SMILES L2データ処理における逆問題の解析手法

眞子直弘[1]， 鈴木睦[2]， 佐野琢己[2]， 光田千紘[3]， 今井弘二[4]，
山田道夫[5]， 竹広真一[5]， 塩谷雅人[6]

[1]千葉大/CEReS , [2]JAXA/ISAS , [3]富士通FIP , [4]とめ研究所, [5]京大数理研, [6]京大生存圏研

2013年 2月15日
平成24年度宇宙科学情報解析シンポジウム

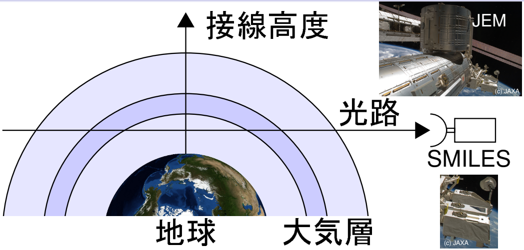
内容

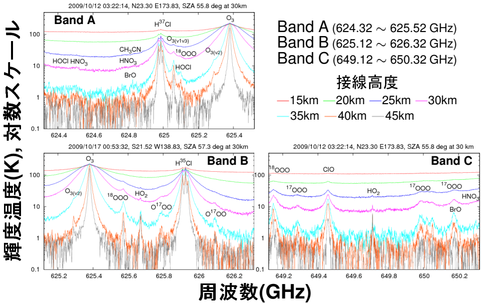
SMILESの概要

超伝導サブミリ波リム放射サウンダ

Superconducting Submilimeter-Wave Limb-Emission Sounder

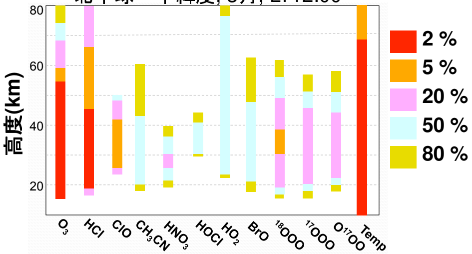
- 超伝導ミクサによる高感度観測
- 太陽非同期軌道での観測
- ～600GHzに3つの観測バンド
- O_3, HCl, ClO, HOCl, HO_2, BrO, etc.
- 大気観測：2009/10/10 – 2010/04/21



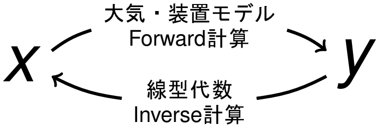


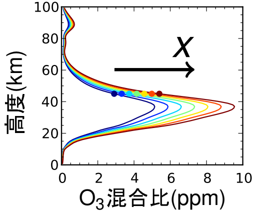
リトリーバル精度（1スキャン）

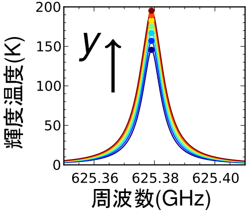
北半球・中緯度, 3月, LT12:00

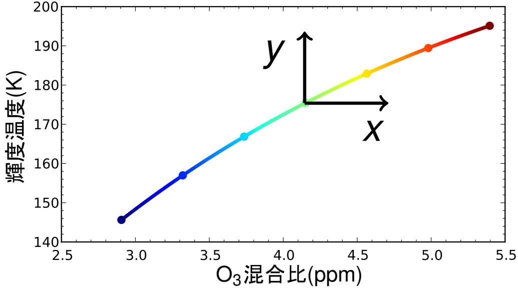


SMILES L2データ処理









Forwardモデル

$$y = F(x) + \epsilon$$

x ⋯ 各高度の分子混合比(未知数)

y ⋯ 各接線高度の観測輝度温度

F ⋯ Forwardモデル

ϵ ⋯ 観測ノイズ

線型近似（Taylor展開）

$$y = F(x_a) + K(x - x_a) + \epsilon$$

x_a ⋯ 先験値(アプリオリ)

K ⋯ $\dfrac{\partial F}{\partial x}$

実際の解析では, x,x_aはn 行ベクトル, y, ϵはm 行ベクトル, K は$m \times n$ 行列

$n \sim 250, m \sim 60,000$

不良設定問題

逆問題

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_a) + \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$$

既知数**y**から未知数**x**を求める

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_a + \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_a)) \ ?$$

特異値分解

$$\mathbf{K} = \mathbf{U\Sigma V}^T$$
$$\mathbf{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_p, 0, \cdots)$$
$$\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{I} \ （直交）$$

- 独立な方程式の数$\cdots$
  行列のランク＝正特異値の数(p)

⇒ 一般的なLimb観測では$m > n > p$

⇒ 条件式が不足（不良設定問題）

More-Penroseの一般逆行列

$$\mathbf{K}^\dagger = \mathbf{V}_p\mathbf{\Sigma}_p^{-1}\mathbf{U}_p^T$$

最小二乗法

$$\chi^2(x) = \sum_i \frac{(y_i - F_i(x))^2}{\sigma_i^2}$$
$$\chi^2(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}))^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}))$$

- 不良設定問題→ χ^2が小さい解は無数にあり，一意に求まらない
- 別の拘束条件（c）が必要

Cost Function

$$M(\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}) + c(\mathbf{x})$$

χ^2とcを同時最小化 (OEM,TRM,MEM)

最適推定法 (Optimal Estimation Method: OEM)

OEMの拘束条件

$$c_{\mathrm{OEM}}(x) = \frac{(x - x_a)^2}{\sigma_a^2}$$

$$c_{\mathrm{OEM}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$$

Bayseの定理より最大事後確率推定法によって導かれる

Bayesの定理

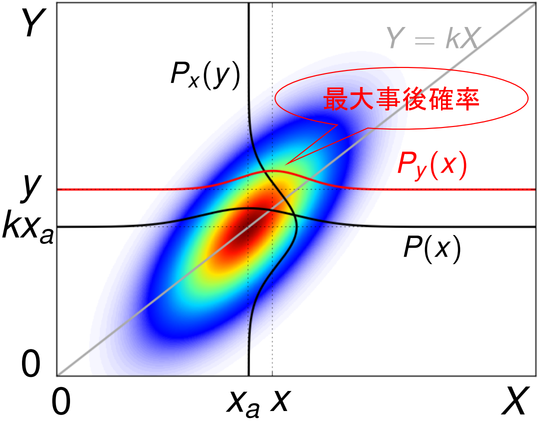
$$P_y(x) = \frac{P_x(y)P(x)}{P(y)}$$

$$P(x) = \frac{1}{\sigma_a\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - x_a)^2}{2\sigma_a^2}\right]$$

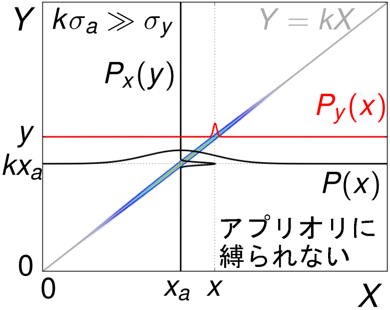
$$P_x(y) = \frac{1}{\sigma_y\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(y - kx)^2}{2\sigma_y^2}\right]$$

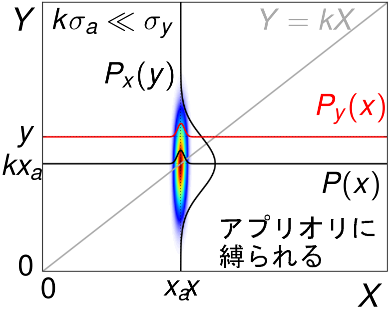
事後確率

$$P_y(x) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{(x - x_a)^2}{\sigma_a^2} + \frac{(y - kx)^2}{\sigma_y^2}\right)\right]$$



OEMの分散共分散行列（$\mathbf{S}_a$）について

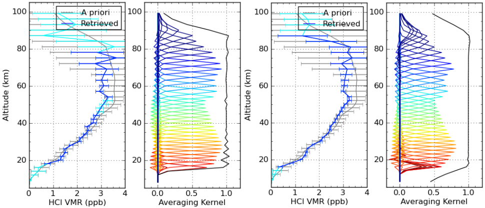




高度相関

$$[S_a]_{i,j} = \sigma_a^2 \exp\left(-\frac{|z_i - z_j|}{z_s}\right)$$

特に, $[S_a]_{i,j} = \sigma_a^2 \alpha^{|i-j|}$の形である場合,
$\mathbf{S}_a^{-1}$は単位行列&2次差分行列の線型結合
1次差分行列$\mathbf{L}_1$: $[\mathbf{L}_1\mathbf{x}]_i = x_i - x_{i-1}$
2次差分行列$\mathbf{L}_2$: $[\mathbf{L}_2\mathbf{x}]_i = x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i$
高度相関を入れると, $\mathbf{x} - \mathbf{x}_a$およびその2次差分に拘束条件が課される



(左)高度相関なし, (右)10km高度相関あり

チコノフ正則化法 (Tikhonov Regularization Method: TRM)

TRMの拘束条件

- アプリオリとの差$(\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)$ が小さくなるように拘束する

$$
\begin{aligned}
c_{\mathrm{TRM}}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)^T \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L} (\mathbf{x}-\mathbf{x}_a) \\
\mathbf{L} &\cdots \text{正則化行列} \\
\alpha &\cdots \text{正則化パラメータ}
\end{aligned}
$$

正則化行列

- 直接的に小さくする$\Rightarrow \mathbf{L}=\mathbf{I}\ (=\mathbf{L}_0)$
- 間接的に小さくする$\Rightarrow \mathbf{L}=\mathbf{L}_n$
  - $\mathbf{L}_n$はn次の差分行列
  - 次数が大きいほど高度相関大（高度分解能悪くなる）

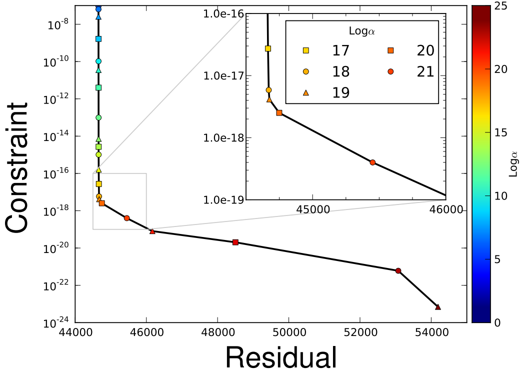
正則化パラメータ

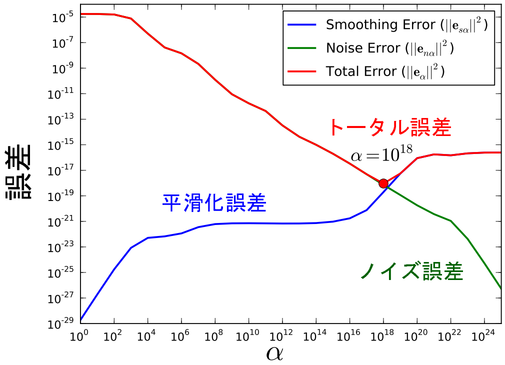
$c'_{\mathrm{TRM}} = c_{\mathrm{TRM}}/\alpha$とおくと, Cost Functionは
$M(\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}) + \alpha c'_{\mathrm{TRM}}(\mathbf{x})$
のように書ける. 正則化パラメータαは, Residual χ^2とConstraint c'_{TRM} のバランス調整の役割を果たす

- αが小さ過ぎる$\Rightarrow$ ノイズが多い解
- αが大きすぎる$\Rightarrow$ 観測に無関係な解
- αが適度$\Rightarrow$ 適度に平滑化された解

- TRMでは正則化パラメータα の決定が非常に重要

TRMの正則化パラメータの決め方





- Residual $\cdots$ αの単調増加関数
- Constraint $\cdots$ αの単調減少関数
- Residual vs. Constraint曲線(L字型)
  $\Rightarrow$ L字の角$\cdots$両者のバランス点
- 1点毎にリトリーバルを行う
  $\Rightarrow$ 多大な計算時間が必要

- 平滑化誤差$\cdots$ αの単調増加関数
- ノイズ誤差$\cdots$ αの単調減少関数
- 平滑化誤差, ノイズ誤差は一般化特異値分解で求められる
  $\Rightarrow$ 高速な見積りが可能

エントロピー最大化法 (Maximum Entropy Method: MEM)

MEMの拘束条件

$$c_{\mathrm{MEM}}(\mathbf{x}) = -\alpha S(\mathbf{x})$$

$$S(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{n} q_i(\mathbf{x}) \ln [q_i(\mathbf{x})]$$

S ⋯ Shannonの情報量

α ⋯ 正則化パラメータ

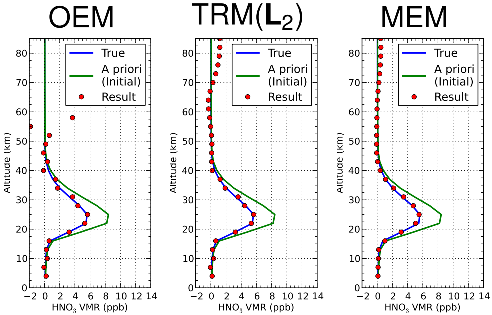
2次のMEM

$$q_i = p_i \Big/ \sum_{i=1}^{n} p_i$$

$$p_i = x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i \text{（2次差分）}$$
$$+ 2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta \text{（正定数）}$$
$$> 0$$

- パラメータ(q_i)は規格化されている
- アプリオリ$(\mathbf{x}_a)$への依存度が小さい
- αの決め方はTRMと同じ
- Toyモデルを使ったテストでは TRM（$\mathbf{L}_2$）とほぼ同様の結果が得られている

HNO_3リトリーバルテスト結果



SMILESの逆解析方法

ハイブリッド法（OEM+TRM）

$$c_{hyb}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)^T\mathbf{S}_a^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_a) + (\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)^T\mathbf{L}^T\mathbf{S}_r^{-1}\mathbf{L}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)$$

$\mathbf{S}_r$: 正則化の"分散共分散行列"

- MLSと同様の手法
  - MLSでは$\mathbf{S}_r = \alpha^{-1}\mathbf{I}$, $\mathbf{L} = \mathbf{L}_2$
- SMILESでは$\mathbf{S}_r = \alpha^{-1}\mathbf{S}_a$
  - $\mathbf{S}_a$を使ってパラメータを規格化
  - $\alpha = 1$, $\mathbf{L} = \mathbf{I}$ならばOEMそのもの
- O_3, HCl, HNO_3に適用
  - $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1$
  - O_3, HCl $\cdots$ $\alpha = 10$
  - HNO_3 $\cdots$ $\alpha = 100$
  - OEMの高度相関も入れる(10km)
- 解の不確定性

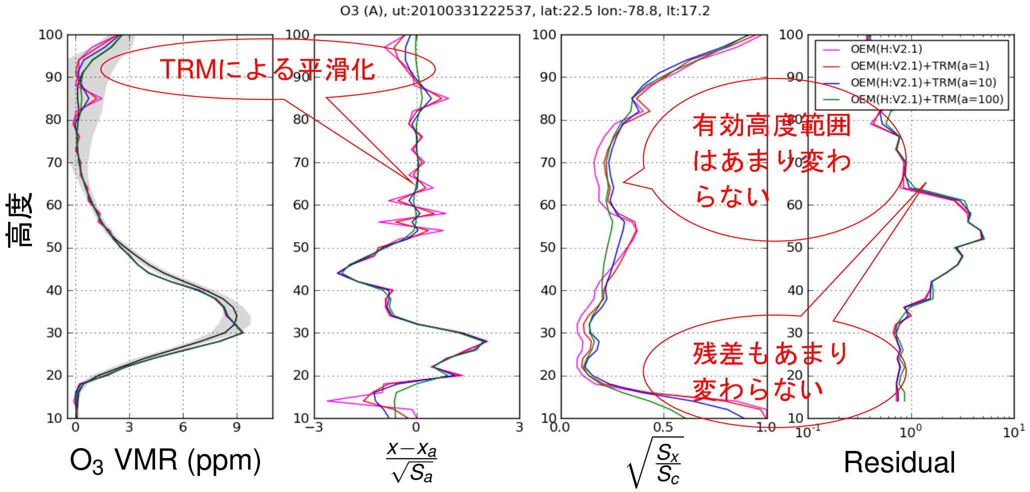
  $$\mathbf{S}_x = \left[\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{L}^T\mathbf{S}_r^{-1}\mathbf{L} + \mathbf{K}^T\mathbf{S}_y^{-1}\mathbf{K}\right]^{-1}$$

  $\Rightarrow$ 拘束条件が増えるほど逆数が増加
  $\Rightarrow$ 不確定性は小さくなる
- 解の収束判定
  現状では解の変動が解の不確定性よりも小さいことが条件
  $\Rightarrow$ TRM導入により収束率は悪化
- 有効高度範囲
  $\mathbf{S}_x$と測定誤差以外の成分,

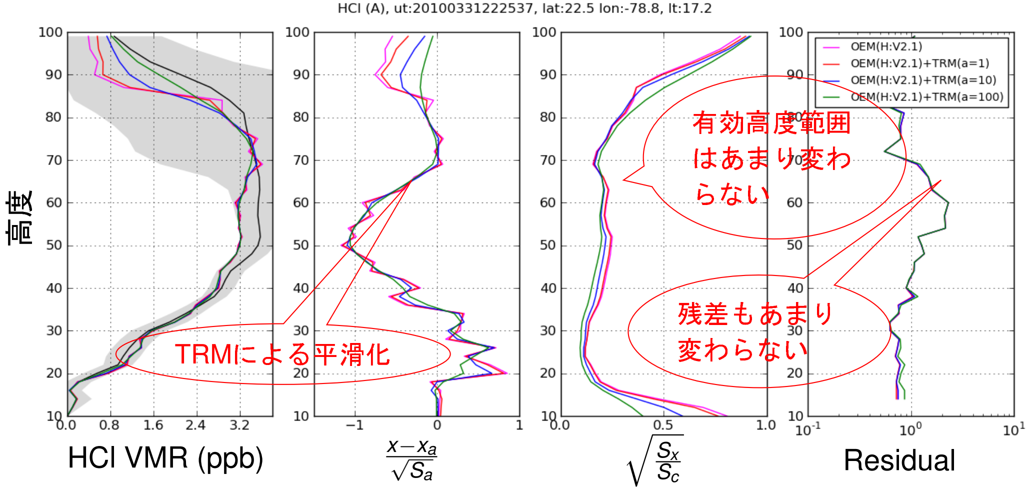
  $$\mathbf{S}_c = \left[\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{L}^T\mathbf{S}_r^{-1}\mathbf{L}\right]^{-1}$$

  の対角成分を比較し, $S_x/S_c < 0.25$である範囲を有効とする
  $\Rightarrow$ この方針でうまくいっている

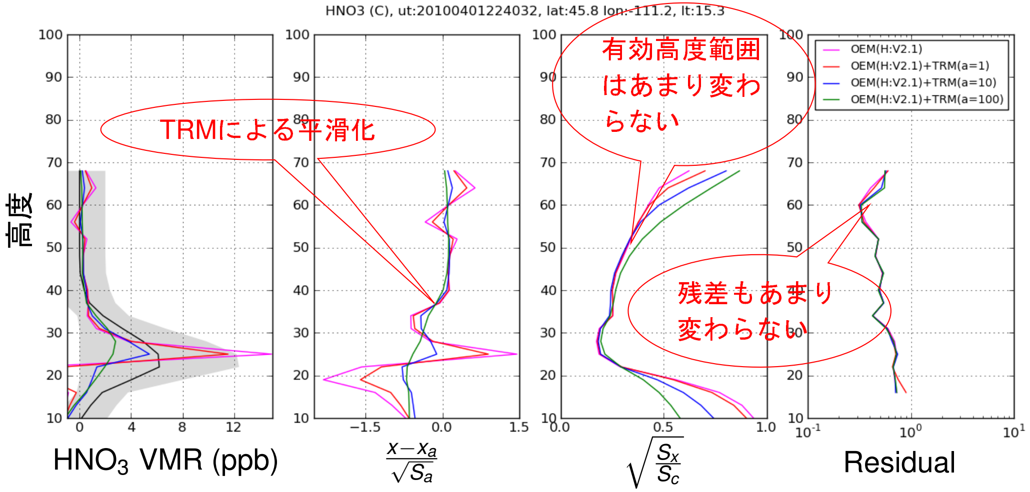
SMILESの実データ例（O_3）



SMILESの実データ例（HCl）



SMILESの実データ例（HNO_3）



まとめと今後の展望

まとめ

- SMILES L2データ処理の逆解析アルゴリズムとして, OEM, TRM, MEMの3つの手法について検討した
- 実際のL2データ処理では, 以前から使用していたOEMとTRMを併用する形で導入するのが容易かつ効果が高いことが分かった
- これまでに, O_3, HCl, HNO_3の3分子種についてOEM+TRMを実装し, 高々度での振動の抑制などに成功している
- 現状では収束判定を以前と同じ方法で行っており, TRM導入によって収束率が悪化した

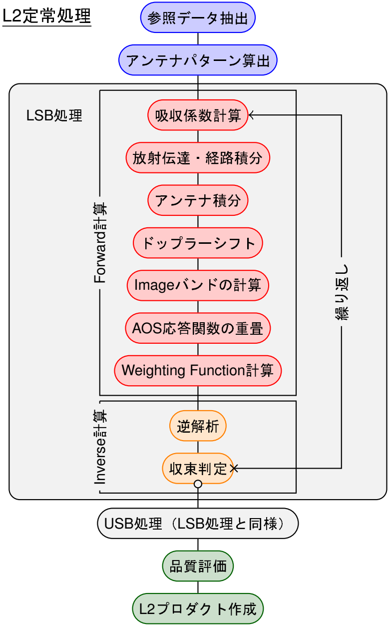
今後の展望

- TRMに適した収束判定アルゴリズムの検討
- 高度別正則化パラメータの検討
- HO_2等, 輝線強度の弱い分子種についてもTRMの導入を検討する

References

- C. D. Rodgers
  Inverse Methods For Atmospheric Sounding: Theory and Practice
  World Scientific, 2000.
- A. Doicu, T. Trautmann, F. Schreier
  Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems.
  Springer, 2010.
- J. Steinwagner, G. Schwarz, S. Hilgers
  Use of a Maximum Entropy Method as a Regularization Technique during the Retrieval of Trace Gas Profiles from Limb Sounding Measurement
  J. Atmos. Oceanic Technol., 23(12):1657–1667, 2006.
- D. J. Jacob
  Lectures on Inverse Modeling
  Harvard University, 2007.

SMILES L2データ処理の計算量



高精度化・高速化のための工夫

- AOSのサンプリング(800kHz)より細かい50-100kHz間隔で計算
  - 計算量8–16倍→計算グリッドの最適化により計算量増加を抑制
- Voigt関数の高性能計算法を新開発
  - 速度2–3倍,精度4桁保証(Imai et al)
- 厳密なアンテナパターンの計算
  - 計算量100倍→5倍程度に高速化
  - 中間圏 O_3が1%変化

ラックマウントサーバー8台程度で，観測時間の1/3程度の時間で処理可能

- Non-Voigt関数の取り込みを検討中
  - Speed dependent Voigt, Galatryで計算量が2桁増える