = -\mu_0 r^2 p'(\psi) - \mu_0^2 f f'(\psi) \tag{1.2.7}$$

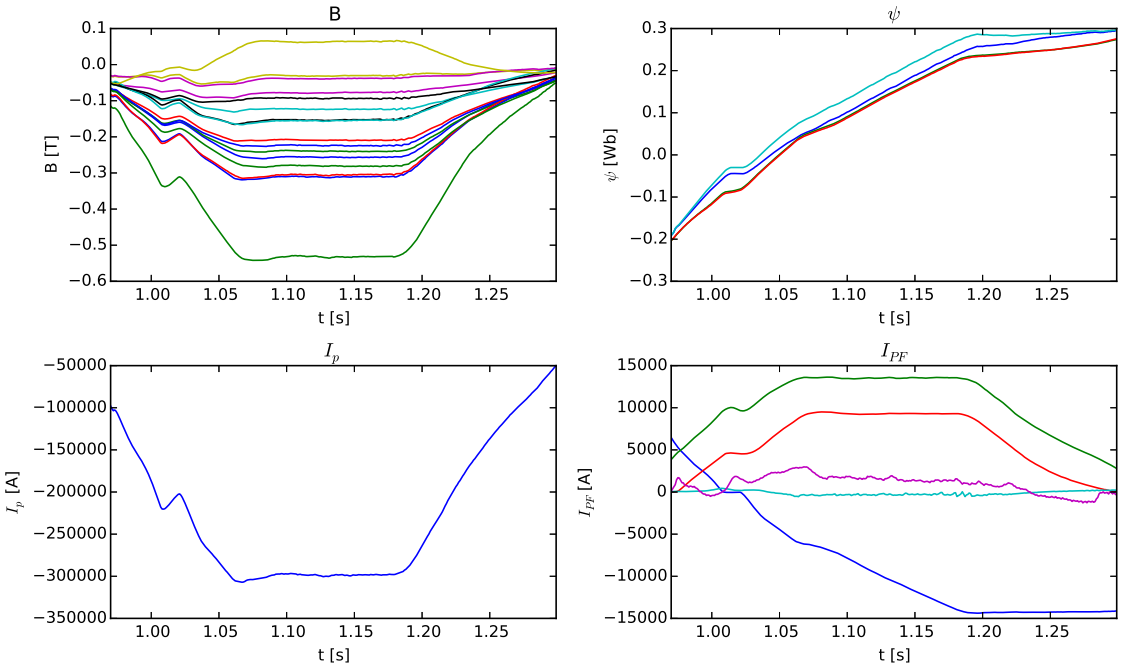
která určuje prostorové rozmístění j_p pomocí neznámých funkcí p', ff', identifikovaných programem rekonstruujícím ekvilibrium. Zde $'$ je parciální derivace podle ψ, $p(\psi)$ je tlak a $f = rB_p$ určuje magnetické pole. Se znalostí řešení rovnice (1.2.7) je pak dostupná kompletní znalost magnetické konfigurace plazmatu.

K řešení úlohy rekonstrukce vlastností plazmatu existuje několik kódů. Příkladem je Equinox [5] nebo EFIT [13]. K přímému výpočtu pak slouží například kód FREEBIE [1]. Nás bude dále zajímat kód VacTH [7], původně sloužící k určení okrajových podmínek (1.2.1),(1.2.2) jako vstupu pro Equinox. VacTH k rekonstrukci $\psi(r, z)$ používá explicitní řešení rovnice $\Delta^*\psi = 0$ pomocí rozkladu toroidálními harmonikami. Vedlejším produktem VacTH je určení okraje plazmatu, jehož určení je ale hlavním cílem této práce. V další kapitole bude algoritmus VacTH popsán podrobněji. Všechny zmiňované kódy jsou používány pro tokamak COMPASS [24].

1.3 Data z tokamaku COMPASS a rekonstrukce pomocí EFIT

Data používaná dále v této práci pochází z výstřelu číslo 9339. EFIT rekonstrukce byla provedena v 330 okamžicích, mezi nimiž je časová prodleva 1 ms. Nás budou zajímat i vstupní údaje, které pocházejí přímo z magnetické diagnostiky, pro EFIT jsou ale ještě filtrovány, aby se odstranil vysokofrekvenční šum. Konkrétně se jedná tyto měření - údaje o proudech v poloidálních vinutích I_{PF}, údaje z magnetických cívek měřících lokální magnetické pole B, ze sedlových cívek měřících magnetický tok ψ a údaje o velikosti proudu v plazmatu I_p. Aktuální používané rozmístění měřících cívek je na Obr. 1.3.2. Kromě měření jsou vstupem pro plazma rekonstruující kód geometrické údaje tokamaku – poloha měřících a tvarujících cívek a tvar vnitřního okraje nádoby.

Výstupem rekonstrukce EFIT je kompletní diagnostika stavu plazmatu, spočítaná z filtrovaných měření I_{PF},B, ψ a I_p. Její součástí je výpočet okraje plazmatu. EFIT mimo jiné fituje měření, popsaná výše, vlastními hodnotami. Kromě toho je možné pomocí výstupů EFIT nasimulovat syntetické měření i v místech, kde se žádné měřící cívky nenacházejí.



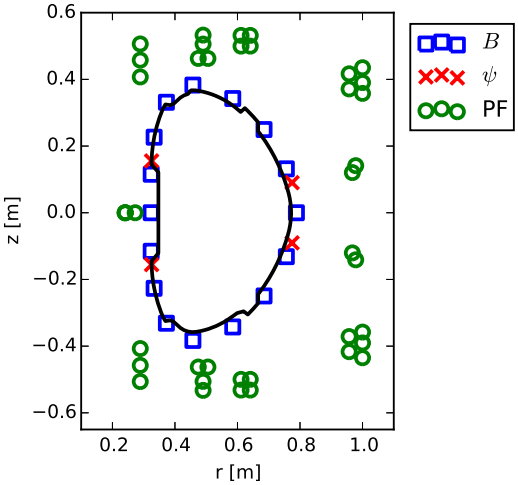
Obrázek 1.3.1: Časové průběhy veličin použitých při rekonstrukci plazmatu, naměřených na tokamaku COMPASS. B je velikost magnetického pole, naměřená na magnetických cívkách. ψ je velikost magnetického toku, naměřená na sedlových cívkách. I_p je proud v plazmatu a I_{PF} jsou proudy v poloidálních vinutích.

V dalších částech práce budeme rekonstrukci okraje plazmatu pomocí EFIT srovnávat s výsledky vyvinuté metody. Vzhledem k tomu, že EFIT je v současnosti na COMPASSU používán k rekosntrukci okraje plazmatu a jeho výsledky byly validovány, bude jeho rekonstrukce považována za etalon při použití stejných vstupů obou kódů.

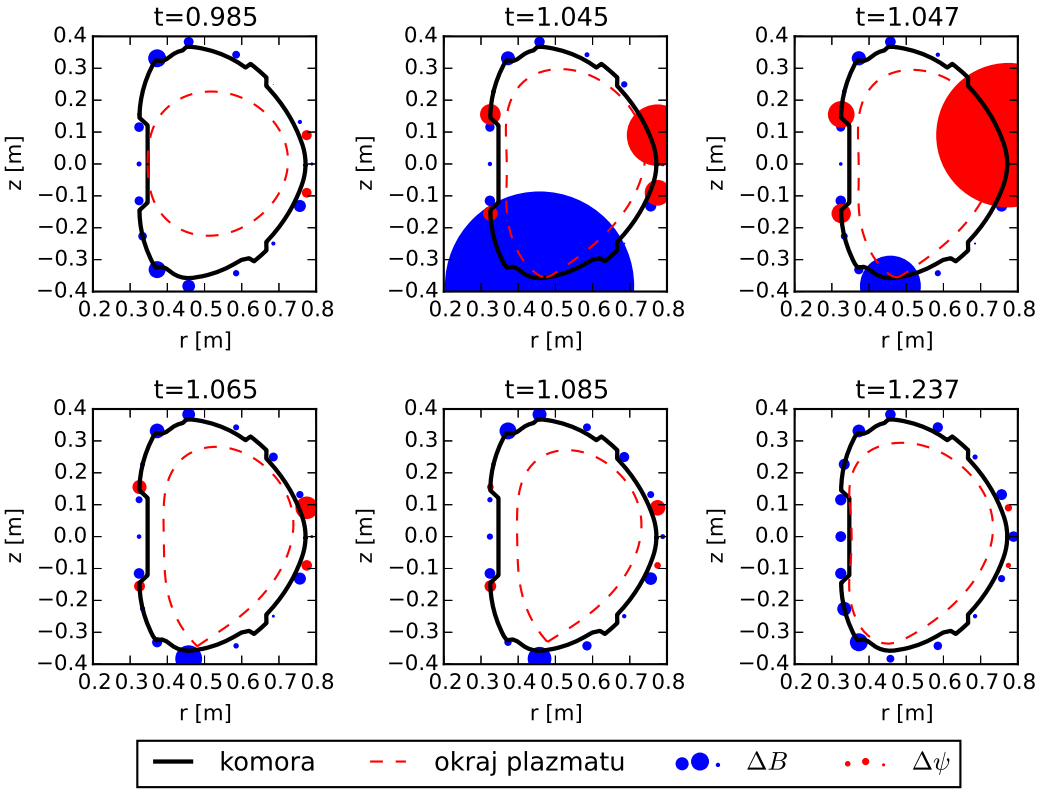
Vizualizace měření získaných při výstřelu 9339 je Obr. 1.3.1. Na některých měřeních je možné pozorovat změnu při přechodu plazmatu mezi stavy (z kruhového do plazmatu ve tvaru D a zpět) a ustálený stav při udržování elongovaného plazmatu. Označme relativní rozdíl mezi měřením B a hodnotou rekonstruovanou pomocí EFIT $\hat{B}$ jako

$$\Delta B = |(B - \hat{B})/B|, \tag{1.3.1}$$

a stejně pro magnetický tok ψ. Na Obr. 1.3.3 je pak dána do souvislosti velikost relativní chyby rekonstrukce EFIT v čase a poloha měřící cívky. Obecně platí, že největší chyby jsou na cívkách, které se nacházejí na horním a dolním okraji komory, kde se nacházejí části okraje plazmatu necitlivější na přesnost rekonstrukce, jako například x-bod. K přesnější rekonstrukci by tedy mohlo vést zpřesnění měření v těchto částech či přidání dalších měřících cívek. Dále je z grafu patrné, že při přechodech plazmatu mezi stavy vykazuje rekonstrukce pomocí EFIT největší relativní chyby vůči měření na magnetických a sedlových cívkách. Může zde například docházet k časovému zpoždění některého z měření a následné systematické chybě způsobené nekonzistencí ve fyzikálním modelu, který je na pozadí metody rekonstrukce.



Obrázek 1.3.2: Pozice středů měřících a řídících cívek na tokamaku COMPASS vůči vnitřnímu okraji nádoby. P_F jsou poloidální tvarující cívky, B jsou magnetické cívky a ψ jsou sedlové cívky měřící magnetický tok.



Obrázek 1.3.3: Vývoj tvaru okraje plazmatu a relativní rozdíl mezi hodnotami magnetického pole B a magnetického toku ψ naměřenými na cívkách a hodnotami zrekonstruovanými kódem EFIT v čase. Vybarvená plocha je přímo úměrná velikosti relativní chyby. Průměrná chyba rekonstrukce B je 5%, u ψ jsou to 4%, v okamžicích, kdy se v plazmatu tvoří x-bod, však chyba stoupá až do řádu 10^3%. Černou linkou je vyznačen vnitřní okraj komory tokamaku.

Kapitola 2

Rekonstrukce plazmatu toroidálními harmonikami

V této kapitole bude uveden popis metody rekonstrukce plazmatu kódem VacTH, který je popsaný v [7], a který využívá reprezentaci magnetického toku toroidálními harmonikami. Nejprve se seznámíme s matematickým pozadím problému a posléze bude představena numerická metoda. Budeme se zabývat výsledky rekonstrukce plazmatu pomocí VacTH, jehož vstupy jsou data z tokamaku COMPASS, představená na konci předchozí kapitoly, a srovnáním s rekonstrukcí pomocí EFIT. Protože se ukázalo, že původní implementace nedosahovala při přenesení VacTH na COMPASS dostatečně kvalitní rekonstrukce okraje plazmatu, bude navržena její modifikace. Závěrem kapitoly srovnáme výsledky upravené identifikace okraje plazmatu s výsledky EFIT.

2.1 Dekompozice magnetického toku ψ pomocí toroidálních harmonik

2.1.1 Analytický popis problému

K určení okrajových podmínek (1.2.1) a (1.2.2) magnetického toku $\psi(r, z)$ využijeme analytického řešení rovnice s Dirichletovou okrajovou podmínkou

$$-\Delta^* \psi = 0 \text{ v } D, \tag{2.1.1}$$

$$\psi = u \text{ na } \partial D, \tag{2.1.2}$$

kde D je oblast, popsaná v předchozí kapitole. Řešení těchto rovnic lze vyjádřit ve tvaru

$$\psi_{TH}(x) = \psi_{TH}^{ext}(x) + \psi_{TH}^{int}(x), \tag{2.1.3}$$

$$\begin{aligned} \psi_{TH}^{ext}(x) = & \frac{r_0 \sinh \zeta}{\sqrt{\cosh \zeta - \cos \eta}} \times \\ & \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} a_n^e Q_{n-1/2}^1(\cosh \zeta) \cos(n\eta) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n^e Q_{n-1/2}^1(\cosh \zeta) \sin(n\eta) \right\}, \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

$$\psi_{TH}^{int}(x) = \frac{r_0 \sinh\zeta}{\sqrt{\cosh\zeta - \cos\eta}} \times \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} a_n^i P_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\cos(n\eta) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n^i P_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\sin(n\eta) \right\}, \tag{2.1.5}$$

kde $Q_{n-1/2}^1(\cosh\zeta), P_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)$ jsou toroidální harmoniky (A.4.4), (A.4.5), (ζ, η) jsou bipolární souřadnice (A.5.2),(A.5.3) a $a_n^e, b_n^e, a_n^i, b_n^i$ jsou koeficienty rozvoje. Dále v této kapitole se držíme značení $x = (r, z)$. Člen ψ_{TH}^{int} představuje magnetický tok, generovaný proudy, tekoucími uvnitř oblasti D, ψ_{TH}^{ext} je magnetický tok ze zdrojů ležících mimo D.

K úplnému určení $\psi(x)$ je potřeba k magnetickému toku určeném toroidálními harmonikami přičíst příspěvek, generovaný známými proudy, tekoucími poloidálními cívkami. Ten získáme integrací a součtem přes jednotlivé poloidální cívky C_k,

$$\psi_C(x) = \sum_k \int_{C_k} j_{C_k} G(y, x) dy, \tag{2.1.6}$$

kde j_{C_k} je hustota proudu v cívce a $G(y, x)$ je Greenova funkce, splňující $-\Delta^* G(y, x) = \delta(y - x), r > 0$ a $G(y, x) \to 0$ když $\|x\| \to \infty$ nebo $r \to 0$. Celková hodnota magnetického toku je pak dána prostým součtem

$$\psi(x) = \psi_{TH}(x) + \psi_C(x). \tag{2.1.7}$$

2.1.2 Numerická metoda

Obecně lze tento postup uplatnit, pokud jsou k dispozici 3 druhy měření:

1. N_f měření z cívek měřících magnetický tok v bodech $x_i^f = (r_i^f, z_i^f)$, $\psi_i^{meas} \approx \psi(x_i^f)$,
2. N_s měření ze sedlových cívek měřících gradient magnetického toku mezi dvěma body x_i^1, x_i^2, $\delta_i \psi^{meas} = \psi(x_i^1) - \psi(x_i^2)$,
3. N_B měření z cívek magnetického pole v bodech x_i^B a směrech d_i, $B_i^{meas} \approx B(x_i^B) d_i$.

Odhad příspěvku poloidálních cívek $\psi_C(x)$ spočteme numerickou integrací

$$\hat{\psi}_C(x) = \sum_k \sum_l^{n_k} \frac{I_k}{n_k} G(c_{k,l}, x), \tag{2.1.8}$$

kde I_k je celkový proud, protékající cívkou k, n_k je počet závitů cívky a $c_{k,l} = (r_{k,l}, z_{k,l})$ je poloha středu jednoho závitu. Greenova funkce $G(c_{k,l}, x)$ je pak spočítána jako

$$G(c_{k,l}, x) = \frac{\mu_0}{\pi} \frac{\sqrt{r_{k,l} r}}{m} \left(\left(1 - \frac{m^2}{2}\right) K(m^2) - E(m^2) \right), \tag{2.1.9}$$

$$m = \sqrt{\frac{4 r_{k,l} r}{(r_{k,l} + r)^2 + (z - z_{k,l})^2}}. \tag{2.1.10}$$

Zde $K(m), E(m)$ jsou úplné eliptické integrály prvního a druhého druhu, (A.3.6) a (A.3.7).

Od hodnot na měřících cívkách je odečten, pro každou cívku zvlášť, příspěvek $\hat{\psi}_C(x)$. Získáme tak veličiny $\tilde{\psi}_i^{meas}, \delta_i \tilde{\psi}^{meas}$ a $\tilde{B}_i^{meas}$. V dalším kroku sestavíme odhad rozkladu magnetického toku $\hat{\psi}_{TH}(x)$ pomocí konečné řady toroidálních harmonik ve tvaru

$$\hat{\psi}_{TH}(x) = \hat{\psi}_{TH}^{ext}(x) + \hat{\psi}_{TH}^{int}(x), \tag{2.1.11}$$

$$\hat{\psi}_{TH}^{ext}(x) = \frac{r_0 \sinh\zeta}{\sqrt{\cosh\zeta - \cos\eta}} \times \left\{ \sum_{n=0}^{n_a^e} a_n^e Q_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\cos(n\eta) + \sum_{n=1}^{n_b^e} b_n^e Q_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\sin(n\eta) \right\}, \tag{2.1.12}$$

$$\hat{\psi}_{TH}^{int}(x) = \frac{r_0 \sinh\zeta}{\sqrt{\cosh\zeta - \cos\eta}} \times \left\{ \sum_{n=0}^{n_a^i} a_n^i P_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\cos(n\eta) + \sum_{n=1}^{n_b^i} b_n^i P_{n-1/2}^1(\cosh\zeta)\sin(n\eta) \right\}. \tag{2.1.13}$$

Finálním krokem je řešení normální rovnice spojené s minimalizací cenové funkce

$$J(u) = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{(\hat{\psi}_i(u) - \tilde{\psi}_i^{meas})^2}{\sigma_f^2} + \sum_{i=1}^{N_s} \frac{(\delta_i\hat{\psi}(u) - \delta_i\tilde{\psi}^{meas})^2}{\sigma_s^2} + \sum_{i=1}^{N_B} \frac{(\hat{B}_i(u) - \tilde{B}_i^{meas})^2}{\sigma_B^2}, \tag{2.1.14}$$

kde σ_f^2, σ_s^2 a σ_B^2 jsou známé (předpokládané) měřící chyby na příslušných cívkách. Optimalizace je přitom provedena pro vektor u neznámých koeficientů v rozvoji (2.1.12), (2.1.13)

$$u = (a_0^e, \ldots, a_{n_a^e}^e, b_1^e, \ldots, b_{n_b^e}^e, a_0^i, \ldots, a_{n_a^i}^i, b_1^i, \ldots, b_{n_b^i}^i). \tag{2.1.15}$$

Problém minimalizace (2.1.14) se překládá do hledání neznámého vektoru u v rovnici

$$\mathrm{diag}(w)y(\psi, B)^T = \mathrm{diag}(w)a(\psi, B)u + e, \tag{2.1.16}$$

kterou pro další užití přepíšeme do tvaru

$$Y = Au + e. \tag{2.1.17}$$

Platí, že $y(\psi, B) \in \mathbb{R}^N$ je vektor hodnot (pro $N = N_f + N_s + N_B$), naměřených jednotlivými cívkami a ztransformovaných pomocí

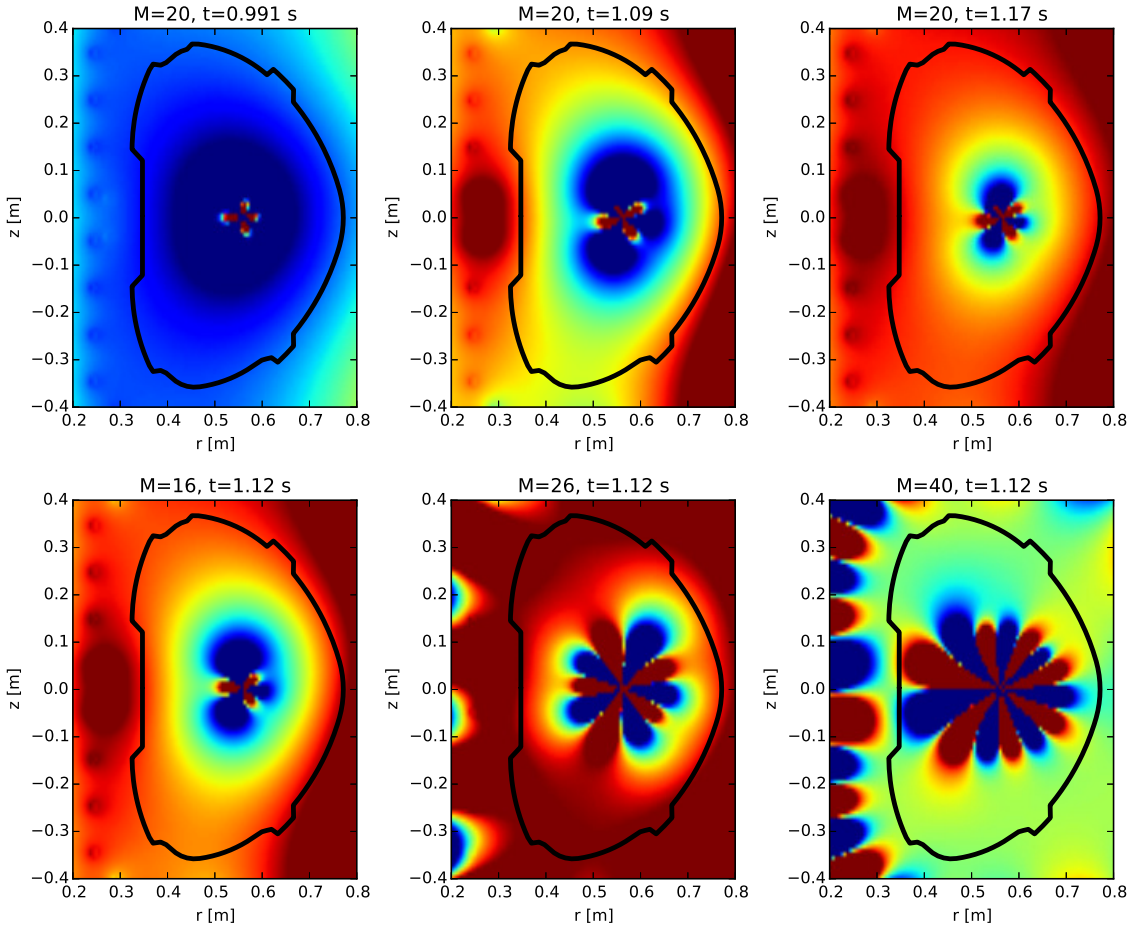
$$B(r, z) = \frac{1}{r}\left(-\frac{\partial\psi}{\partial z}, \frac{\partial\psi}{\partial r}\right) \tag{2.1.18}$$

jednotně do hodnot magnetického toku. Dále platí, že

$$w = (\underbrace{\sigma_f^{-1}, \cdots, \sigma_f^{-1}}_{N_f}, \underbrace{\sigma_s^{-1}, \cdots, \sigma_s^{-1}}_{N_s}, \underbrace{\sigma_B^{-1}, \cdots, \sigma_B^{-1}}_{N_B}) \tag{2.1.19}$$

je vektor přesností měřících cívek (diag(.) je diagonální matice s prvky argumentu na diagonále). Každý řádek matice $a(\psi, B) \in \mathbb{R}^{N\times M}, M = n_a^e + n_b^e + n_a^i + n_b^i$ obsahuje vyčíslení toroidálních harmonik (2.1.12) a (2.1.13) v bodě, kde se nalézá jedna měčící cívka. Chybový člen $e \in \mathbb{R}^N$ je bílý šum (normálně rozdělená veličina s nulovou střední hodnotou a konstantním rozptylem napříč měřeními).

Rovnice 2.1.17 je v původní implementaci VacTH řešena obyčejnými nejmenšími čtverci. Numerická řešitelnost této úlohy je značně citlivá na počet stupňů rozvoje n_a^i, n_b^i, jejichž počet je vhodné volit obecně menší než počet externích harmonik n_a^e, n_b^e. Dalším faktorem ovlivňujícím přesnost rekonstrukce je volba pólu F_1 bipolárních souřadnic, viz (A.5.1), na



Obrázek 2.1.1: Výsledek modelování magnetického toku $\psi(r, z)$ toroidálními harmonikami.

němž závisí vyčíslení převodu $(r, z) \to (\zeta, \eta)$. Typicky by měl představovat magnetickou osu plazmatu.

Výsledný vektor u lze použít k rekonstrukci $\psi(x)$ v libovolném bodě souřadnicového systému (r, z). Primárně slouží k rekonstrukci okrajových podmínek (1.2.1) a (1.2.2) na křivce Γ, v další části této kapitoly bude uvedeno jeho využití k identifikaci okraje plazmatu.

Numerická metoda rekonstrukce magnetického toku toroidálními harmonikami, popsaná v této části, byla implementována v jazyku Python mimo původní kód VacTH, napsaný v C++. To umožňuje snadnější kontrolu výstupů a jednodušší úpravu ostatních částí kódu, jako je identifikace okraje plazmatu či hledání regularizovaného vektoru u. K výpočtu toroidálních harmonik je použita FORTRANovská procedura DTORH1 [21]. Příklad finálního výstupu této implementace v podobě magnetického toku $\psi(r, z)$ je na Obr. 2.1.1. Použit byl nejprve model řádu $M = 20$ pro různé časové okamžiky, kdy lze pozorovat postupné tvarování ekvipotenciál. Posléze byly použity modely různého řádu v jednom čase s přidáním syntetických měření, spočítaných pomocí EFIT (proto, aby byl dobře podmíněn problém (2.1.16)).

Zajímavá je oblast kolem barycentra $F_1 = (0.56, 0.0)$, kde vidíme charakteristickou vlastnost rekonstrukce toroidálními harmonikami, způsobenou jejich limitním chováním v blízkosti barycentra. Simulovaný magnetický tok rapidně přechází mezi velmi vysokými a

nízkými hodnotami a pozorujeme charakteristické "vlnění" v této oblasti. Pro rekonstrukci okraje plazmatu či určení hodnot $\psi(r,z)$ na křivce Γ toto chování nemá velký význam, dokud se s rostoucím M nezačne zvětšovat i diskutovaná singulární oblast. V takovém případě je výsledný tvar okraje plazmatu značně nepravidelný či nelze sestavit.

S ohledem na tato zjištění, navíc podpořené omezeným počtem 20 měření v reálné konfiguraci COMPASSu, se nabízí možnost zlepšení rekonstrukce regularizací řešení rovnice (2.1.16). Vnesením penalizace za složitost modelu můžeme počítat s modelem vyššího řádu a z něj vybrat jen nejvíce informativní členy. Navíc regularizace penalizuje velikost prvků odhadu u, čímž se může efektivně snížit velikost oblasti, postižené singulárním chováním toroidálních harmonik. Autoři původního článku mluví o regularizaci pouze v souvislosti s výběrem konečného počtu toroidálních harmonik. V další kapitole se pokusíme o představení regularizační techniky, která nahradí odhad u metodou nejmenších čtverců.

2.2 Hledání ekvipotenciály v plazmatu

Okraj plazmatu je definován jako největší ekvipotenciála $\psi(r,z)$ neprotínající stěnu komory [19, 7]. Určujícím bodem hledané ekvipotenciály je buď bod doteku plazmatu s vnitřkem komory nebo x-bod. X-bod se přitom vyskytuje jen u elongovaného plazmatu ve tvaru D. Po nalezení bodu, definujícího ekvipotenciálu, lze okraj plazmatu nalézt různými způsoby. Jeden ze způsobů, využívající Newtonovu metodu hledání kořenu funkce, bude popsán dále.

Při volbě mezi použitím x-bodu a bodu dotyku plazmatu s komorou má vždy přednost x-bod, pokud je nalezen. Pokud x-bod není nalezen, jako místo dotyku plazmatu s komorou je vybrán ten bod komory, na kterém je nejnižší (nejvyšší záporná) hodnota $\psi(r,z)$. Jelikož nalezení $\psi(r,z)$ na bodech definujících vnitřek komory je triviální, dále se zaměříme na nalezení x-bodu.

2.2.1 Hledání x-bodu

Existují konfigurace tokamaků, ve kterých je při výstřelu v plazmatu x-bodů více [12]. V tokamaku COMPASS se x-bod vyskytuje jen jeden, ve spodní části komory. X-bod lze nalézt jako sedlový bod v $\psi(r,z)$. V sedlovém bodu funkce $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ platí $\nabla f = 0$, hessián

$$\nabla^2 f = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \tag{2.2.1}$$

má záporná i kladná vlastní čísla a jeho determinant je tedy pro případ $n = 2$ záporný. Všechny tyto vlastnosti, spolu se vztahem (2.1.18), nám pomohou při hledání x-bodu. Hledání sedlového bodu v $\psi(r,z)$ je ekvivalentní s hledáním minima $B(r,z)$, k čemuž existuje řada postupů.

2.2.2 Gradientní sestup

Jedním z nich je gradientní sestup (anglicky *gradient descent*) [3]. Využívá geometrickou interpretaci gradientu k iterativnímu hledání minima funkce $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Po zadání výchozího bodu $x_0 \in \mathbb{R}^n$ postupuje v každém kroku proti směru gradientu do vzdálenosti definované $\gamma_n \in \mathbb{R}$. Jeden krok algoritmu lze popsat rovnicí

Algoritmus 2.1 Gradientní sestup

1. Inicializace x_0, počítadla iterací $n = 0$, volba zastavovací podmínky ε a množiny G prohledávaných hodnot parametru γ_n .
2. Spočtení $\nabla f(x_n)$.
3. Volba $\gamma_n = \arg\min_{\gamma \in G} \{f(x_n - \gamma \nabla f(x_n))\}$.
4. Nová hodnota $x_{n+1} = x_n - \gamma_n \nabla f(x_n)$, $n = n + 1$.
5. Konec, pokud platí $\|\nabla f(x_{n+1})\| < \varepsilon$, jinak návrat do bodu 2.

$$x_{n+1} = x_n - \gamma_n \nabla f(x_n), \tag{2.2.2}$$

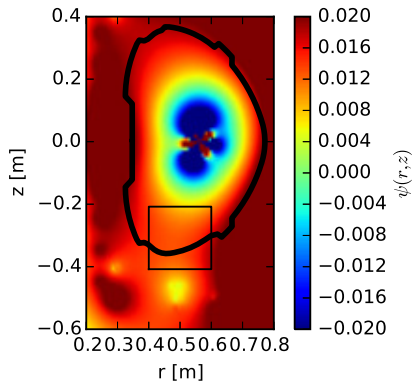
přičemž tento krok je opakován do dosažení konvergence. Při splnění předpokladů, kladených na funkci f (f musí být konvexní a ∇f Lipschitzovská) a vhodně zvolené velikosti parametru γ_n je garantováno nalezení lokálního minima [18].

Tento relativně jednoduchý návod k nalezení minima vícerozměrné funkce má výhodu rychlosti. Velká pozornost musí být věnována volbě γ_n. Pokud je parametr fixní po celou dobu běhu algoritmu, algoritmus buď konverguje velmi dlouho (při volbě příliš malé hodnoty), nebo hledané minimum překročí a nikdy do něj nezkonverguje (při volbě příliš velké hodnoty). Proto budeme v rámci jednoho kroku hledat optimální vzdálenost, po níž máme směr daný $-\nabla f(x_n)$ sledovat. V literatuře je tento postup nazýván *exact line search* a splňuje tzv. Goldsteinovu podmínku [15]. Podrobný popis gradientního sestupu je shrnut v algoritmu 2.1.

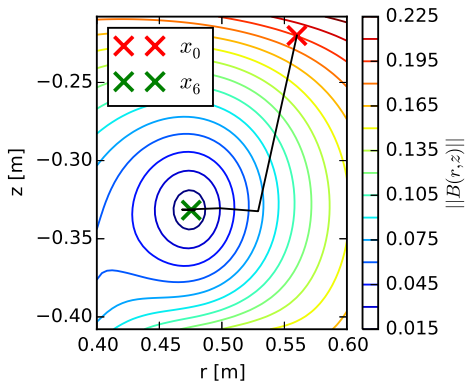
Optimalizace hledání γ_n přináší výpočetní zrychlení a přesnější konvergenci. V našem případě budeme optimalizovat normu vektoru magnetického pole $\|B(r,z)\|$, které má v sedlovém bodě $\psi(r,z)$ minimum o hodnotě 0. Toto minimum je námi hledaný x-bod. K výpočtu gradientu $\psi(r,z)$ použijeme teoretické vztahy z oddílů 2.1.2, A.4 a A.5 pro výpočet $\nabla\psi_{TH}(r,z)$ a numerickou derivaci pro výpočet $\nabla\psi_C(r,z)$.

Na Obr. 2.2.1 je demonstrována ukázka aplikace gradientního sestupu k hledání x-bodu na magnetickém toku $\psi(r,z)$ nalezeném pomocí rozkladu do toroidálních harmonik. K jeho sestavení byla použita měření, simulovaná pomocí EFIT. Nejprve je na 2.2.1a vyznačena oblast hledání x-bodu. Zároveň je barevně vyznačena intenzita magnetického toku $\psi(r,z)$ a vnitřní okraj komory tokamaku. Můžeme pozorovat, že magnetický tok směrem k okraji komory tokamaku monotónně roste, s výjimkou spodního okraje, kde se za okrajem komory nachází lokální minimum. Jak uvidíme dále, tato skutečnost může ztěžovat identifikaci x-bodu, potažmo okraje plazmatu.

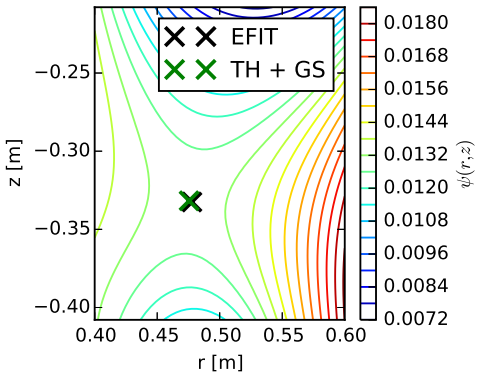
Dále na 2.2.1b je nakreslen samotný postup gradientního sestupu. Pozorujeme různě velké kroky v závislosti na hodnotě γ_n použité v každém kroku. Její hledání značně zrychluje nalezení x-bodu, který je v tomto případě nalezen již po 6 krocích. Jako množina G z algoritmu 2.1 byla použita posloupnost 10 hodnot, rozmístěných logaritmicky daleko od sebe na intervalu $(10^{-1}, 10^{-5})$. V n-tém kroku algoritmu je sice navíc iterováno mezi hodnotami z množiny G, vyčíslování hodnoty hledané funkce ve známém směru je ale levnější operace než samotný výpočet gradientu. Pro praktickou implementaci je zřejmě velmi důležitá výchozí hodnota x_0 a volba prohledávané množiny vah G tak, aby byla konvergence zajištěna ve



(a) situace následujících 2 obrázků vzhledem ke geometrii tokamaku a $\psi(r, z)$



(b) kontura $\|B(r, z)\|$ a gradientní sestup



(c) kontura $\psi(r, z)$ a nalezený x-bod (označený TH+GS) proti simulaci pomocí EFIT

Obrázek 2.2.1: Na Obrázku 2.2.1a je obdélníkem vyznačena oblast hledání x-bodu, použitá v dalších dvou příkladech vůči geometrii komory tokamaku, s pozadím vybarveným podle intenzity magnetického toku $\psi(r, z)$, simulovaného rozkladem do toroidálních harmonik. Na obrázku 2.2.1b je vykreslena velikost magnetického pole $\|B(r, z)\|$ a postup algoritmu gradientního sestupu. Vyznačen je původní odhad x_0 a nalezený x-bod x_6. Na Obr. 2.2.1c je pak kontura $\psi(r, z)$, vyznačený x-bod nalezený pomocí EFIT a x-bod nalezený rekonstrukcí magnetického toku toroidálními harmonikami a gradientním sestupem.

všech případech.

Konečně na Obr. 2.2.1c je zakreslena kontura $\psi(r, z)$ v prohledávané oblasti. Podle tvaru kontury je očividné, že nalezený x-bod leží v sedlovém bodu magnetického toku, navíc velmi blízko x-bodu nalezeném algoritmem EFIT, ze kterého pochází simulované měření pro tento experiment.

2.2.3 Newtonova metoda hledání x-bodu

V původním návrhu kódu VacTH byla k hledání x-bodu použita modifikovaná Newtonova metoda hledání kořenu funkce [3]. Newtonova metoda je podobná gradientnímu sestupu. Při hledání kořenu funkce $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, tedy bodu $x : f(x) = 0$ iterujeme podle pravidla

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \tag{2.2.3}$$

přičemž zřejmě musí platit $f'(x_n) \neq 0$. Geometrická interpretace je taková, že x_{n+1} hledáme na průsečíku tečny grafu v bodě x_n s osou x. Metoda konverguje ke kořenu podle volby počáteční hodnoty x_0. V případě hledání x-bodu v plazmatu se může stát, že metoda dokonverguje k jinému kořenu, než který hledáme.

Při hledání x-bodu je Newtonova metoda použita k nalezení kořenu rovnice $\nabla\psi(r,z) = 0$, jelikož v sedlovém bodu je gradient nulový. Rozšířením vzorce (2.2.3) do dvou rozměrů je pak

$$x_{n+1} = x_n - \left(\nabla^2\psi(x_n)\right)^{-1} \nabla\psi(x_n), \tag{2.2.4}$$

kde $\nabla^2\psi$ je hessián (2.2.1) a $x_n = (r_n, z_n)$. Pro zjednodušení výpočtu je použito vztahů

$$\nabla^2\psi(x_n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} & \frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial z} \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial r} & \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}, \tag{2.2.5}$$

$$\left(\nabla^2\psi(x_n)\right)^{-1} = \frac{1}{\det\left(\nabla^2\psi(x_n)\right)} \begin{pmatrix} b & -c \\ -c & a \end{pmatrix} = \frac{1}{ab - c^2} \begin{pmatrix} b & -c \\ -c & a \end{pmatrix}. \tag{2.2.6}$$

Takto upravená Newtonova metoda iteruje podle (2.2.4) do dosažení konvergence, tedy za platnosti podmínky $\|\nabla\psi(x_n)\| < \varepsilon$. Jak bude dále ukázáno, tento způsob hledání x-bodu nebyl při použití na dostupných datech příliš úspěšný.

2.2.4 Newtonova metoda hledání ekvipotenciály

Poté, co známe bod x_b, definující ekvipotenciálu (ať už je definována dotykem plazmatu s komorou nebo x-bodem), můžeme se pustit do její identifikace. K nalezení diskrétní reprezentace ekvipotenciály využijeme Newtonův algoritmus, popsaný v předchozí části. Podrobněji je celý postup popsán v algoritmu 2.2. Nejprve je okolí barycentra plazmatu F_0 rozděleno rovnoměrně na výseče, ohraničené polopřímkami ve směru vektorů $\bar{u}_k, k \in \hat{K}$. Algoritmus pak ve směru vektorů $\bar{u}_k$ hledá kořen rovnice

$$y(x) = \psi(x) - \psi(x_b). \tag{2.2.7}$$

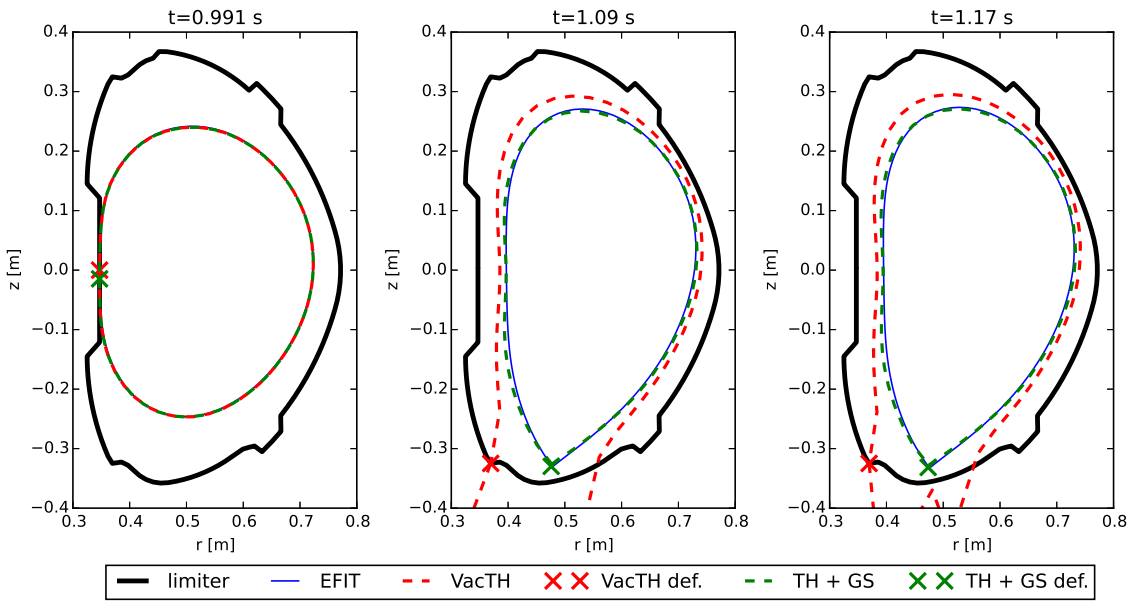
Díky fixovanému směru hledání se dvourozměrný problém převede do rozměru jednoho. Newtonovou metodou hledáme vzdálenost α_k, určující polohu hledaného bodu od barycentra v prohledávaném směru. Využíváme přitom projekci gradientu do směru normálového vektoru $\bar{u}_k$.

Jak již bylo řečeno v předchozí části, nejdůležitější kritériem konvergence ke správnému řešení je jeho dostatečná blízkost prvního odhadu. To je zde řešeno parametrem L, udávajícím v jaké vzdálenosti od barycentra se má hledat první odhad bodu náležejícímu k hranici plazmatu. Jak bylo ukázáno na Obr. 2.2.1a, ve velké části tokamaku je magnetický tok ve směru od barycentra k okraji komory i za ním monotónní, Newtonova metoda má tedy dobré předpoklady pro nalezení správného řešení. Výjimkou je okolí x-bodu, jehož směrem se za vnitřním okrajem tokamaku nalézají lokální minima. V tomto směru se proto musí L volit s opatrností.

Algoritmus 2.2 Hledání ekvipotenciály v plazmatu Newtonovou metodou

1. Vstupy: definující bod $x_b = (r_b, z_b)^T$, barycentrum $F_0 = (r_0, z_0)^T$, počet bodů reprezentujících ekvipotenciálu K, vzdálenost prvního odhadu L, přesnost ε.
2. Výpočet $\psi_b = \psi(x_b)$, $d\Theta = 2\pi/K$, $u_0 = L(x_b - F_0)$.
3. $k = 1$
4. Směr hledání $u_k = (\cos(kd\Theta)\, u_{0r} - \sin(kd\Theta)\, u_{0z}, \sin(kd\Theta)\, u_{0r} + \cos(kd\Theta)\, u_{0z})^T$.
5. Normalizace $\bar{u}_k = \frac{u_k}{\|u_k\|}$.
6. První odhad $x_0 = F_0 + u_k$, $\alpha_0 = 0$.
7. Newtonova metoda:
   (a) Skalární součin gradientu a směrového vektoru $g = \nabla\psi(x_n)^T \bar{u}_k$.
   (b) Jeden krok Newtonovy metody $\alpha_{n+1} = \alpha_n - \frac{\psi(x_n) - \psi_b}{g}$.
   (c) $x_{n+1} = x_0 + \alpha_{n+1}\bar{u}_k$.
   (d) Konec, pokud $\mid \psi(x_{n+1}) - \psi_b \mid < \varepsilon$, jinak návrat do (a).
8. Nalezený bod hranice$x_k = x_{n+1}$, $k = k + 1$.
9. Konec, pokud $k > K$, jinak návrat do 4.

Na Obr. 2.2.2 vidíme srovnání původního přístupu, implementovaného ve VacTH a využívající k hledání x-bodu Newtonovu metodu s hessiánem, a vylepšeného algoritmu, využívající k hledání x-bodu gradientní sestup. Oba přístupy k následné rekonstrukci ekvipotenciály používají algoritmu popsaného v této části. Vidíme, že v případě kruhového plazmatu oba přístupy shodně nenaleznou x-bod. Za bod, definující ekvipotenciálu, určí podobné body na vnitřní stěně komory, a i výsledný tvar plazmatu je podobný, navíc shodný se simulovanou hranicí EFITu. V případě elongovaného plazmatu má ale původní algoritmus problém s nalezením x-bodu. Následná rekonstrukce okraje plazmatu je pak velice nepřesná. Jak bylo již komentováno, největší odchylka se nachází v okolí x-bodu, kde má Newtonova metoda problém nalézt optimální řešení kvůli tvaru funkce $\psi(r, z)$. Gradientní sestup naopak x-bod nalézá a rekonstruované plazma je tvarem velice blízké simulaci.



Obrázek 2.2.2: Původní a nově implementovaná identifikace okraje plazmatu. Limiter je vnitřní okraj komory tokamaku, EFIT je simulovaná hranice, jíž se chceme identifikací přiblížit. VacTH označuje výsledek původního algoritmu a "TH + GS" pak implementaci gradientního sestupu k hledání x-bodu. Křížky jsou pak body, definující ekvipotenciálu. Data použitá k rekonstrukci toroidálními harmonikami jsou syntetická, spočítaná modelem EFIT.

Kapitola 3

Regularizace a variační Bayes

V této kapitole bude představeno regularizované řešení problému lineární regrese, postavené na variačně bayesovském (VB) odhadu. Bude uvedena základní věta VB, popsán postup její aplikace a iterační algoritmus, vedoucí k nalezení VB řešení. Dále bude odvozen tvar použitého VB modelu a jeho vlastnosti. Na konci kapitoly budou uvedeny výsledky aplikace zvoleného modelu na data z tokamaku COMPASS.

K problému regularizace existuje mnoho přístupů. Nejzákladnějším z nich je takzvaná Tichonovská regularizace [8], kdy je do minimalizované cenové funkce rovnice (2.1.17) zahrnut penalizační člen s parametrem $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$J(u) = \|Au - Y\|_2 + \lambda \|u\|_2, \tag{3.0.1}$$

tedy je penalizována L_2 norma odhadu. Jiným způsobem je takzvaná LASSO metoda [23], minimalizující

$$J(u) = \|Au - Y\|_2 + \lambda \|u\|_1. \tag{3.0.2}$$

V této kapitole představíme regularizaci, postavenou na aplikaci bayesovských principů. Vnesením apriorní informace do odhadovaného modelu se nám podaří z dat vytěžit více informací než běžnými metodami, při dosažení regularizovaného řešení. Využijeme přitom znalosti Bayesova teorému,

$$p(\theta|y) = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{p(y)} \propto p(y|\theta)p(\theta), \tag{3.0.3}$$

kde θ je vektor hledaných parametrů modelu a y jsou naměřená data. Poslední část vztahu se interpretuje jako „rovno až na normalizační konstantu“. $p(y|\theta)$ je pravděpodobností funkce parametrů modelu θ, tedy pravděpodobnost, že při dané hodnotě parametrů budeme pozorovat právě data y. Druhý součinitel v (3.0.3) je pak apriorní odhad tvaru parametrů θ. Právě vnesením apriorního činitele se liší bayesovská od klasické statistiky. Zároveň je tím ale do našich odhadů vnášeno jakési očekávání, které od modelu máme, což je bayesovskému přístupu často vyčítáno. Z tohoto důvodu se snažíme apriornímu rozdělení pravděpodobnosti dát takové parametry, které jsou co nejméně informativní. Zároveň zkreslení dané volbou apriorna můžeme omezit tím, že modelujeme i rozdělení samotných odhadovaných parametrů - zavádíme hyperparametry a hierarchický bayesovský model. Tím se ještě sníží citlivost výsledku na volbu apriorna.

3.1 VB metoda

Metodu VB (angl. *Variational Bayes*) lze jednoduše shrnout jako odhad aposteriorního rozdělení parametrů (3.0.3) směsí distribucí navzájem nezávislých podmnožin parametru $\theta = (\theta_1, \cdots, \theta_q)^T$. Díky předpokladu nezávislosti lze toto shrnout do zápisu

$$p(\theta|y) \approx \prod_{i=1}^{q} \hat{p}(\theta_i|y). \tag{3.1.1}$$

Pro měření vzdálenosti dvou hustot pravděpodobnosti $p(x), q(x)$ náhodné veličiny X budeme používat Kullbeck-Leiblerovu divergenční míru (dále KLD). Definujme ji jako

$$KL\left(p(x)\|q(x)\right) = \int_{x^*} p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx. \tag{3.1.2}$$

Zjevně platí

$$p(x) = q(x) \text{ s.v.} \Leftrightarrow KL\left(p(x)\|q(x)\right) = 0, \tag{3.1.3}$$

$$KL\left(p(x)\|q(x)\right) \geq 0, \tag{3.1.4}$$

$$\text{obecně } KL\left(p(x)\|q(x)\right) \neq KL\left(q(x)\|p(x)\right). \tag{3.1.5}$$

V našem kontextu, kdy budeme odhadovat neznámou aposteriorní distribuci s hustotou pravděpodobnosti $p(\theta|y)$, budeme KLD používat jako ztrátovou funkci při volbě aproximace $\hat{p}(\theta|y)$. Vzdálenost odhadu $\hat{p}(\theta|y)$ od $p(\theta|y)$ budeme tedy měřit jako

$$KL\left(\hat{p}(\theta|y)\|p(\theta|y)\right) = \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta|y) \ln \frac{\hat{p}(\theta|y)}{p(\theta|y)} d\theta. \tag{3.1.6}$$

Vraťme se zpět k rozboru vztahu (3.0.3). Zjevně platí $\int_{\theta^*} p(y,\theta)d\theta = p(y) = p(y|\theta)p(\theta)$, kde $p(y)$ je hustota pravděpodobnosti pozorování naměřeného vektorů výstupů a $p(y|\theta)$ lze interpretovat jako pravděpodobnost naměřených dat při znalosti parametrů θ. Dále víme

$$\begin{aligned} \ln p(y) &= \ln \int_{\theta^*} p(y,\theta)d\theta = \ln \int_{\theta^*} \frac{\hat{p}(\theta|y)}{\hat{p}(\theta|y)} p(\theta|y)p(y)d\theta \\ &\geq \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta|y) \ln \frac{p(\theta|y)p(y)}{\hat{p}(\theta|y)} d\theta \\ &= \ln p(y) - KL(\hat{p}(\theta|y)||p(\theta|y)) = \ln \hat{p}(y), \end{aligned} \tag{3.1.7}$$

$$\ln p(y) = \ln \hat{p}(y) + KL(\hat{p}(\theta|y)||p(\theta|y)) = L(\hat{p}) + KL(\hat{p}(\theta|y)||p(\theta|y)), \tag{3.1.8}$$

kde jsme použili Jensenovu nerovnost [4] a definici KL divergence (3.1.6). $L(\hat{p})$ je spodním odhadem věrohodnosti modelu při pozorování y, kterého je dosaženo pro $\hat{p}(\theta|y) = p(\theta|y)$. $L(\hat{p})$ je pro model definovaný parametrem θ značně důležitá veličina. Lze ji využít například při selekci modelu - čím vyšší je jeho hodnota, tím lépe model vysvětluje data y [3]. Podrobněji bude přínos $L(\hat{p})$ rozebrán dále.

Pro snadnější počítání $L(\hat{p})$ ukážeme, že platí

$$\begin{aligned} L(\hat{p}) &= \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta|y) \ln \frac{p(y,\theta)}{\hat{p}(\theta|y)} d\theta \\ &= \mathbb{E}[\ln p(y,\theta)]_{\hat{p}(\theta|y)} - \mathbb{E}[\ln \hat{p}(\theta|y)]_{\hat{p}(\theta|y)}. \end{aligned} \tag{3.1.9}$$

Index $\hat{p}(\theta|y)$ značí, přes jakou hustotu pravděpodobnosti počítáme střední hodnotu.

Na výše uvedené úvahy navážeme hlavní větou VB metody [26].

Věta 3.1 (Variační Bayes). *Nechť $p(\theta|y)$ je aposteriorní rozdělení vícerozměrného vektoru parametrů θ, který je dále rozdělen do q subvektorů θ_i podle*

$$\theta = [\theta_1^T, \theta_2^T, \cdots, \theta_q^T]^T. \tag{3.1.10}$$

Nechť $\hat{p}(\theta|y)$ je odhad distribuce $p(\theta|y)$ pomocí odhadů distribucí nezávislých parametrů $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_q$, který má tvar

$$\hat{p}(\theta|y) = \prod_{i=1}^{q} \hat{p}(\theta_i|y). \tag{3.1.11}$$

Pak je minimum (3.1.6), tedy

$$\tilde{p}(\theta|y) = \arg\min_{\hat{p}(.)} KL\left(\hat{p}(\theta|y)||p(\theta|y)\right) \tag{3.1.12}$$

dosaženo pro

$$\tilde{p}(\theta_i|y) \propto \exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta, y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right), i = 1, \cdots, q. \tag{3.1.13}$$

Zde $\theta_{/i}$ je doplňkem θ_i do θ a $\tilde{p}(\theta_{/i}|y) = \prod_{j=1, j\neq i}^{q} \tilde{p}(\theta_j|y)$.

Důkaz. Z definice (3.1.6)

$$\begin{aligned}
KL\left(\hat{p}(\theta|y)\|p(\theta|y)\right) &= \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta_{/i}|y)\hat{p}(\theta_i|y) \ln \frac{\hat{p}(\theta_{/i}|y)\hat{p}(\theta_i|y)}{p(\theta|y)} \frac{p(y)}{p(y)} d\theta \\
&= \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta_{/i}|y)\hat{p}(\theta_i|y) \ln \hat{p}(\theta_i|y) d\theta + \\
&+ \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta_{/i}|y)\hat{p}(\theta_i|y) \left\{\ln \hat{p}(\theta_{/i}|y) + \ln p(y)\right\} d\theta - \\
&- \int_{\theta^*} \hat{p}(\theta_{/i}|y)\hat{p}(\theta_i|y) \ln p(\theta, y) d\theta \\
&= \int_{\theta_i^*} \hat{p}(\theta_i|y) \ln \hat{p}(\theta_i|y) d\theta_i + \ln p(y) + \eta_i - \\
&- \int_{\theta_i^*} \hat{p}(\theta_i|y) \left\{\int_{\theta_{/i}^*} \hat{p}(\theta_{/i}|y) \ln p(\theta, y) d\theta_{/i}\right\} d\theta_i \\
&= \int_{\theta_i^*} \hat{p}(\theta_i|y) \ln \hat{p}(\theta_i|y) d\theta_i + \ln p(y) + \eta_i - \\
&- \int_{\theta_i^*} \hat{p}(\theta_i|y) \left\{\ln \left[\frac{\zeta_i}{\zeta_i} \exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta, y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right)\right]\right\} d\theta_i \\
&= \int_{\theta_i^*} \hat{p}(\theta_i|y) \ln \frac{\hat{p}(\theta_i|y)}{\frac{1}{\zeta_i} \exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta, y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right)} d\theta_i + \ln p(y) + \eta_i - \ln(\zeta_i),
\end{aligned} \tag{3.1.14}$$

což platí pro libovolné nenulové číslo $\zeta_i \neq 0, \zeta_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \cdots, q$ a

$$\eta_i = \mathbb{E}\left[\ln \hat{p}(\theta_{/i}|y)\right]_{\hat{p}(\theta_{/i}|y)}. \tag{3.1.15}$$

Číslo ζ_i můžeme proto volit jako normalizační konstantu

$$\zeta_i = \int_{\theta_i^*} \exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta, y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right) d\theta_i, i =, \cdots, q. \tag{3.1.16}$$

Poslední rovnost v (3.1.14) lze pak přepsat jako

$$KL\left(\hat{p}(\theta|y)\|p(\theta|y)\right) = KL\left(\hat{p}(\theta_i|y)\|\frac{1}{\zeta_i}\exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta,y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right)\right) + \tag{3.1.17}$$

$$+\ln p(y) + \eta_i - \ln(\zeta_i). \tag{3.1.18}$$

V rovnici (3.1.18) je na odhadu $\hat{p}(.)$ závislý pouze člen, vyjádřený jako KLD. Minimalizace (3.1.18) vzhledem k $\hat{p}(\theta_i|y), i = 1, \cdots, q$, je proto rovna minimalizaci prvního členu pravé strany. Díky vlastnosti (3.1.4) víme, že toto minimum je rovno nule. Dále díky (3.1.4) platí, že toto minimum nastává pro

$$\hat{p}(\theta_i|y) = \tilde{p}(\theta_i|y) \propto \exp\left(\mathbb{E}\left[\ln p(\theta,y)\right]_{\tilde{p}(\theta_{/i}|y)}\right). \tag{3.1.19}$$

□

VB metoda nám dává návod k analytickému vyjádření aproximace aposteriorního hustoty pravděpodobnosti $p(\theta|y)$. Pokud se blíže podíváme na tvar aproximace (3.1.11), uvidíme, že takto zvolený tvar zcela opomíjí vzájemnou korelaci mezi složkami θ_i. Čím větší stupeň dělení q použijeme, tím více vzájemných korelací opomíjíme a je větší šance, že se vzdalujeme skutečnému tvaru odhadované distribuce. Základním principem je tedy použít dostatečně velké q, pro které dosáhneme analyticky vyjádřitelného tvaru (3.1.13), ale ne větší, než je nezbytně potřeba. Dále je zřejmé, že metodu lze použít pouze pro vícerozměrnou veličinu θ.

Důležité je zmínit fakt, o kterém předchozí věta vůbec nemluví. K dosažení analyticky vyjádřitelných tvarů aposteriorních hustot pravděpodobnosti

$$\hat{p}(\theta|y) = \prod_{i=1}^{q}\hat{p}(\theta_i|y) \tag{3.1.20}$$

je třeba volit vhodný (konjugovaný) tvar apriorních hustot pravděpodobnosti, ze kterých se skládá

$$p(\theta,y) = p(y|\theta)\prod_{i=1}^{q}p(\theta_i). \tag{3.1.21}$$

Jejich volba pak ovlivňuje tvar výsledných aposteriorních rozdělení.

Předchozí věta navíc nedává jistotu unikátnosti řešení (3.1.12). Naopak, v praxi se lze setkat s případy, kdy metoda konverguje v lokálním minimu. Vzhledem ke tvaru rovnic (3.1.13) je navíc zřejmé, že přímé analytické vyčíslení požadované hustoty pravděpodobnosti $\tilde{p}(\theta_i|y)$ (tzv. VB marginály) nemusí být vždy možné, jelikož její parametry jsou závislé na parametrech $q-1$ distribucí $\tilde{p}(\theta_{/i}|y)$. Proto se k výpočtu používá iterativní algoritmus, označovaný jako IVB algoritmus.

IVB algoritmus funguje na principu postupného snižování KL divergence (a s tím spojeného navyšování hodnoty $L(\hat{p})$. Pro případ, kdy platí $q = 2$, se v n-tém kroku algoritmu počítá nejprve

$$\hat{p}^n(\theta_1|y) \propto \int_{\theta_2^*}\hat{p}^{n-1}(\theta_2|y)\ln p(\theta_1,\theta_2,y)d\theta_2 \tag{3.1.22}$$

a následně

$$\hat{p}^n(\theta_2|y) \propto \int_{\theta_1^*}\hat{p}^{n-1}(\theta_1|y)\ln p(\theta_1,\theta_2,y)d\theta_1. \tag{3.1.23}$$

Prvotní nastavení $\hat{p}^0(\theta_i|y)$ je přitom takřka libovolné. Konvergence algoritmu k danému minimu (3.1.12) je dokázána v [20], algoritmus nikdy nekonverguje k maximu či do inflexního bodu KLD. Konvergenci algoritmu sledujeme na hodnotách parametrů $\hat{p}^n(\theta_i|y)$ či na hodnotě $L(\hat{p})$.

3.2 Aplikace VB metody

V první řadě je potřeba pro daný model zvolit vhodný tvar pravděpodobností funkce $p(y|\theta)$ a apriorního rozdělení $p(\theta)$. Dále je třeba zvolit stupeň q a tvar separace $\theta = (\theta_1, \cdots, \theta_q)^T$. Aby výsledek byl analyticky vyjádřitelný, musí být rozdělení $p(\theta, y)$ separovatelné v parametrech. Pro případ $q = 2$, $\theta = (\theta_1, \theta_2)^T$ to znamená, že musí platit

$$\ln p(\theta_1, \theta_2, y) = f_1(\theta_1, y)^T f_2(\theta_2, y). \tag{3.2.1}$$

Pokud nelze rozdělení $p(\theta, y)$ zapsat v tomto tvaru, tedy pomocí součinu funkcí závislých pouze na jednom ze separovaných parametrů θ_i, VB metodu nelze aplikovat.

Dále aplikujeme (3.1.13) z věty 3.1 na (3.2.1). V praxi to znamená rozepsání $\ln p(\theta, y)$ pomocí tvaru (3.2.1). V potaz potom bereme jen ty členy rovnice, které mají funkční závislost na θ_i. Tak dostaneme přímý předpis pro $\hat{p}(\theta_i|y)$. V tuto chvíli je nutné identifikovat příslušnou tabulkovou distribuční funkci, což nemusí být vždy proveditelné. Parametry $\hat{p}(\theta_i|y)$ pak mohou záviset na parametrech a momentech rozdělení $\hat{p}(\theta_j|y), j \neq i$. Pokud toto provedeme pro všechny θ_i, dostaneme sadu implicitních rovnic pro parametry jednotlivých aposteriorních distribucí. Pokud některé z nich můžeme spočítat přímo, spočítáme je a vyřadíme je. Zbylé pak spočítáme pomocí IVB algoritmu. Výsledkem je souhrn parametrů a některých momentů rozdělení $\hat{p}(\theta_i|y), \forall i$, plně určující tvar řešení.

3.3 Skalární dekompozice pomocí VB metody

VB metodu si nejprve představíme na příkladu skalární dekompozice. Mějme následující model

$$y = m + e, \tag{3.3.1}$$

$$e \sim p(e) = \mathcal{N}_e(0, w^{-1}). \tag{3.3.2}$$

Z tohoto plyne $p(y|m, w) = \mathcal{N}_y(m, w^{-1})$. Naším úkolem je nyní odhadnout tvar parametrů m, w z jednoho měření y. Volme následující apriorní rozdělení

$$p(m|w) = \mathcal{N}_m\left(0, (\gamma w)^{-1}\right), \tag{3.3.3}$$

$$p(w) = \mathcal{G}_w(\alpha, \beta). \tag{3.3.4}$$

Nulová střední hodnota v (3.3.3) značí naší neznalost o polaritě m, γ omezuje velikost rozptylu. Použitím gamma rozdělení v (3.3.4) pak předpokládáme kladnou polaritu w. Zřejmě platí $\theta = (m, w)^T$. Aposteriorní hustota pravděpodobnosti má podle (3.0.3) tvar

$$\begin{aligned} p(m, w|y, \alpha, \beta, \gamma) &\propto \mathcal{N}_y(m, w^{-1})\mathcal{N}_m\left(0, (\gamma w)^{-1}\right)\mathcal{G}_w(\alpha, \beta) \\ &\propto w^\alpha \exp\left(-\frac{1}{2}m^2\gamma w - \frac{1}{2}(y-m)^2 w - \beta w\right). \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

Tuto úměru lze přepsat ve stejném tvaru i pro společné rozdělení všech veličin $p(m, w, y|\alpha, \beta, \gamma)$. Z rovnice (3.2.1) pak dostaneme tvar separace, tedy funkce

$$f_1(m, y) = \left(\alpha, -\frac{1}{2}(y^2 + 2\beta), my, -\frac{1}{2}(1+\gamma)m^2\right)^T, \tag{3.3.6}$$

$$f_2(w, y) = (\ln w, w, w, w)^T. \tag{3.3.7}$$

Takový tvar separace je vhodný pro další analytické vyjádření.

Na (3.3.5) aplikujeme marginalizaci (3.1.13). Pro parametr m pak platí

$$\hat{p}(m|y) \propto \exp\left(\widehat{w}\left(ym - \frac{1}{2}m^2(\gamma+1)\right)\right). \tag{3.3.8}$$

Veličina $\widehat{w}$ je prvním momentem rozdělení $p(w|d)$,

$$\widehat{w} = \mathbb{E}\left[w\right]_{\hat{p}(w|y)}. \tag{3.3.9}$$

Tento tvar lze získat také přímo z (3.3.5) zakrytím členů nezávislých na m či na parametrech rozdělení $p(m)$. Podobně pro w

$$\hat{p}(w|y) \propto \exp\left(w\left(y\widehat{m} - \frac{1}{2}(\gamma+1)\widehat{m^2} - \frac{1}{2}(y^2+2\beta)\right) + \alpha w\right), \tag{3.3.10}$$

kde

$$\widehat{m} = E\left[m\right]_{\hat{p}(m|y)}, \tag{3.3.11}$$

$$\widehat{m^2} = E\left[m^2\right]_{\hat{p}(m|y)}. \tag{3.3.12}$$

Nyní identifikujeme rozdělení parametrů m, w. Několika úpravami a srovnáním s tvarem hustoty pravděpodobnosti (A.1), (A.2) získáme

$$\hat{p}(m|y) = \mathcal{N}_m\left(\frac{y}{(1+\gamma)}, \frac{1}{(1+\gamma)\widehat{w}}\right), \tag{3.3.13}$$

$$\hat{p}(w|y) = \mathcal{G}_w\left(\alpha+1, \beta - y\widehat{m} + \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}(\gamma+1)\widehat{m^2}\right). \tag{3.3.14}$$

Ze znalosti momentů gamma a normálního rozdělení můžeme přímo zapsat soustavu rovnic

$$\widehat{w} = \frac{\alpha+1}{\beta - y\widehat{m} + \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2}(\gamma+1)\widehat{m^2}}. \tag{3.3.15}$$

$$\widehat{m} = \frac{y}{(1+\gamma)}, \tag{3.3.16}$$

$$\widehat{m^2} = \frac{1}{(1+\gamma)\widehat{w}} + \frac{y^2}{(1+\gamma)^2}, \tag{3.3.17}$$

Rovnice (3.3.15) a (3.3.17) lze upravit do explicitního tvaru

$$\widehat{m^2} = \frac{y^2(1+\gamma+2\alpha) + \beta(1+\gamma)}{(1+\gamma)^2(1+2\alpha)}, \tag{3.3.18}$$

$$\widehat{w} = \frac{(1+2\alpha)(1+\gamma)}{y^2\gamma + 2\beta(1+\gamma)}. \tag{3.3.19}$$

Tím dostáváme kompletní řešení celého problému. Pokud by soustava rovnic (3.3.15)–(3.3.17) nebyla explicitně řešitelná, k jejímu řešení by byl použit IVB algoritmus. To nastává například v případě

$$p(m) = \mathcal{N}_m\left(0, \phi^{-1}\right). \tag{3.3.20}$$

Po uvedení jednoduchého příkladu v jednom rozměru bude nyní rozvedeno využití VB metody v lineární regresi.

3.4 Variační Bayes a lineární regrese

VB metodu lze úspěšně použít ve chvíli, kdy řešíme úlohu odhadu parametru u lineárního modelu (2.1.17). Dává nám možnost volby apriorního rozdělení $p(Y|\theta)$ v jiném tvaru než pouze pomocí

$$p(Y|u, \beta) = \mathcal{N}(Y|Au, \beta^{-1}I), \tag{3.4.1}$$

který předpokládá klasická metoda nejmenších čtverců. Předpokládejme přitom $Y \in \mathbb{R}^N, A \in \mathbb{R}^{N\times M}, u \in \mathbb{R}^M, \beta \in \mathbb{R}, I$ je jednotková matice řádu N. V předchozím příkladu jsme byli schopni z jednoho měření odhadnout (skrze zavedení apriorní informace) rozdělení 2 parametrů. Tato vlastnost VB metody je užitečná v případech, kdy není dostupný dostatečný počet dat či příliš velký počet odhadovaných parametrů. V takovém případě VB metoda funguje jako regularizace a snižuje efektivní počet odhadovaných parametrů. Ve chvíli, kdy odhad parametru při procházení IVB algoritmem konverguje k apriorní hodnotě, můžeme ho vyřadit z modelu jako nadbytečný. Tato vlastnost se nazývá ARD (*automatic relevance determination*), viz [26].

3.4.1 Volba VB modelu

Dále budeme dodržovat značení momentů funkcí z předchozího jednorozměrného případu, viz (3.3.9). K pozorovacímu modelu (3.4.1) přidejme apriorna

$$p(\beta) = \mathcal{G}(c_0, d_0), \tag{3.4.2}$$

$$p(u|\alpha) = \mathcal{N}(0, \alpha^{-1}), \tag{3.4.3}$$

$$\alpha = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_M), \tag{3.4.4}$$

$$p(\alpha) = \prod_{i=1}^{M} p(\alpha_i), \tag{3.4.5}$$

$$p(\alpha_i) = \mathcal{G}(a_0, b_0), \tag{3.4.6}$$

kde diag(.) je diagonální matice s prvky argumentu na diagonále. Budeme odhadovat přesnost β s gamma apriornem, hledanému vektoru u přiřazujeme normální rozdělení a navíc modelujeme jeho kovarianční matici skrz jednotlivé diagonální prvky, každý s vlastním gamma apriornem. Právě odhad jednotlivých prvků kovarianční matice α uvaluje na výsledný odhad u silnou regularizaci.

V kontextu věty 3.1 platí $\theta = (u, \alpha, \beta)$. Naším cílem je získat odhad rozdělení neznámých parametrů podmíněné znalostí naměřených dat, $\hat{p}(u, \alpha, \beta|Y)$. Pro splnění (3.1.11) předpokládejme rovnost $\hat{p}(u, \alpha, \beta|Y) = \hat{p}(u|Y)\hat{p}(\alpha|Y)\hat{p}(\beta|Y)$. Sdružená pravděpodobnostní funkce je tvaru

$$p(Y,\theta)=p(Y,u,\beta,\alpha) = p(Y|u,\beta)p(u|\alpha)p(\beta)p(\alpha). \tag{3.4.7}$$

3.4.2 Odvození aposteriorních rozdělení parametrů modelu

Pro parametr β přepíšeme rovnost (3.1.13) do tvaru

$$\ln \hat{p}(\beta|Y) = \mathbb{E}_{\hat{p}(u|\alpha)\hat{p}(\alpha)} \left[\ln p(Y|u,\beta) + \ln p(u|\alpha) + \ln p(\beta) + \ln p(\alpha)\right] + konst. \tag{3.4.8}$$

Členy z $p(u|\alpha)$ a $p(\alpha)$ jsou nezávislé na β a spadají do integrační konstanty. Dále vyčíslíme pomocí předpisů pro normální (A.1.1) a gamma (A.2.1) rozdělení

$$\begin{aligned}\ln \hat{p}(\beta|Y) &= \frac{N}{2}\ln\beta - \frac{\beta}{2}(Y-A\hat{u})^T(Y-A\hat{u}) + (c_0-1)\ln\beta - d_o\beta + konst. \\ &= (c_0+\frac{N}{2}-1)\ln\beta - \beta\left(d_0 + \frac{1}{2}Y^TY - Y^TA\hat{u} + \frac{1}{2}\widehat{u}^TA^TA\widehat{u}\right) + konst.\end{aligned} \tag{3.4.9}$$

V posledním vztahu už rozpoznáváme gamma rozdělení

$$\hat{p}(\beta|Y) = \mathcal{G}(a_\beta, b_\beta), \tag{3.4.10}$$

s parametry

$$a_\beta = c_0 + \frac{N}{2}, \tag{3.4.11}$$

$$b_\beta = d_0 + \frac{1}{2}Y^TY - Y^TA\widehat{u} + \frac{1}{2}\widehat{u}^TA^TA\widehat{u}. \tag{3.4.12}$$

Pro parametr u postupujeme totožně. Nejprve vyřadíme nepotřebné členy a poté vztah dopodrobna rozepíšeme tak, abychom identifikovali aposteriorní rozdělení.

$$\begin{aligned}\ln \hat{p}(u|Y) &= \mathbb{E}_{\hat{p}(\beta)\hat{p}(\alpha)}\left[\ln p(Y|u,\beta) + \ln p(u|\alpha)\right] + konst. \\ &= -\frac{\hat{\beta}}{2}(Y-Au)^T(Y-Au) - \frac{1}{2}\widehat{\alpha}u^Tu + konst. \\ &= -\frac{1}{2}u^T(\widehat{\alpha}I + \hat{\beta}A^TA)u + \hat{\beta}Y^TAu + konst.\end{aligned} \tag{3.4.13}$$

Všimněme si změny oproti předchozímu odvození, kdy jsou nyní značkou $\widehat{.}$ označeny veličiny, přes jejichž rozdělení počítáme střední hodnotu. Tento rozdíl bude velmi důležitý při implementaci IVB algoritmu, kdy budeme přes rovnice udávající momenty rozdělení iterovat. Doplněním na čtverec a pozorným srovnáním identifikujeme hledané rozdělení jako normální,

$$\hat{p}(u|Y) = \mathcal{N}(m_u, S_u), \tag{3.4.14}$$

s parametry

$$m_u = \hat{\beta}S_uA^TY, \tag{3.4.15}$$

$$S_u = (\widehat{\alpha} + \hat{\beta}A^TA)^{-1}. \tag{3.4.16}$$

Pro získání aposteriorních rozdělení jednotlivých α_i postupujeme stejně jako dosud. Platí

$$\begin{aligned}\ln \hat{p}(\alpha_i|y) &= \mathbb{E}_{\hat{p}(u|\alpha)\hat{p}(\beta)\hat{p}(\alpha_{/i})}\left[\ln p(u|\alpha) + \ln p(\alpha_i)\right] + konst. \\ &= (a_0 - 1)\ln\alpha_i - b_0\alpha_i + \frac{1}{2}\ln\alpha_i - \frac{1}{2}\alpha_i\widehat{u_i^2} + konst. \\ &= (a_0 + \frac{1}{2} - 1)\ln\alpha_i - (b_0 + \frac{1}{2}\widehat{u_i^2})\alpha_i + konst.\end{aligned} \tag{3.4.17}$$

V tomto předpisu opět rozpoznáváme gamma rozdělení

$$\hat{p}(\alpha_i|y) = \mathcal{G}(a_{\alpha i}, b_{\alpha i}), \tag{3.4.18}$$

$$a_{\alpha i} = a_0 + \frac{1}{2}, \tag{3.4.19}$$

$$b_{\alpha i} = b_0 + \frac{1}{2}\widehat{u_i^2}. \tag{3.4.20}$$

Hledané momenty, potřebné ke spuštění IVB algoritmu, dohledáme snadno, pomocí vztahů z částí A.1 a A.2. Jsou to ty, které se vyskytují v předpisu parametrů určující rozdělení jiného, než právě zkoumaného parametru. Konkrétně se jedná o

$$\widehat{u} = m_u, \tag{3.4.21}$$

$$\widehat{u^T u} = m_u^T m_u + \mathrm{Tr}(S_u), \tag{3.4.22}$$

$$\widehat{u_i^2} = (S_u)_{ii} + m_{u,i}^2, \tag{3.4.23}$$

$$\widehat{\beta} = \frac{a_\beta}{b_\beta}, \tag{3.4.24}$$

kde Tr(.) je stopa matice, tedy suma diagonálních prvků. Odhad $\hat{\alpha}$ je složen z odhadů diagonálních prvků, tedy $\hat{\alpha} = \mathrm{diag}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \cdots, \hat{\alpha}_M)$, pro které platí

$$\hat{\alpha}_i = \frac{a_{\alpha i}}{b_{\alpha i}}. \tag{3.4.25}$$

3.4.3 Spodní odhad věrohodnosti modelu $L(\hat{p})$

Odhad věrohodnosti modelu $L(\hat{p})$ slouží k porovnávání různých modelů mezi sebou. Tato veličina v sobě zahrnuje jak přesnost shody modelu s daty, tak penalizaci příliš komplexních modelů. Výpočet $L(\hat{p})$ je v IVB algoritmu použit pro kontrolu konvergence.

Veličina $L(\hat{p})$ je podle (3.1.9) dána následujícími vztahy

$$\begin{aligned}L(\hat{p}) &= \mathbb{E}[\ln p(Y, u, \beta, \alpha)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} - \mathbb{E}[\ln \hat{p}(u, \beta, \alpha|Y)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} \\ &= \mathbb{E}[\ln p(Y|u,\beta)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} + \mathbb{E}[\ln p(u|\alpha)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} + \mathbb{E}[\ln p(\alpha)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} + \\ &+ \mathbb{E}[\ln p(\beta)]_{\hat{p}(u,\beta,\alpha|Y)} + \mathrm{H}(u) + \mathrm{H}(\alpha) + \mathrm{H}(\beta),\end{aligned} \tag{3.4.26}$$

kde jsme využili aditivity střední hodnoty, H(.) je entropie parametrů (A.1.6) podle příslušných aposteriorních rozdělení pravděpodobnosti. Dále si budeme pamatovat, že všechny střední

hodnoty jsou počítané podle aposteriorního rozdělení parametrů $\hat{p}(u,\beta,\alpha|y)$ a zahodíme spodní index. Pokračujeme

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\ln p(Y|u,\beta)] &= -\frac{N}{2}\ln(2\pi)+\frac{N}{2}\mathbb{E}[\ln\beta]-\frac{1}{2}\mathbb{E}[\beta(Y-Au)^T(Y-Au)]\\ &= -\frac{N}{2}\ln(2\pi)+\frac{N}{2}(\psi(a_\beta)-\ln b_\beta)-\frac{a_\beta}{2b_\beta}Y^TY+\frac{a_\beta}{b_\beta}Y^TAm_\theta\\ &\quad -\frac{a_\beta}{2b_\beta}\operatorname{Tr}\left(A^TA(m_um_u^T+S_u)\right), \end{aligned} \tag{3.4.27}$$

kde jsme využili vztahů z přílohy A a tvarů momentů odvozených výše. Rozepíšeme další člen rovnice 3.4.26, přičemž si pamatujeme, že platí $p(\alpha)=\prod_{i=1}^M\mathcal{G}(a_0,b_0)$ a $\hat{p}(\alpha|y)=\prod_{i=1}^M\mathcal{G}(a_{\alpha i},b_{\alpha i})$.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\ln p(\theta|\alpha)] &= -\frac{M}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^M\mathbb{E}[\ln\alpha_i]-\frac{1}{2}\mathbb{E}[\theta^T\alpha\theta]\\ &= -\frac{M}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^M(\psi(a_{\alpha,i})-\ln b_{\alpha,i})- \qquad (3.4.28)\\ &\quad -\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left(\mathbb{E}[\alpha](m_um_u^T+S_u)\right), \qquad (3.4.29)\end{aligned}$$

kde jsme využili aditivity Tr(.) a rovností

$$\theta^T\alpha\theta=\operatorname{Tr}(\alpha\theta\theta^T), \tag{3.4.30}$$

$$\mathbb{E}[\alpha]=\operatorname{diag}\left(\frac{a_{\alpha i}}{b_{\alpha i}},\cdots,\frac{a_{\alpha M}}{b_{\alpha M}}\right). \tag{3.4.31}$$

Dále

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\ln p(\alpha)] &= \sum_{i=1}^M\{a_0\ln b_0+(a_0-1)\mathbb{E}[\ln\alpha_i]-\ln\Gamma(a_0)-b_0\mathbb{E}[\alpha_i]\}\\ &= \sum_{i=1}^M\left\{a_0\ln b_0+(a_0-1)(\psi(a_{\alpha i})-\ln b_{\alpha i})-\ln\Gamma(a_0)-\frac{b_0a_{\alpha i}}{b_{\alpha i}}\right\}, \end{aligned} \tag{3.4.32}$$

Poslední z hledaných středních hodnot apriorních rozdělení je

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\ln p(\beta)] &= c_0\ln d_0+(c_0-1)\mathbb{E}[\ln\beta]-\ln\Gamma(c_0)-d_0\mathbb{E}[\beta]\\ &= c_0\ln d_0+(c_0-1)(\psi(a_\beta)-\ln b_\beta)-\ln\Gamma(c_0)-\frac{d_0a_\beta}{b_\beta}. \end{aligned} \tag{3.4.33}$$

Ke kompletnímu dopočtení zbývá podle známých předpisů určit entropie jednotlivých aposteriorních odhadů.

$$\mathrm{H}(u)=\frac{1}{2}\ln|S_u|+\frac{M}{2}(1+\ln(2\pi)), \tag{3.4.34}$$

Algoritmus 3.1 IVB algoritmus pro lineární regresi

1. Inicializace apriorních parametrů a_0, b_0, c_0, d_0.
2. Inicializace $\hat{\alpha}, \widehat{\beta}$.
3. Do dosažení konvergence opakujeme tuto sérii výpočtů:
   - u - výpočty podle rovnic 3.4.15, 3.4.16, (3.4.21), (3.4.22) a (3.4.23).
   - α - rovnice (3.4.19),(3.4.20) a (3.4.25).
   - β - rovnice (3.4.11), (3.4.12) a (3.4.24).
   - V každém kroku navíc výpočet $L(\hat{p})$.
4. Analýza výsledných parametrů po dosažení konvergence $L(\hat{p})$.

$$\mathrm{H}(\alpha) = \sum_{i=1}^{M} \mathrm{H}(\alpha_i) = \sum_{i=1}^{M} \left\{ \ln \Gamma(a_{\alpha i}) - (a_{\alpha i} - 1)\psi(a_{\alpha i}) - \ln b_{\alpha i} + a_{\alpha i} \right\}, \tag{3.4.35}$$

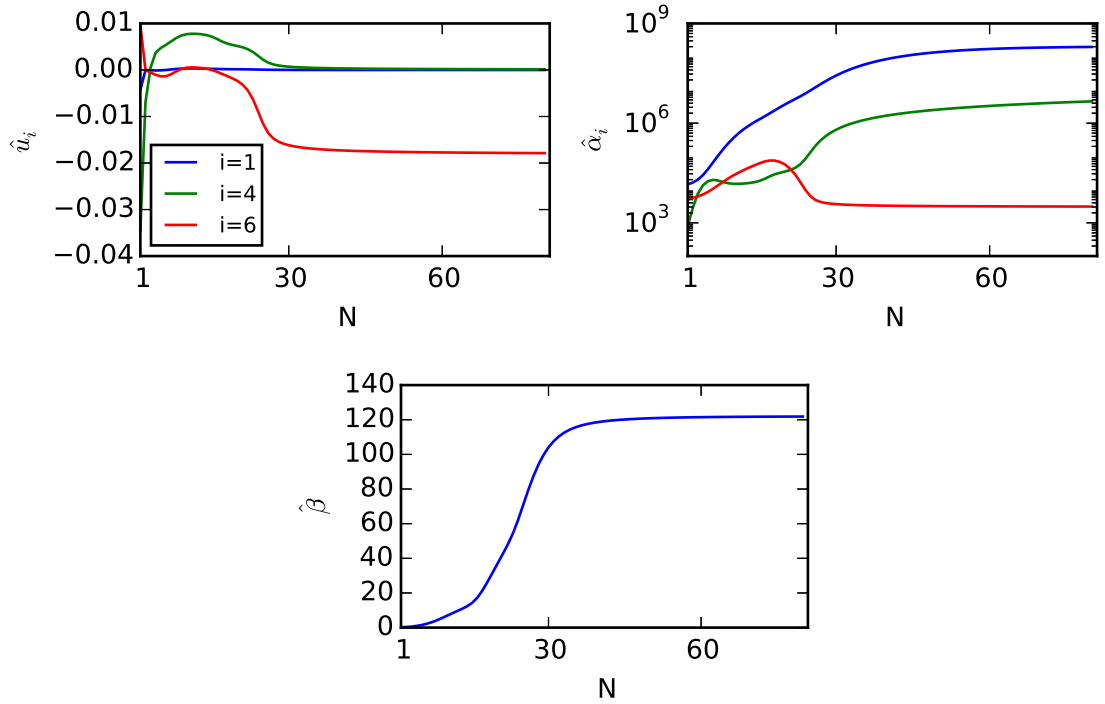
$$\mathrm{H}(\beta) = \ln \Gamma(a_\beta) - (a_\beta - 1)\psi(a_\beta) - \ln b_\beta + a_\beta. \tag{3.4.36}$$

3.4.4 IVB algoritmus pro lineární regresi

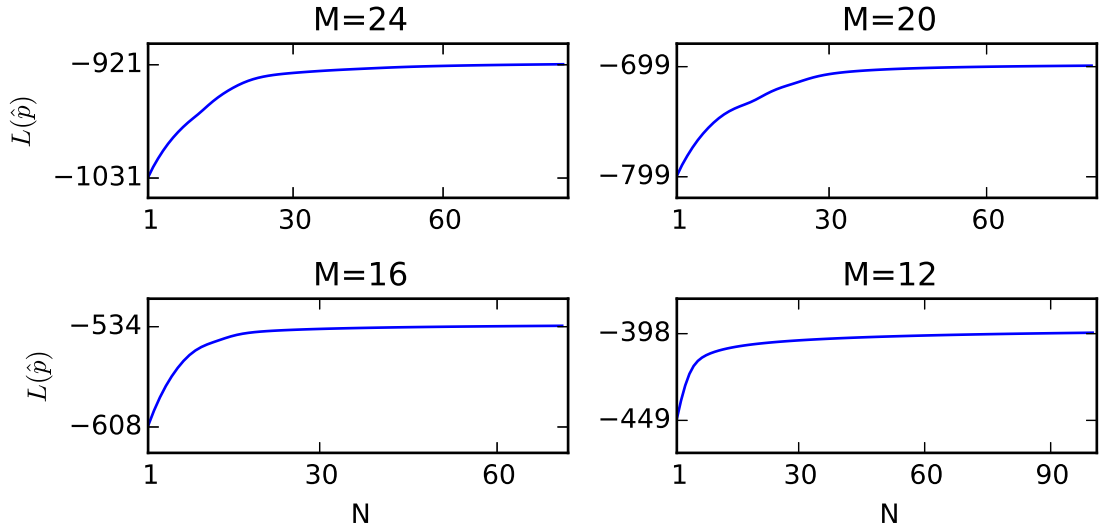
Samotná implementace IVB algoritmu byla naznačena v sekci 3.1. Popis IVB algoritmu pro výše popsaný variačně bayesovský model je ve schématu 3.1. Pro dosažení co nejméně informativního apriorna volíme $a_0 = b_0 = c_0 = d_0 = 10^{10}$. Díky vztahu (A.2.3) mají gamma apriorna s těmito hodnotami velký rozptyl a jsou téměř uniformní. Vzhledem ke zvolenému pořadí iterací v IVB algoritmu, kdy začínáme první výpočtem rovnic pro u, je potřeba algoritmu určit výchozí hodnoty $\hat{\alpha}_i = \alpha_0, \hat{\beta} = \beta_0$. Pokud nebude řečeno jinak, všechny výsledky budou inicializovány s hodnotami $\alpha_0 = 10^4, \beta_0 = 1$. Tyto hodnoty byly zvoleny blízko řádům, ke kterým obě veličiny typicky konvergují (viz Obr. 3.4.1). Výsledky běhu IVB na datech z tokamaku COMPASS, popsaných v první kapitole, jsou na Obr. 3.4.1 a 3.4.2.

Na Obr. 3.4.1 je konvergence různých odhadovaných veličin na jednom ekvilibriu s modelem specifikovaným indexy $n_a^i = n_b^i = 5, n_a^e = n_b^e = 4$. Na prvních dvou grafech vidíme srovnání konvergence vybraných prvků vektoru $\hat{u}$ s konvergencí příslušných diagonálních prvků matice $\hat{\alpha}$. Zde vidíme, proč VB odhad funguje jako účinná metoda regularizace. Funguje zde intuitivní pravidlo, kdy neinformativním prvkům odhadu je přisuzována vysoká přesnost $\hat{\alpha}_i$ a malá střední hodnota. Naopak těm, u nichž algoritmus odhalí, že jsou v rámci modelu přínosné, se přesnost redukuje a střední hodnota roste.

Na Obr. 3.4.2 vidíme konvergenci odhadu spodní hranice pravděpodobnosti modelu $L(\hat{p})$ pro modely různého řádu M. Připomeňme, že platí $\ln p(\hat{Y}) = L(\hat{p})$, tedy tato veličina reprezentuje logaritmus pravděpodobnosti pozorovaných dat při daném modelu. Vidíme, že s rostoucím řádem modelu je jeho pravděpodobnost nižší, navíc se zpomaluje rychlost konvergence IVB algoritmu.



Obrázek 3.4.1: Konvergence odhadů, získaných IVB algoritmem.



Obrázek 3.4.2: Konvergence odhadu spodní hranice věrohodnosti modelu $L(\hat{p})$ pro různé řády modelu M, N je počet iterací.

Kapitola 4

Výsledky

Ve druhé kapitole byla představena původní struktura kódu VacTH rekonstruujícího magnetický tok v tokamaku pomocí toroidálních harmonik. Z důvodů nedostatečné kvality nalezeného okraje plazmatu byla upravena metoda hledání x-bodu. Ve třetí kapitole byla ukázána regularizační metoda, řešící lineární problém hledání koeficientů báze toroidálních harmonik pomocí variačně bayesovského odhadu. Nyní budou ukázány výsledky společné implementace obou vylepšení původního kódu. Bude ukázáno srovnání s původní implementací, konkrétně srovnání rekonstruovaného plazmatu získaného s použitím OLS (metodou nejmenších čtverců) a VB odhadu. Dále bude provedeno srovnání s kódem EFIT, jenž je na tokamaku COMPASS používán k rekonstrukci plazmatu a proto jeho výsledky budeme používat jako etalon. Budou přitom použita data, popsaná v první kapitole. Naměřené údaje o I_p, B, ψ a I_{PF} očištěné o vysokofrekvenční šum, budeme dále označovat jako reálná měření. Údaje o stejných veličinách, rekonstruovaných na základě reálných měření pomocí EFIT, budeme označovat jako syntetická měření.

Celý algoritmus hledání okraje plazmatu má mnoho různých parametrů, které ovlivňují kvalitu výsledné rekonstrukce. Dále se budeme snažit nalézt nastavení, dávající nejlepší výsledek. Pro srovnání podobnosti dvou 2D křivek použijeme Hausdorffovu vzdálenost D_H

$$D_H(B_1, B_2) = \max\left(\max_{a\ \in B_1}\min_{b\in B_2}\|a-b\|_2, \max_{b\in B_2}\min_{a\ \in B_1}\|a-b\|_2\right), \tag{4.0.1}$$

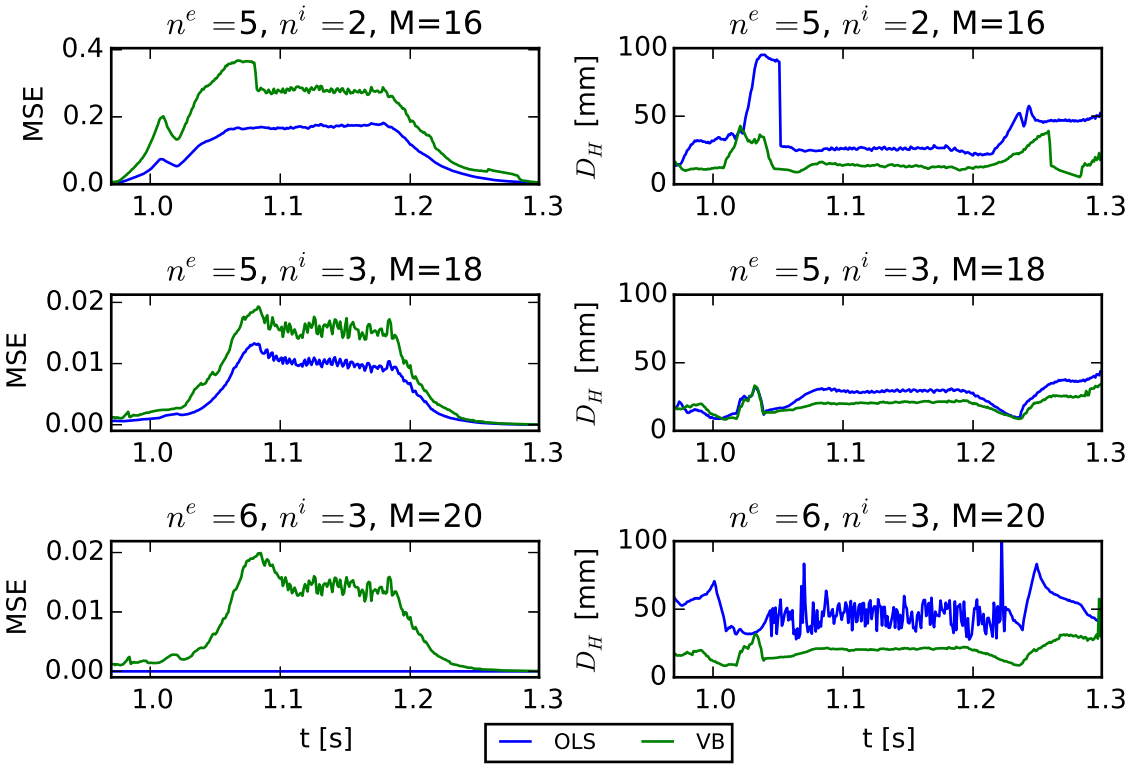
kde $\|.\|_2$ je L_2 norma na $\mathbb{R}^2$,$B_1 = \{a_1, ..., a_n\}$, $B_2 = \{b_1, ..., b_m\}$, $a_i, b_i \in \mathbb{R}^2, \forall i$ jsou diskrétní reprezentace nalezeného okraje plazmatu. Tato veličina je často používaná v rozpoznávání obrazu [9]. Předpis (4.0.1) aplikovaný na srovnávání dvou rekonstruovaných okrajů plazmatu udává maximální odchylku mezi oběma hranicemi. V našem případě budeme Hausdorffovou vzdáleností srovnávat okraj plazmatu spočítaný pomocí EFIT (ten je etalonem) a rekonstruovaný pomocí vlastní metody.

Úspěšnost řešení regresní úlohy (2.1.17) budeme hodnotit středním odhadem čtverce chyby MSE (*mean squared error*), jež je dán jako

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2, \tag{4.0.2}$$

kde $\hat{Y} = A\hat{u}$ je odhad daný řešením $\hat{u}$ rovnice (2.1.17) a Y je převážený vektor měření magnetického toku. Vzhledem k tomu, že nás nejvíce zajímá přesnost výsledné rekonstrukce okraje plazmatu, bude pro nás stěžejní hodnota D_H metriky. Jak bude dále ukázáno, při použití regularizace se hodnota D_H sníží i za cenu zhoršení fitu podle MSE metriky.

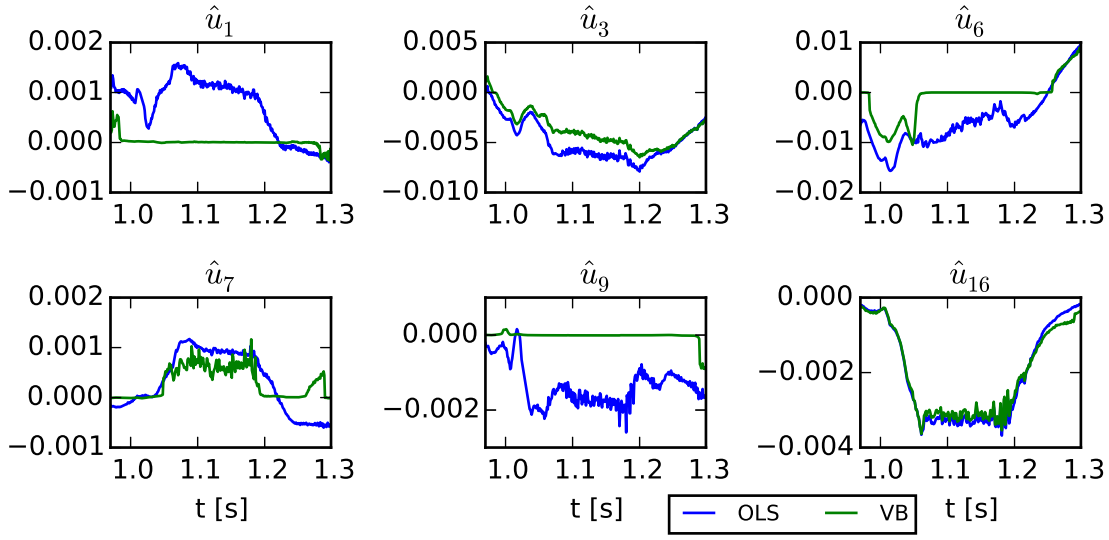
4.1 Srovnání VB a OLS, časový vývoj VB odhadu



Obrázek 4.1.1: Střední kvadratická chyba fitu měření MSE a Hausdorffova vzdálenost D_H nalezené hranice plazmatu a EFITem spočtené hranice v čase t pro modely různých řádů M. Použita byla reálná měření.

Pokud není řečeno jinak, všechny výsledky jsou spočítány na reálných měřeních z výstřelu 9339.

Nejprve byly srovnávány výsledky rekonstrukce při použití VB a OLS odhadu. IVB algoritmus byl inicializován hodnotami z předchozí kapitoly, tedy $a_0 = b_0 = c_0 = d_0 = 10^{10}, \alpha_0 = 10^4, \beta_0 = 1$. Na Obr. 4.1.1 vidíme srovnání výsledků pro modely dekompozice různého řádu, specifikované čísly $n^e = n^e_a = n^e_b, n^i = n^i_a = n^i_b$, viz (2.1.12) a (2.1.13). Ukázán je časový vývoj chyby fitu pro OLS a pro VB řešení a D_H mezi nalezeným okrajem plazmatu a okrajem spočítaným v daný čas pomocí EFIT. Na první pohled je zřejmé, že výsledný tvar plazmatu získaný pomocí regularizovaného VB řešení je EFIT rekonstrukci téměř ve všech okamžicích bližší. A to i přesto, že fit lineárního problému (2.1.17) VB řešením je podle MSE metriky méně přesný než pomocí OLS, což je dáno penalizací velikosti odhadu za cenu menší přesnosti fitu. V případě, kdy $M = 20$, tzn. že fitujeme stejný počet parametrů jako je dostupných pozorování (měření ze sedlových a magnetických cívek), se v MSE statistice projevuje markantní rozdíl mezi OLS A VB řešením. Zatímco OLS řešení je přeparametrizované a fituje měření přesně (což ale nutně neznamená kvalitní fit), VB řešení si zachovává stejnou charakteristiku jako v předchozích případech. Toto pozorujeme i pro modely vyššího řádu než 20, u nichž metodou nejmenších čtverců řešení vůbec nalézt nelze, ale VB metodou ano.



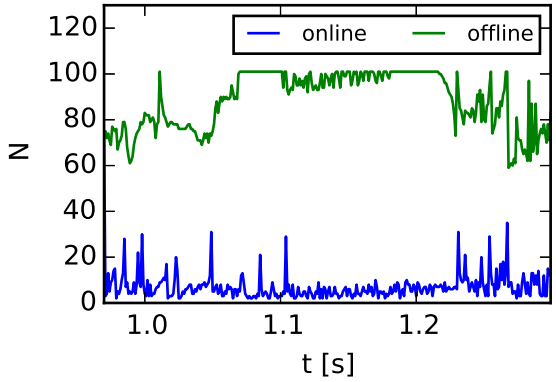
Obrázek 4.1.2: Časový vývoj různých prvků odhadu $\hat{u}$ pro nejmenší čtverce (OLS) a VB odhad.

Na Obr. 4.1.1 lze pozorovat chování obou odhadů během výstřelu. Jak v MSE, tak v D_H pozorujeme přechod plazmatu mezi různými stavy. Víme, že plazma se postupně elonguje a v čase 1.05 s přechází do tvaru s x-bodem, aby se v čase 1.22 s začalo opět deformovat do kruhového tvaru. Oba tyto přechodové jevy se promítají do rapidní změny ve sledovaných veličinách.

Lepší výsledky VB metody, měřené Hausdorffovou vzdáleností D_H, lze vysvětlit menším vlivem singularit toroidálních harmonik, nalézajících se ve středu plazmatu při výpočtu s regularizovaným řešením. Kromě tohoto přínosu nám VB metoda umožňuje zahrnout do modelu i členy vyšších řádů, které mohou skrývat přínos důležitý pro rekonstrukci.

Na Obr. 4.1.2 je srovnání časového vývoje OLS a VB odhadu pro model definovaný $n^e = 5, n^i = 3$. ARD regularizační princip se projevuje „stlačením" některých prvků odhadu k nule, což je dobře vidět srovnáním s hodnotou spočítanou nejmenšími čtverci (viz $i = 1, 6, 7$). Oproti tomu u ostatních prvků odhadu se ARD neuplatní a oba druhy odhadu jsou si podobné. Opět vidíme změnu v pozorovaných veličinách při přechodu plazmatu mezi stavy. Obecně se dá tvrdit, že v určitém stavu plazmatu se struktura VB modelu příliš nemění. Časový vývoj modelu mezi sousedními okamžiky výstřelu je zřejmě pomalý a dá se využít pro optimalizaci IVB algoritmu.

Ta spočívá v předávání výstupů IVB algoritmu $(\hat{u}, \hat{\alpha}, \hat{\beta})$ jako výchozích hodnot pro IVB algoritmus v dalším časovém kroku. Hlavním příspěvkem této myšlenky je zrychlení běhu IVB algoritmu, což potvrzuje graf na Obr. 4.1.3, který byl spočítán na modelu $n^e = 6, n^i = 3$ s použitím reálných měření. Ukazuje počet iterací IVB algoritmu potřebných k dosažení konvergence v jednotlivých okamžicích výstřelu. V případě označeném jako „online" byly odhady předávány, opačný případ je označen jako „offline". V prvním případě stačí ke konvergenci v průměru 7 iterací, v druhém je to 88, navíc byl běh algoritmu uměle omezen na maximálně 100 iterací. Toto zjištění je velmi důležité pro případnou implementaci algoritmu pro výpočty a řízení v reálném čase, během výstřelu. Navíc se ukazuje, že v offline případě IVB algoritmus často konverguje do jiného lokálního minima KLD než v online případě (pokud srovnáváme případy, kdy nebyl IVB algoritmus zastaven po 100 iteracích). To znamená, že



Obrázek 4.1.3: Počet iterací N potřebný k dosažení konvergence IVB algoritmu v čase t podle způsobu výpočtu.

výsledný nalezený vektor $\hat{u}$ má jiný tvar a i výsledná rekonstrukce okraje plazmatu se může lišit. Z toho důvodu se jako bezpečnější jeví online přístup, který zaručí konzistenci výsledků napříč výstřelem.

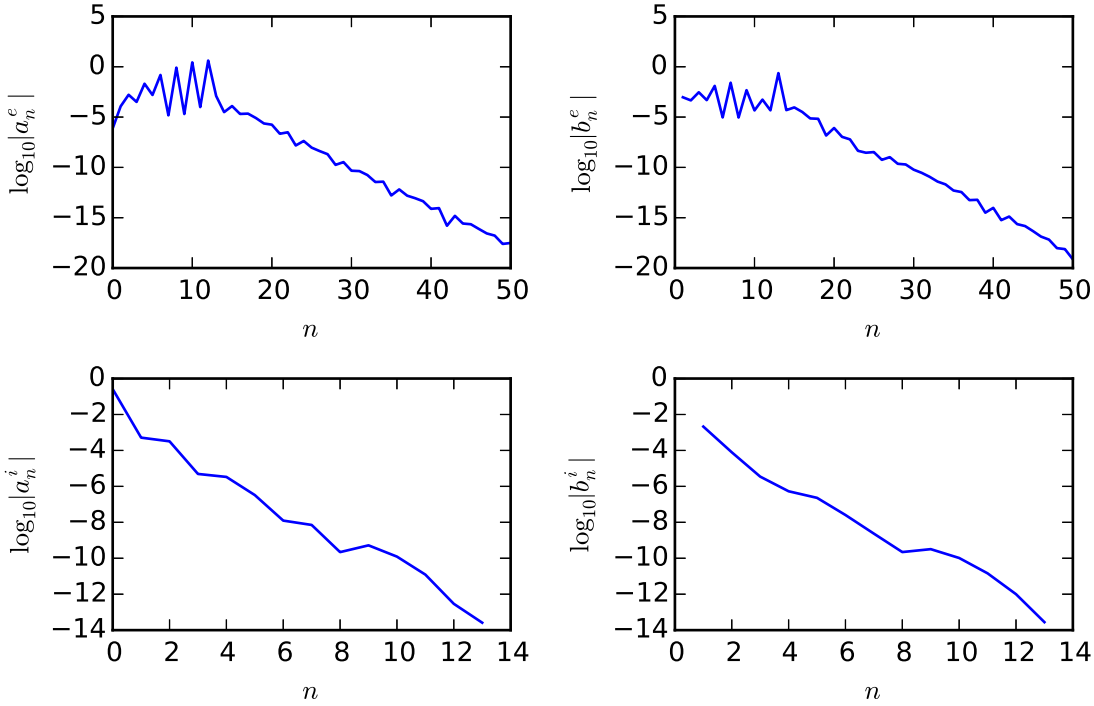
4.2 Výběr optimálního VB modelu

Nyní se pokusíme vybrat nejoptimálnější model pro rekonstrukci okraje plazmatu. I přes použití VB regularizace se totiž ukazuje, že volba odhadovaných koeficientů rozvoje toroidálními harmonikami ovlivňuje kvalitu výsledné rekonstrukce. Takovouto selekci by bylo možné provést iterací přes co nejvíce možných modelů, ale to je vzhledem k výpočetní náročnosti zamítnuto. Místo toho můžeme využít ARD principu VB odhadu.

Nejprve byl proveden experiment, vedoucí k výběru nejinformativnějších prvků odhadu. Hypotéza při jeho sestavování byla taková, že výběrem největších prvků odhadu $\hat{u}$, spočítaných regularizačním VB algoritmem, získáme model s nejinformativnějšími, tedy nejdůležitějšími prvky rozvoje toroidálními harmonikami. Pomocí EFIT byla získána syntetická měření na 64 magnetických a 64 sedlových cívkách. Posléze byl celý výstřel přepočítán s použitím modelu velmi vysokého řádu, parametrizovaným čísly $n^e = 50, n^i = 13, M = 128$. Výstřel byl dále rozdělen na 3 fáze, popsané výše, oddělené časy $t = 1,06$ s a $t = 1,22$ s. V každé fázi pak byly spočítány průměrné velikosti jednotlivých prvků odhadu. Pro druhou fázi výstřelu jsou tyto průměrné velikosti vykresleny na Obr. 4.2.1 podle příslušnosti k jednotlivým sumám rozvoje (2.1.12) a (2.1.13). Zatímco v případě interních toroidálních harmonik, zobrazených ve spodní řadě, je velikost nepřímo úměrná pořadí členu rozvoje v příslušné sumě, u externích tomu tak zřejmě není a jejich velikost klesá zhruba až od řádu 13.

Na základě této analýzy byly vybrány 3 modely řádu $M = 20$, každý pro jeden úsek výstřelu, do kterých bylo vybráno 20 průměrně největších prvků odhadu $\hat{u}$. Tyto modely jsou specifikované v Tab. 4.2.1 pomocí indexů odhadovaných členů rozvoje e_a, e_b, i_a, i_b. Pro názornost je uveden i zápis standardního modelu $n^e = 6, n^i = 3$ v tomto formátu. Jak v tabulce vidíme, struktura největších prvků odhadu se mezi jednotlivými fázemi výstřelu příliš nemění. Zajímavé je zjištění, že interní harmoniky očividně nemají do fitu tak velký příspěvek.

K těmto vybraným modelům bylo přidáno několik dalších s rostoucím řádem M. Srovnání



Obrázek 4.2.1: Průměrná velikost prvků vektoru $\hat{u}$ podle řádu rozvoje n, podrobněji viz (2.1.12) a (2.1.13).

model	e_a	e_b	i_a	i_b
standardní	$(0,1,2,3,4,5,6)$	$(1,2,3,4,5,6)$	$(0,1,2,3)$	$(1,2,3)$
sparse 1	$(2,4,6,7,8,10,11,12,13)$	$(1,3,5,6,7,9,12,13)$	$(0,1)$	(1)
sparse 2	$(2,4,5,6,8,10,12,13)$	$(1,2,3,4,5,7,9,11,13)$	$(0,1)$	(1)
sparse 3	$(2,4,5,6,8,10,12,13)$	$(3,4,5,6,7,11,12,13,14)$	$(0,1)$	(1)

Tabulka 4.2.1: Specifikace řídkých modelů řádu $M = 20$.

výsledků 22 různých modelů, aplikovaných na reálná měření, je v Tab. 4.2.2, mezi kterými jsou i tři řídké modely vybrané výše. Vidíme zde průměrné hodnoty maximálního rozdílu (Hausdorffovy vzdálenosti) mezi okrajem plazmatu získaným vlastní metodou a okrajem spočteným EFITem a počtu iterací nutných ke konvergenci IVB algoritmu, rozdělené podle 3 fází výstřelu. Nejvíce je pro nás zajímavá hodnota D_H v druhé části výstřelu. Ze tří modelů vybraných podle velikosti odhadu je nejlepší model 2.

Zajímavé je to, že přestože konfigurace těchto tří modelů je velmi podobná, jejich výsledky co do přesnosti rekonstrukce okraje plazmatu jsou značně odlišné. Celkově mají největší podobnost s výsledkem EFIT modely s nízkým počtem interních harmonik, konkrétně $n^i = 2$, a to až do řádu $n^e = 12$. Zároveň zjišťujeme, že manuální výběr modelu podle velikosti odhadu vede spíše ke zhoršení situace a je zřejmě lepší počítat s modelem co největšího řádu a spoléhat se na ARD vlastnost VB odhadu. Při rozdílu v rekonstruované hranici proti EFIT hranici větším než 30 mm nastává většinou chyba při identifikaci x-bodu vlivem posunutí sedlového bodu v magnetickém toku mimo nádobu tokamaku. To znamená, že i malá chyba v rekonstrukci magnetického toku může zapříčinit velký rozdíl ve

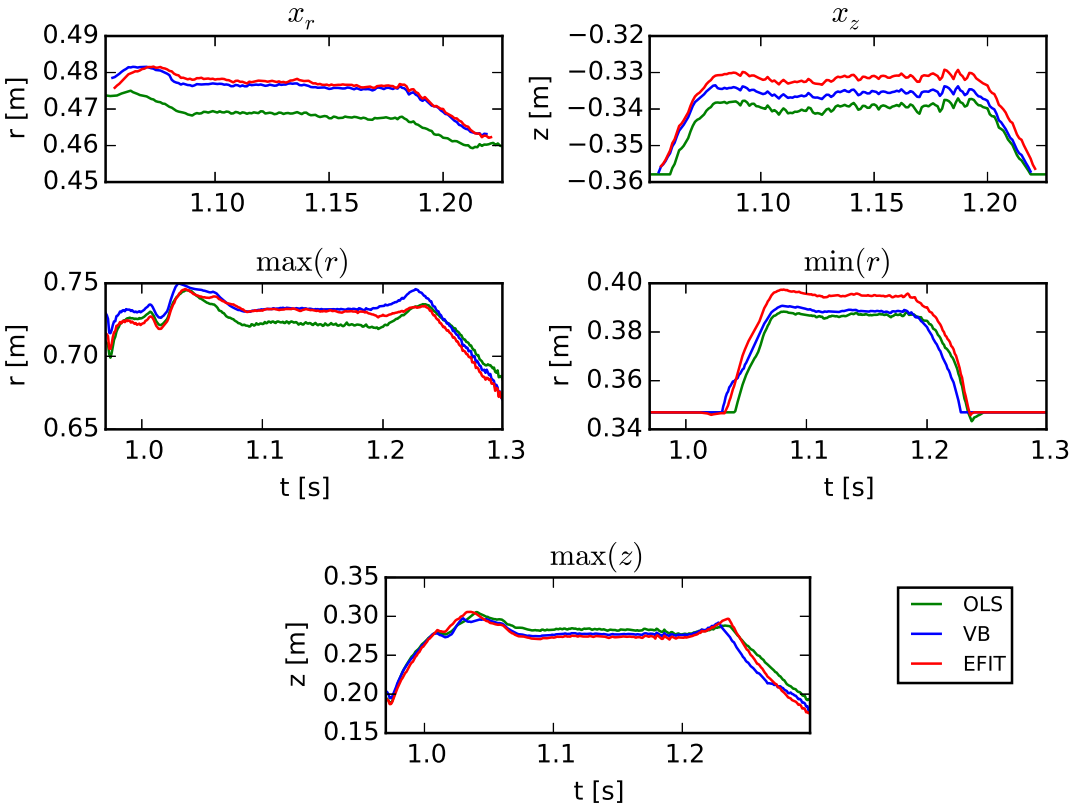
výsledném tvaru hranice. Výsledná hranice je v takovém případě většinou zcela nesmyslná a takové modely nelze dále uvažovat. Vidíme, že se toto chování vyskytuje s rostoucí velikostí parametru n^i.

model	M	(n^e, n^i)	D_{H1} [mm]	D_{H2} [mm]	D_{H3} [mm]	N_1	N_2	N_3
1	16	(5, 2)	19,12	13,11	18,83	6,08	3,42	6,44
2	18	(5, 3)	16,25	20,25	20,72	6,76	5,11	8,74
3	20	sparse1	54,92	28,34	27,38	5,28	3,13	5,17
4	20	sparse2	46,77	22,03	22,90	5,61	2,83	5,47
5	20	sparse3	141,45	136,93	187,69	14,44	7,40	6,20
6	20	(6, 3)	16,19	20,41	22,08	8,49	5,13	8,86
7	20	(7, 2)	21,10	12,22	20,17	5,82	3,65	6,24
8	22	(6, 4)	21,89	19,92	17,29	9,89	8,88	10,93
9	22	(8, 2)	21,08	**12,20**	20,15	5,57	3,45	6,02
10	24	(7, 4)	22,80	19,56	20,48	11,97	9,06	12,34
11	24	(9, 2)	21,08	12,21	20,43	5,47	3,32	5,78
12	26	(8, 4)	75,17	29,81	43,25	14,39	11,91	22,13
13	26	(10, 2)	21,07	12,21	19,87	5,33	3,23	5,33
14	28	(9, 4)	153,12	148,59	130,93	27,39	30,09	31,30
15	28	(11, 2)	122,45	97,41	97,92	18,26	15,70	20,44
16	30	(11, 3)	25,90	22,61	28,39	11,16	4,47	9,61
17	30	(12, 2)	21,08	12,25	19,47	5,01	**3,02**	4,36
18	30	(13, 1)	110,16	128,71	79,69	16,00	13,19	17,14
19	32	(10, 5)	72,74	66,19	66,95	22,81	20,66	42,07
20	40	(12, 7)	107,46	100,12	98,11	66,16	63,73	67,51
21	40	(17, 2)	172,23	156,50	180,68	8,91	6,31	9,87
22	40	(18, 1)	98,31	78,15	64,22	14,49	9,79	10,61

Table 4.2.2: Srovnání výsledků různých modelů, odhadnutých VB metodou, zprůměrovaných přes všechny okamžiky výstřelu. M je řád modelu, (n^e, n^i) model dále specifikuje, přičemž modely označené jako "sparse i" jsou specifikované v Tab. 4.2.1. D_H je Hausdorffova vzdálenost spočtené hranice a EFIT výsledku, N je počet iterací nutný k dosažení konvergence IVB algoritmu, dolní index označuje část výstřelu. Použita byla reálná měření.

Naopak prakticky všechny modely s $n^i = 2$ mají srovnatelnou přesnost kolem 12 mm, což je při výšce plazmatu v řádu 600 mm a šířce 300 mm chyba 2,0%, respektive 4,0%. Model 17 řádu $M = 30$ má také druhou nejrychlejší konvergenci a vzhledem k vysokému počtu odhadovaných harmonik je pro nás dále zajímavý z optimalizačního hlediska. Proto se na podrobnější výsledky rekonstrukce zaměříme právě u něj.

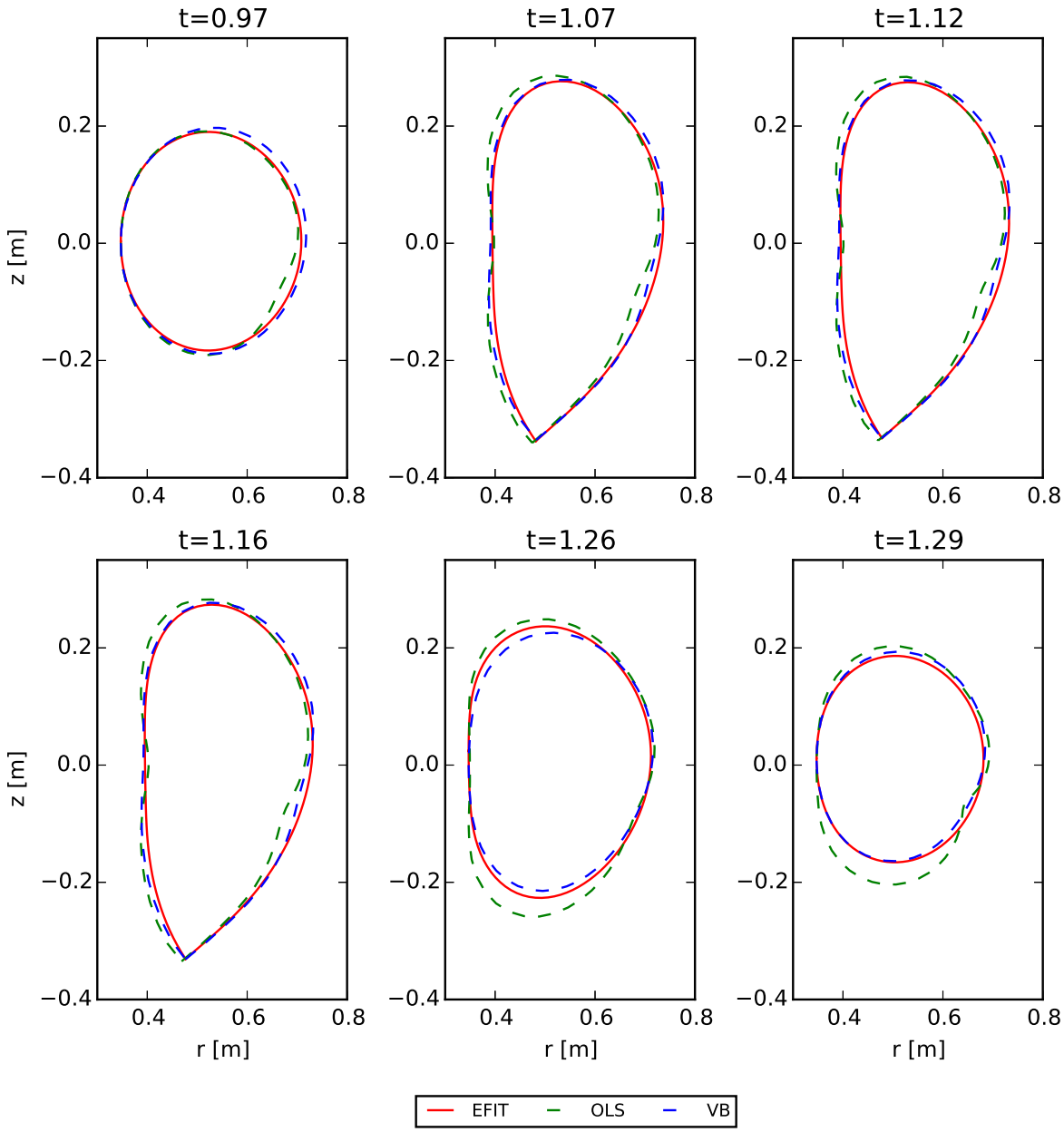
Pro detailnější srovnání rekonstrukce různými způsoby jsou na Obr. 4.2.2 vykresleny časové průběhy různých geometrických parametrů VB modelu 17, výsledků EFIT a OLS odhadu řádu $M = 18$, ukázaném na Obr. 4.1.1, který má ze všech zkoušeným OLS odhadů nejlepší výsledky D_H metriky. Tyto výsledky byly spočítány pomocí reálných měřeních. Největší rozdíl v rekonstrukci VB a OLS metodou vidíme ve výpočtu x-bodu. Zatímco v horizontální poloze (v souřadnici r) je časový průběh polohy x-bodu u VB modelu velmi podobný EFIT, ve vertikální je rozdíl asi 4,5 mm (v prostřední části výstřelu). Přesnost určení polohy x-bodu je přitom zásadní pro kvalitní rekonstrukci ostatních charakteristik



Obrázek 4.2.2: Srovnání geometrie rekonstruovaných okrajů plazmatu pomocí dvou vybraných modelů s rekonstrukcí získanou EFITem. První dva obrázky ukazují polohu x-bodu, další pravý, levý, respektive horní okraj hranice plazmatu.

plazmatu. Zajímavé je, že všechny 3 srovnávané způsoby rekonstrukce zachycují stejné fluktuace ve vertikální poloze x-bodu.

Výsledky OLS a VB rekonstrukce jsou si podobné nebo je VB podobnější výsledkům EFIT. Pro úplnost jsou na Obr. 4.2.3 ukázány různé časové okamžiky, v různých fázích výstřelu, a příslušné okraje plazmatu, rekonstruované EFIT, OLS a VB metodami. Zjevně je vidět vliv regularizace na tvar výsledné hranice při srovnání VB a OLS výsledku, kdy VB odhad tolik nepodléhá deformacím vlivem použitých toroidálních harmonik i přesto, že k VB rekonstrukci je v tomto případě použito o 12 toroidálních harmonik více než k OLS rekonstrukci.



Obrázek 4.2.3: Srovnání rekonstrukcí při použití OLS a VB odhadu s rekonstrukcí EFIT.

Závěr

V první kapitole byl představen princip fungování tokamaku a specifika tokamaku COMPASS. Dále bylo nastíněno fyzikální pozadí problému rekonstrukce plazmatu a zmíněno několik existujících postupů jeho řešení. Nakonec byly předvedeny výsledky jednoho z nich, použitého v dalších částech k validaci vlastních výsledků, spolu s přehledem používaných dat. V této části by stálo za zvážení provedení podrobnější statistické analýzy používaných dat, která by mohla odhalit jejich vzájemné interakce. V současnosti totiž není zřejmé, zda existuje korelace mezi měřeními v sousedních magnetických cívkách či zda je přítomné časové zpoždění mezi různými druhy měření. Zahrnutí těchto jevů by mohlo vést k přesnější definici stavového modelu, odhadovaného pomocí aparátu ze třetí kapitoly.

Druhá kapitola se zabývá analytickým řešením rovnic pro magnetický tok v plazmatu, představených v první kapitole, které se skládá z řady toroidálních harmonik. Je představena numerická metoda, vedoucí k sestavení prostorové reprezentace magnetického toku pomocí měření, popsaných v předchozí kapitole. Dále je popsáno využití této znalosti k identifikaci okraje plazmatu. Ukazuje se, že nejdůležitější podmínkou přesné rekonstrukce je korektní nalezení takzvaného x-bodu, tedy sedlového bodu v magnetickém toku. K jeho nalezení je navrženo použití gradientního sestupu, což se ukázalo jako spolehlivější způsob než původně používaná Newtonova metoda. Finální částí druhé kapitoly je popsání využití Newtonovy metody k identifikaci okraje plazmatu s dříve spočteným x-bodem. Srovnání s původními výsledky ukazuje výrazné zlepšení. Kvalitní rekonstrukce je ale stále podmíněna tím, že sedlový bod v magnetickém toku se nachází na správném místě. Pokud je již rekonstrukce magnetického toku toroidálními harmonikami nepřesná, ani upravená metoda hledání x-bodu nemusí být úspěšná.

Ve třetí kapitole je uvedena metoda odhadu stochastického stavového modelu pro výpočet okraje plazmatu. Konkrétně je odhadován vektor parametrů báze toroidálních harmonik, použitých v předchozí kapitole. Nejprve je zbudován matematický aparát, založený na variačně bayesovské aproximaci směsí neznámých rozdělení. Posléze je navržen tvar apriorních distribucí modelu pro lineární regresi, z nichž je odvozen tvar distribucí aposteriorních. Uveden je iterační algoritmus, který hledá momenty těchto distribucí. Aplikací algoritmu na dostupná data je ukázána jeho regularizační vlastnost, kdy je účinně redukována velikost neinformativních prvků odhadu. Tato skutečnost je výhodná při aplikaci VB aproximace na problém z kapitoly 2. Kromě toho, že použití složitějšího modelu umožňuje přesněji modelovat zákonitosti, skryté v datech, tak vlivem regularizace je výsledný tvar ekvipotenciál magnetického toku pravidelnější (oproti odhadu klasickými nejmenšími čtverci). To se poté příznivě projevuje na nalezeném tvaru okraje plazmatu. Možné zlepšení rekonstrukce v rámci VB aproximace by mohlo přinést implementování modelu, modelujícího složitějším způsobem varianci měření. Ta byla uvažována jako homogenní napříč všemi pozorováními, což jistě nemusí být pravda ani po normalizaci.

V poslední kapitole byly ukázány výsledky implementace celého postupu identifikace

okraje plazmatu, od sestavení magnetického toku toroidálními harmonikami s použitím VB odhadu, přes identifikaci x-bodu až po finální výpočet samotného okraje. Tyto výsledky byly spočteny s použitím originálních měření a srovnány s výsledky další rekonstrukční metody. Byl proveden pokus o určení optimální struktury odhadovaného modelu. Ukázalo se, že nejlepší výsledky co do shody tvaru plazmatu s kontrolní metodou podávají modely s nízkým počtem toroidálních harmonik druhého druhu.

V celé poslední kapitole také narážíme na to, že přesnost fitu regresního modelu a přesnost výsledné rekonstrukce okraje plazmatu jsou spolu sice svázané, ale není mezi nimi přímá úměra. Složitost celého problému a existence několika nelineárních procesů mezi těmito kroky způsobuje to, že úspěšnější regresní metoda nezaručuje lepší přesnost ve tvaru plazmatu. Výsledky je proto nutné srovnávat podle různých geometrických charakteristik. Například srovnávání podle Hausdorffovy vzdálenosti dvou okrajů plazmatu mnoho informace o skutečném rozdílu tvarů zastírá, jelikož uvažuje jen maximální rozdíl na celém obvodu plazmatu. Je ale dobrým globálním měřítkem pro obecné srovnání. Pro komplexnější představu jsou proto u vybraných modelů ukázány další geometrické charakteristiky rekonstrukce.

Dále byla věnována pozornost časovému vývoji struktury odhadovaného modelu. Ta se mění spolu s tím, jak plazma prochází jednotlivými fázemi výstřelu. Během střední fáze výstřelu, kdy je plazma elongováno, je poměrně neměnná. To bylo využito k razantnímu zrychlení výpočtu. Zároveň je zde nutné zmínit, že by bylo vhodné časovému vývoji věnovat další výzkum. Přínos by to mělo pravděpodobně především v přechodových fázích, kdy se zkoumané charakteristiky plazmatu rapidně mění. Zároveň by se daly detekovat případné anomálie během výstřelu, jako například ELMy.

Přes všechny tyto výhrady lze prohlásit, že byl úspěšně aplikován zkoumaný postup rekonstrukce plazmatu na tokamaku COMPASS. Došlo k výraznému zlepšení přesnosti výpočtu jeho okraje a byly navrženy další směry, kterým se zkoumání tohoto problému může ubírat. Po cestě jsme se také seznámili s velice zajímavým variačně bayesovským aparátem pro odhad struktury komplexních stochastických modelů, využitelném na velké škále dalších problémů.

Literatura

[1] Artaud, J. F. – Kim, S. A new free-boundary equilibrium evolution code, FREEBIE. *Europhysics Conference Abstracts.* 2012, 36F, s. P4.023.

[2] Berta, M. – kol. Development of atomic beam probe for tokamaks. *Fusion Engineering and Design.* 2013, 88, s. 2875–2880.

[3] Bishop, C. M. *Pattern recogniton and machine learning.* Springer, 2006.

[4] Bishop, C. M. Variational principal components. In *Artificial Neural Networks, 1999. ICANN 99. Ninth International Conference on (Conf. Publ. No. 470)*, 1, s. 509–514. IET, 1999.

[5] Blum, J. – kol. Reconstruction of the equilibrium of the plasma in a Tokamak and identification of the current density profile in real time. *Journal of Computational Physics.* 2012, 231, s. 960–980.

[6] Bohm, P. – kol. Laser system for high resolution Thomson scattering diagnostics on the COMPASS tokamak. *Review of Scientific Instruments.* 2010, 81, s. 10D511.

[7] Faugeras, B. et al. 2D interpolation and extrapolation of discrete magnetic measurements with toroidal harmonics for equilibrium reconstruction in a Tokamak. *Plasma Physics and Controlled Fusion.* 2014, 56, 11, s. 114010.

[8] Golub, G. H. – Hansen, P. C. – O'Leary, D. P. Tikhonov regularization and total least squares. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications.* 1999, 21, 1, s. 185–194.

[9] Huttenlocher, D. P. et al. Comparing images using the Hausdorff distance. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on.* 1993, 15, 9, s. 850–863.

[10] Janky, F. – kol. Upgrade of the COMPASS tokamak real-time control system. *Fusion Engineering and Design.* 2014, 89, s. 186–194.

[11] Jardin, S. *Computational methods in plasma physics.* CRC Press, 2010.

[12] Kikuchi, M. – Lackner, K. – Tran, M. *Fusion Physics.* IAEA, 2012.

[13] Lao, L. L. et al. Reconstruction of Current Profile Parameters and Plasma Shapes in Tokamaks. *Nuclear Fusion.* 1985, 25, 11, s. 1611–1622.

[14] Lebedev, N. N. – Silverman, R. A. *Special functions and their applications.* Courier Corporation, 1972.

[15] Nocedal, J. – Wright, S. *Numerical Optimization.* Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer New York, 2000. Dostupné z: <https://books.google.cz/books?id=epc5fXOlqRIC>. ISBN 9780387987934.

[16] Pánek, R. et al. Status of the COMPASS tokamak and characterization of the first H-mode. *Plasma Physics and Controlled Fusion.* 2015, 58, 1, s. 014015.

[17] Pánek, R. – kol. Reinstallation of the COMPASS-D tokamak in IPP ASCR. *Czechoslovak Journal of Physics.* 2006, 56, s. 125–137.

[18] Saad, D. – kol. *On-Line Learning in Neural Networks.* Cambridge University Press, 2009.

[19] Sankov, A. A. – kol. Algorithm for reconstruction of the shape of the plasma column cross section in the KMT facility. *Russian Physics Journal.* 2012, 55, s. 791–798.

[20] Sato, M.-A. Online model selection based on the variational Bayes. *Neural Computation.* 2001, 13, 7, s. 1649–1681.

[21] Segura, J. – Amparo, G. Evaluation of toroidal harmonics. *Computer Physics Communications.* 2000, 124, s. 104–122.

[22] Shafranov, V. On magnetohydrodynamical equilibrium configurations. *Soviet Phys. JETP.* 1958, 6.

[23] Tibshirani, R. Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological).* 1996, s. 267–288.

[24] Urban, J. et al. Validation of equilibrium tools on the COMPASS tokamak. *Fusion Engineering and Design.* 2015, 96-67, s. 998–1001.

[25] Weinzettl, V. – kol. Overview of the COMPASS diagnostics. *Fusion Engineering and Design.* 2011, 86, s. 1227–1231.

[26] Šmídl, V. – Quinn, A. *The variational Bayes method in signal processing.* Springer, 2006.

Příloha A

Použitá rozdělení pravděpodobnosti a speciální funkce

A.1 Gaussovo n-rozměrné rozdělení

Náhodný vektor X má Gaussovo (normální) rozdělení pravděpodobnosti se střední hodnotou $\mu \in \mathbb{R}^n$, symetrickou a pozitivně definitní kovarianční maticí $\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}$, je-li jeho hustota pravděpodobnosti pro $x \in \mathbb{R}^n$ funkce tvaru

$$p(x|\mu,\Sigma) = \mathcal{N}(\mu,\Sigma) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right). \tag{A.1.1}$$

Někdy je používán tvar zápisu s „přesnostní“ (angl. *precision*) maticí $\Lambda = \Sigma^{-1}$. Použití je vhodné při komplexnějších manipulacích. První a druhý moment rozdělení mají tvar

$$\mathbb{E}[X] = \mu, \tag{A.1.2}$$

$$\mathbb{E}[XX^T] = \Sigma + \mu\mu^T. \tag{A.1.3}$$

Kromě těchto dvou základních momentů nás zajímají další vlastnosti normálního rozdělení, které nacházejí využití při odvozování vztahů ve VB aproximaci.

$$\mathbb{E}[X^TX] = \sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left[X_i^2\right] = \mu^T\mu + \mathrm{Tr}(\Sigma), \tag{A.1.4}$$

$$\mathrm{H}[X] = \frac{1}{2}\ln|\Sigma| + \frac{n}{2}(1+\ln 2\pi). \tag{A.1.5}$$

Zde Tr(.) je stopa argumentu a $\mathrm{H}[X]$ je entropie veličiny X s hustotou pravděpodobnosti $p(x)$, daná vztahem

$$\mathrm{H}[X] = \mathbb{E}[-\ln p(x)]. \tag{A.1.6}$$

A.2 Gamma rozdělení

Dále uveďme v tomto textu používanou konvenci zápisu Gamma rozdělení jednorozměrné náhodné veličiny X s parametry $\alpha, \beta \in \mathbb{R}^+$. Jeho hustota pravděpodobnosti má pro $x \in \mathbb{R}^+$ tvar

$$p(x|\alpha,\beta) = \mathcal{G}(\alpha,\beta) = \frac{\beta^\alpha x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}\exp(-\beta x). \tag{A.2.1}$$

Zde $\Gamma(.)$ je gamma funkce (A.3.1). Jeho důležité momenty a střední hodnoty jsou

$$\mathbb{E}[X] = \frac{\alpha}{\beta}, \tag{A.2.2}$$

$$\mathrm{var}(X) = \frac{\alpha}{\beta^2}, \tag{A.2.3}$$

$$\mathbb{E}[\ln X] = \psi(a) - \ln b, \tag{A.2.4}$$

$$\mathrm{H}[X] = \ln \Gamma(a) - (a-1)\psi(a) - \ln b + a. \tag{A.2.5}$$

Zde $\psi(.)$ je digamma funkce (A.3.3).

A.3 Speciální funkce

Gamma funkce je reálná funkce, definovaná pro $x \in \mathbb{R}^+$ jako

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt. \tag{A.3.1}$$

Generalizací gamma funkce do více dimenzí je **n-rozměrná gamma funkce**. Její předpis je dán produktem jednorozměrných gamma funkcí.

$$\Gamma_n(x) = \pi^{(n-1)/2} \prod_{i=1}^{n} \Gamma\left(x + \frac{1-i}{2}\right). \tag{A.3.2}$$

Digamma funkce je definována jako derivace logaritmu gamma funkce, tedy

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}. \tag{A.3.3}$$

Její integrální vyjádření má pro $x \in \mathbb{R}^+$ tvar

$$\psi(x) = \int_0^\infty \left(\frac{e^{-t}}{t} - \frac{e^{-xt}}{1-e^{-t}} \right) dt. \tag{A.3.4}$$

Gaussova hypergeometrická funkce ${}_2F_1(a,b;c;x)$ je definována jako [14]

$${}_2F_1(a,b;c;x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\,\Gamma(c-b)} \int_0^1 t^{b-1} (1-t)^{c-b-1} (1-tx)^{-a}\, dt, \tag{A.3.5}$$

kde $0 < b < a, c, x \in \mathbb{R}$.

Úplný eliptický integrál prvního druhu $K(m)$ je pro $m \in \mathbb{R}$ definován jako

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \left(1 - m \sin^2(t)\right)^{-1/2} dt. \tag{A.3.6}$$

Úplný eliptický integrál druhého druhu $E(m)$ je pro $m \in \mathbb{R}$ definován jako

$$E(m) = \int_0^{\pi/2} \left(1 - m \sin^2(t)\right)^{1/2} dt. \tag{A.3.7}$$

A.4 Přidružené Legendrovy funkce $P_\nu^\mu(x), Q_\nu^\mu(x)$

Přidružené Legendrovy funkce prvního a druhého druhu [14] patří do třídy takzvaných sférických harmonik. Jsou řešením diferenciální rovnice

$$(1-x^2)u'' - 2xu' + \left[\nu(\nu+1) - \frac{\mu^2}{1-x^2}\right] u = 0. \tag{A.4.1}$$

Jsou definovány mnoha způsoby, v oboru $x > 1$ je lze vyjádřit analytickým předpisem tvaru

$$\begin{aligned} P_\nu^\mu(x) &= \frac{\Gamma(\nu+\mu+1)}{2^\mu \Gamma(\mu+1)\Gamma(\nu-\mu+1)} \left(x^2-1\right)^{\mu/2} \\ &\quad {}_2F_1\left(\mu-\nu, 1+\nu+\mu; \mu+1; \frac{1-x}{2}\right), \end{aligned} \tag{A.4.2}$$

$$\begin{aligned} Q_\nu^\mu(x) &= \frac{(-1)^\mu \sqrt{\pi}\Gamma(\nu+\mu+1)}{2^{\nu+1}\Gamma\left(\nu+\frac{3}{2}\right) x^{\nu+\mu+1}} \left(x^2-1\right)^{\mu/2} \\ &\quad {}_2F_1\left(\frac{\mu+\nu+2}{2}, \frac{1+\nu+\mu}{2}; \nu+\frac{3}{2}; \frac{1}{x^2}\right), \end{aligned} \tag{A.4.3}$$

platným pro $\mu \in \mathbb{N}_0, \nu \in \mathbb{R}$, kde ${}_2F_1(a,b;c;x)$ je Gaussova hypergeometrická funkce (A.3.5).

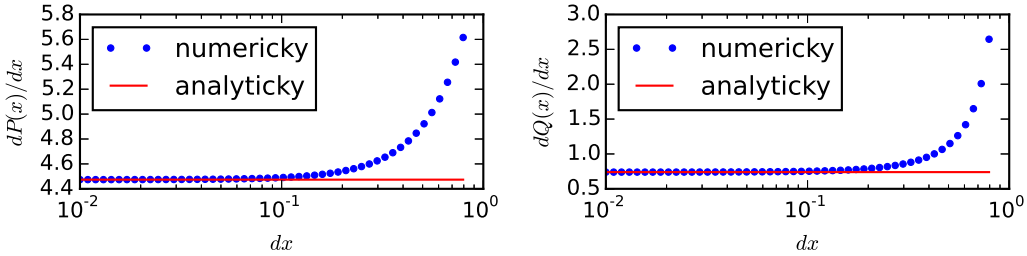
Toroidálními harmonikami budeme označovat přidružené Legendrovy funkce s parametry $\mu = 1$ a $\nu = n - \frac{1}{2}, n \in \mathbb{N}_0$, vyčíslené v bipolárních souřadnicích (A.5.2) jako

$$\begin{aligned} P^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) &= \frac{\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right)}{2\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right)} \sinh(\zeta) \\ &\quad {}_2F_1\left(\frac{3}{2}-n, n+\frac{3}{2}; 2; \frac{1-\cosh(\zeta)}{2}\right), \end{aligned} \tag{A.4.4}$$

$$\begin{aligned} Q^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) &= -\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right)}{2^{n+\frac{1}{2}}\Gamma(n+1)\cosh^{n+\frac{3}{2}}(\zeta)} \sinh(\zeta) \\ &\quad {}_2F_1\left(\frac{n}{2}+\frac{5}{4}, \frac{n}{2}+\frac{3}{4}; n+1; \frac{1}{\cosh^2(\zeta)}\right). \end{aligned} \tag{A.4.5}$$

Toroidální harmoniky prvního druhu $P^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta))$ jsou rovny nule pro $\zeta = 0$ a pro $|\zeta| \to \infty$ rostou do $+\infty$. Toroidální harmoniky druhého druhu pak mají v bodě nula singularitu a pro $|\zeta| \to 0$ klesají k $-\infty$, naopak pro $|\zeta| \to \infty$ se limitně blíží nule. Na vzorce (A.4.4),(A.4.5) se odkazujeme v ostatních částech této práce. Zároveň slouží jako základ k výpočtu derivací podle ζ, které mají podle [7] tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\zeta} P^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) &= \left(n-\frac{1}{2}\right)\frac{\cosh(\zeta)}{\sinh(\zeta)} P^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) - \\ &\quad - \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{1}{\sinh(\zeta)} P^1_{n-\frac{3}{2}}(\cosh(\zeta)), n > 0, \end{aligned} \tag{A.4.6}$$



Obrázek A.4.1: Srovnání hodnoty analytické a numerické derivace toroidálních harmonik $P^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)), Q^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta))$ pro $\zeta = 1, n = 2$. Vidíme, že s klesající velikostí dx (diference) numerická derivace konverguje k analytickému výsledku.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\zeta}P^1_{-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) &= -\frac{1}{2}\frac{\cosh(\zeta)}{\sinh(\zeta)}P^1_{-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)) - \\ &\quad -\frac{1}{2}\frac{1}{\sinh(\zeta)}P^1_{\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta)).\end{aligned} \tag{A.4.7}$$

Totožné vztahy platí pro $Q^1_{n-\frac{1}{2}}(\cosh(\zeta))$. Ověření těchto vztahů numerickou derivací je na Obr. A.4.1.

A.5 Bipolární souřadnice

K řešení Laplaceovy rovnice $\nabla^2\psi = 0$ pomocí Legendrových funkcí vede přechod od kartézských souřadnic (r, z) k bipolárním souřadnicím (ζ, η) [14]. Systém bipolárních souřadnic je definován dvěma póly

$$F_0 = (-r_0, z_0), F_1 = (r_0, z_0), r_0 > 0. \tag{A.5.1}$$

Souřadnice $\zeta \in \mathbb{R}$ je rovna přirozenému logaritmu poměru vzdáleností bodu $x = (r, z)$ od pólů,

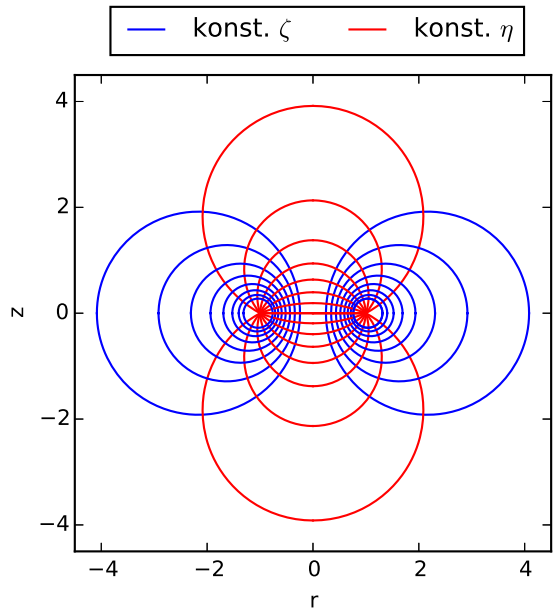
$$\zeta = \ln\frac{\|x - F_0\|}{\|x - F_1\|} = \ln\frac{d_1}{d_2}. \tag{A.5.2}$$

Souřadnice $\eta \in \langle -\pi, 0) \cup (0, \pi\rangle$ je definována jako úhel, který svírají úsečky F_0x a xF_1. Podle kosinové věty

$$\eta = \operatorname{sgn}(z - z_0)\arccos\left(\frac{d_1^2 + d_2^2 - 4r_0^2}{2d_1d_2}\right) = \operatorname{sgn}(z - z_0)\arccos\left(\frac{a}{b}\right). \tag{A.5.3}$$

Izolinie ζ při zafixovaném η jsou v (r, z) kružnice se středem posouvajícím se na ose r ve výšce z_0, pro $\zeta < 0$ nalevo od osy z, pro $\zeta > 0$ napravo. S rostoucí velikostí $|\zeta|$ se poloměr kružnic zvětšuje, body s $\zeta = 0$ leží na ose z. Izolinie η jsou kružnice se středem na ose z, ležícím podle polarity η nad nebo pod osou r. S rostoucí hodnotou η se střed izolinie přibližuje $(0, z_0)$ a poloměr kružnice se zmenšuje. Izolinie bipolárních souřadnic v (r, z) jsou zobrazeny na Obr. A.5.1.

Vztah pro zpětný převod souřadnic je dán rovnicemi



Obrázek A.5.1: Izolinie bipolárních souřadnic (ζ, η) kolem pólů $(-1, 0)$ a $(1, 0)$, vykreslené v kartézských souřadnicích (r, z).

$$r = \frac{r_0 \sinh \zeta}{\cosh \zeta - \cos \eta}, \tag{A.5.4}$$

$$z = z_0 + \frac{r_0 \sin \eta}{\cosh \zeta - \cos \eta}. \tag{A.5.5}$$

Parciální derivace bipolárních souřadnic podle r a z jsou potřebné k výpočtu magnetického pole $B(r, z)$ a k výpočtu gradientu $\nabla\psi$. Nejprve spočteme pomocné vzorce.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial d_1}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r}\sqrt{(r+r_0)^2 + (z-z_0)^2} = \frac{r+r_0}{d_1}, \\
\frac{\partial d_2}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r}\sqrt{(r-r_0)^2 + (z-z_0)^2} = \frac{r-r_0}{d_2}, \\
\frac{\partial d_i}{\partial z} &= \frac{z-z_0}{d_i}, i = 1, 2, \\
\frac{\partial a}{\partial r} &= -4r, \\
\frac{\partial a}{\partial z} &= -4r(z-z_0), \\
\frac{\partial b}{\partial r} &= \frac{2(r+r_0)d_2}{d_1} + \frac{2(r-r_0)d_1}{d_2}, \\
\frac{\partial b}{\partial z} &= \frac{2(z-z_0)}{d_1 d_2}\left(d_2^2 + d_1^2\right).
\end{aligned} \tag{A.5.6}$$

Ty využijeme dále a z předpisů (A.5.2) a (A.5.3) získáme rovnice

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \zeta}{\partial r} &= \frac{d_2}{d_1}\frac{\frac{\partial d_1}{\partial r}d_2 - d_1\frac{\partial d_2}{\partial r}}{d_2^2} = \frac{r+r_0}{d_1^2} - \frac{r-r_0}{d_2^2}, \\
\frac{\partial \zeta}{\partial z} &= \frac{d_2}{d_1}\frac{\frac{\partial d_1}{\partial z}d_2 - d_1\frac{\partial d_2}{\partial z}}{d_2^2} = (z-z_0)\left(\frac{1}{d_2^2} - \frac{1}{d_2^2}\right),
\end{aligned}
\tag{A.5.7}
$$

a

$$
\frac{\partial \eta}{\partial r} = -\operatorname{sgn}(z-z_0)\frac{1}{\sqrt{1-\frac{a^2}{b^2}}}\frac{\frac{\partial a}{\partial r}b - a\frac{\partial b}{\partial r}}{b^2}, \tag{A.5.8}
$$

$$
\frac{\partial \eta}{\partial z} = -\operatorname{sgn}(z-z_0)\frac{1}{\sqrt{1-\frac{a^2}{b^2}}}\frac{\frac{\partial a}{\partial z}b - a\frac{\partial b}{\partial z}}{b^2}. \tag{A.5.9}
$$