

SMILES Level 2 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}, 今井弘二^{*2}, 光田千紘^{*3},
山田道夫^{*4}, 竹広真一^{*4}, 塩谷雅人^{*5}

Inverse analysis methods for SMILES Level 2 data processing

Naohiro Manago^{*1}, Makoto Suzuki^{*2}, Takuki Sano^{*2}, Koji Imai^{*2}, Chihiro Mitsuda^{*3},
Michio Yamada^{*4}, Shin-ichi Takehiro^{*4}, Masato Shiotani^{*5}

Abstract

In the SMILES Level 2 data processing, an inverse problem occurs when deriving mixing ratios of trace gas species from observed brightness temperature spectra. If the information content from the observation is not enough, it is necessary to give additional information from outside to stabilize the solution, and there exist a lot of mathematical techniques for such purposes. In this research, we compared three regularization methods, namely Optimal Estimation Method (OEM), Tikhonov Regularization Method (TRM), and Maximum Entropy Method (MEM), and investigated the most favorable regularization method for SMILES. It turned out that in most cases a hybrid method of OEM + TRM gives the best solution.

Keywords— Inverse Analysis, Regularization

概要

SMILES 地上データ処理では校正済み輝度温度スペクトル (Level 1B データ) から微量気体分子の混合比鉛直分布等 (Level 2 データ) を導出する際に逆問題を取り扱う。測定から得られる情報が十分でない場合、外部から付加的な情報を与えて解を安定化させる必要があるが、そのために様々な数学的手法が考案されている。本研究では Optimal Estimation Method (OEM), Tikhonov Regularization Method (TRM), Maximum Entropy Method (MEM) の3つの正則化法について比較を行い、SMILES のデータ解析に適した方法を調べた。その結果、OEM + TRM のハイブリッド法を用いると多くの場合において最も良い結果が得られることが分かった。

1. はじめに

Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES) は国際宇宙ステーションの日本実験棟暴露部に取り付けられ、2009 年 10 月から 2010 年 4 月までの約半年間に渡り太陽非同期軌道上において地球大気から放射される 600 GHz 帯サブミリ波のリム観測を行った¹⁾。SMILES は冷凍機を使って 4K まで冷却した超伝導ミキサを受信機に用いることにより従来の衛星搭載センサに比べて 1 桁程度小さいノイズレベル (輝度温度 0.4K/single-scan) を実現した。これによって成層圏・中間圏に存在する O₃, HCl, ClO, HNO₃, HOCl, HO₂, CH₃CN, BrO といった微量気体分子の情報を豊富に含む輝度温度スペクトルが高精度に測定され、既にいくつかの科学的成果が得られている^{2,3)}。表 1 に SMILES 観測データの主なパラメータをまとめる。

表 1 SMILES 観測データの主なパラメータ

観測緯度帯	38° S – 65° N (nominal)	観測高度範囲	10 – 80 km (nominal)
周波数帯	Band A (624.32 – 625.52 GHz)	高度分解能	3.5 – 4.1 km (nominal)
	Band B (625.12 – 626.32 GHz)	積算時間	0.5 s / 観測高度
周波数サンプリング	0.8 MHz / チャンネル	データ取得時間	53 s / スキャン
周波数分解能	1.8 MHz (FWHM)	システム雑音温度	0.4 K / スキャン

*1 千葉大学環境リモートセンシング研究センター (Center for Environmental Remote Sensing, Chiba University)

*2 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 (Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency)

*3 富士通エフ・アイ・ピー株式会社 (Fujitsu FIP Corporation)

*4 京都大学数理解析研究所 (Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University)

*5 京大大学生存圏研究所 (Research Institute for Sustainable Humanosphere, Kyoto University)

SMILES のデータセットには RAW（未処理データ）、Level 0（地上で編集された未処理データ）、Level 1B（校正された輝度温度スペクトルおよび関連データ、以降単に L1B と表記）、Level 2（観測地点において導出された微量気体分子混合比の鉛直分布等の変数、以降単に L2 と表記）、Level 3（一様な時空間グリッド上に補間された変数）のようにレベルが定義されている。L2 データ処理では L1B データに含まれる校正済み輝度温度スペクトルをシミュレーション結果と比較することにより逆問題を解いて様々な変数を導出する。この過程では従来より Optimal Estimation Method⁴⁾と呼ばれる逆解析アルゴリズムが用いられてきた^{5,6)}。しかしながら、得られる解には不自然な振動が含まれることもあり、数学的に必ずしも最善のアルゴリズムではなかった。一方、工学や応用数学の広い分野では一般に、非線型方程式の逆問題に対して Thikhnov Regularization Method⁷⁾等の様々な手法が用いられている。本研究では SMILES の高精度データに含まれる情報を最大限に引き出すため、逆解析アルゴリズムの高度化について検討した。

2. 逆解析アルゴリズム

2.1 線型代数モデル

SMILES で測定される輝度温度スペクトルは、大気中の微量気体分子からの放射や背景放射の伝搬を記述した大気モデル、およびアンテナや分光器等の特性を記述した装置モデルを使った放射伝達シミュレーションで再現できる。ここで、SMILES で測定される輝度温度スペクトルを \mathbf{y} 、導出したい微量気体分子の混合比を \mathbf{x} とすると、 \mathbf{y} は要素数 m （観測接線高度数×周波数グリッド数 = 約 $40 \times$ 約 1600 ）の成分を持つ測定ベクトル、 \mathbf{x} は要素数 n （分子種の数×導出高度グリッド数 = 約 $10 \times$ 約 30 ）の成分を持つ状態ベクトルとみなせる。これらのベクトルは Forward モデル \mathbf{F} によって関係付けられるが、実際の測定には測定誤差が加わり、Forward モデルには近似等による解析誤差が加わるので、これらをまとめて ϵ とすると次のように記述できる。

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \epsilon \quad (1)$$

我々の目標は式(1)を逆算して \mathbf{x} を求めることである。今、真値に十分近い先験値 \mathbf{x}_a の周辺を考えると、 \mathbf{x} と \mathbf{y} の微小な変化は比例関係にあると考えられ、この比例係数を $m \times n$ 行列 $\mathbf{K} = \partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{x} = \nabla \mathbf{F}$ （Weighting Function と呼ぶ）で表すと式(2)のような線型近似が成り立つ。

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_a) + \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) + \epsilon \quad (2)$$

式(2)は一見、単純な連立 1 次方程式であるがいくつか注意点がある。まず、一般的にリム観測では $m \gg n$ であり、式(2)は条件過剰になっている。また、式(2)は正確な値が分からない誤差を含んでおり、これを厳密に満たす解は存在しない。このような問題は測定値と計算値の差を最小化する最小二乗法を使って解くことができる。ただし、例えば隣り合う周波数グリッドの測定値が完全に独立ではないように、式(2)から得られる独立な条件式の数が m より多くなることはなく、逆に例えば状態ベクトルの高度グリッドを細かく取り過ぎた場合等は独立な条件式の数が m より少なくなることがある。この場合、状態ベクトルを一意に決めることができない不良設定問題になる。さらに、逆解析で得られる解がノイズの影響を受けやすい悪条件問題にもなっている。リム観測で得られる放射輝度はある広がった高度範囲に分布する微量気体分子からの寄与を積算したものであり、微量気体分子の高度プロファイルがランダムに変化したとしても測定値は平均化されてあまり変化しない。逆に、放射輝度の測定値から微量気体分子の高度プロファイルを導出する場合、放射輝度の測定値に小さいノイズが加わったとしても大きな影響を受ける。このような逆問題を解くために、解を安定化させる正則化を導入する。

通常の最小二乗法では式(3)のように標準偏差で規格化したスペクトル残差の二乗和 (χ^2) を最小化する。

$$\chi^2(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}))^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x})) \quad (3)$$

ここで、 \mathbf{S}_y は測定ベクトルに対応する分散共分散行列であり、SMILES ではシステム雑音温度から計算される輝度温度スペクトルの分散を成分に持つ対角行列を使用する。不良設定問題ではスペクトル残差が小さい解が無数に存在し、解が一意に求まらない。そこで、スペクトル残差と同時に正則化項 c を最小化することを考える。これは以下の式(4)で表される Cost Function を最小化することにより実現できる。正則化項 c の違いにより、次節で説明する Optimal Estimation Method、Tikhonov Regularization Method、Maximum Entropy Method のようなバリエーションが考えられる。

$$M(\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}) + c(\mathbf{x}) \quad (4)$$

解が先験値から遠い場合は式(2)で省いた高次項が無視できずに非線型問題となるが、Levenberg-Marquardt 法を用いて解の変動 $\delta \mathbf{x}$ が十分小さくなるまで式(5)を反復計算することで高速かつ安定に解を求められる。

$$\delta \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = -[\mathbf{H}_i + \lambda \mathbf{D}]^{-1} \nabla M(\mathbf{x}_i) \quad (5)$$

式(5)において、勾配 ∇M は次の式(6)を計算して得られる。

$$\nabla M(\mathbf{x}_i) = -2\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) + \nabla c(\mathbf{x}_i) \quad (6)$$

式(5)のパラメータ λ を0にすると Gauss-Newton 法の式に一致する。Gauss-Newton 法は以下の式(7)のように Hessian \mathbf{H}_i を近似して計算が困難な \mathbf{F} の2次微分を避けているが、Newton 法と同様に2次収束の高速性を持つ。

$$\nabla(\nabla M(\mathbf{x}_i)) \approx 2\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \nabla(\nabla c(\mathbf{x}_i)) \equiv \mathbf{H}_i \quad (7)$$

ただし、初期値が悪いと発散することがあるので、 $M(\mathbf{x})$ が減少しない場合（または $\delta\mathbf{x}$ の大きさが減少しない場合）は式(5)のパラメータ λ の値を大きくして適当な正定値行列 \mathbf{D} （例えば恒等行列）を加え、 $\delta\mathbf{x}$ を最急降下法と同様の方向（ ∇M ）に向ける。

2.2 Optimal Estimation Method

Optimal Estimation Method (OEM) は次式のように標準偏差で規格化した状態ベクトルと先験値の差分の二乗和を小さくするような正則化項を用いる。

$$c(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (8)$$

ここで、 \mathbf{S}_a は先験値の分散共分散行列である。この正則化項は、状態ベクトルの確率密度が \mathbf{x}_a を中心に \mathbf{S}_a で与えられる分散を持って正規分布していると仮定し、Bayes 理論に基づいて測定ベクトル \mathbf{y} を得る条件で事後確率を最大化することによって導ける⁴⁾。例えば1次元の場合、状態量 x の確率密度、および状態量が x である条件での測定量 y の確率密度はそれぞれ式(9)および式(10)のようになる。

$$P(x) = \frac{1}{\sigma_a \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x - x_a)^2}{2\sigma_a^2} \right] \quad (9)$$

$$P_x(y) = \frac{1}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(y - Kx)^2}{2\sigma_y^2} \right] \quad (10)$$

Bayes の定理より、測定量が y である条件での状態量 x の確率密度は式(11)で与えられる。

$$P_y(x) = \frac{P_x(y)P(x)}{P(y)} \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{(x - x_a)^2}{\sigma_a^2} + \frac{(y - Kx)^2}{\sigma_y^2} \right) \right] = \exp \left[-\frac{1}{2} M(x) \right] \quad (11)$$

ここで、測定量 y の確率密度 $P(y)$ は x に依らない定数であり、事後確率を最大化することは式(8)を正則化項とする Cost Function を最小化することに等しい。このような正則化によって最小二乗法の解が修正される様子を図1に示す。図1(b)のように測定誤差が小さい（ $\sigma_y \ll K\sigma_a$ ）場合には解は正則化にあまり影響されずに求まるが、図1(c)のように測定誤差が大きい（ $\sigma_y \gg K\sigma_a$ ）場合には解は先験値に縛られる。このように、正則化によって測定から十分な情報が得られない範囲の解を選択的に修正することができる。

一般的に先験値の分散を正確に知ることは難しく、誤差が正規分布しているとも限らないが、ここではおおまかな見積もり値を使用する。SMILES では O_3 , HCl 等の微量気体分子の混合比や温度の高度プロファイル、アンテナの仰角オフセットといった様々な物理量の同時リトリーバルを行っているが、 \mathbf{S}_a を使って規格化することでこれらを無次元量にすることができる。Levenberg-Marquardt 法の正定値行列 \mathbf{D} には \mathbf{S}_a^{-1} の非対角項を0にした行列 \mathbf{D}_a^{-1} が利用できる。また、 \mathbf{S}_a の非対角項に例えばスケール高度 z_s で指数関数的に減衰する値（ $[\mathbf{S}_a]_{ij} = [\mathbf{S}_a]_{ii} \exp[-|z_i - z_j|/z_s]$ ）を入れて高度相関を持たせることができる。OEM ではこのような高度相関を入れたり高度グリッド \mathbf{z} の調整を行わないと多くの場合に解が振動する。

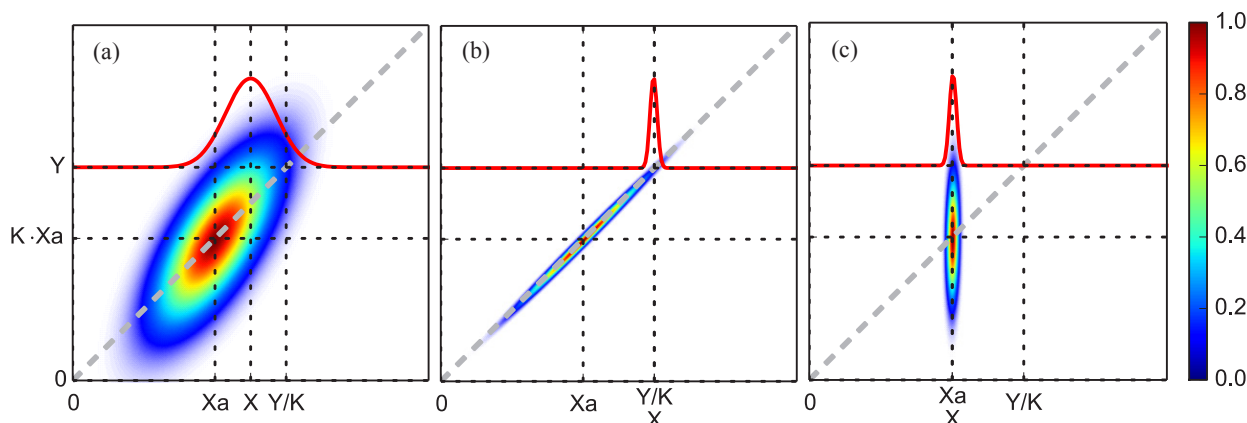


図1 OEM の正則化によって最小二乗法の解が修正される様子. カラースケールは Cost Function $M(x)$ に対応する指数関数 $\exp[-M(x)/2]$ の大きさを表す. 破線は $y = Kx$ の直線である. 実線は y の値が Y であるときの指数関数の大きさであり, この値が最大となるときの x の値が X (解) である. (a) 一般的な場合 (b) 測定誤差が小さい場合 (c) 測定誤差が大きい場合

2.3 Tikhonov Regularization Method

Tikhonov Regularization Method (TRM) は OEM と同じく状態ベクトルと先験値の差分が小さいことを条件にするが, OEM と異なり式(12)のような正則化項を用いる.

$$c(x) = (x - x_a)^T \alpha L_k^T L_k (x - x_a) \quad (12)$$

ここで, L_k は k 次の差分を表す正則化行列であり, α は正則化の強度を調整する正則化パラメータである. (複数分子種の同時リトリバルを行う場合はスカラー α の代わりに分子種ごとの正則化パラメータを要素に持つ対角行列 M_a を用いる.) 例えば次数が 0 であれば $L_k = L_0$ は恒等行列であり, 正則化は状態ベクトルを先験値そのものに近づけるように働く. OEM と同様に 1 次元の例を考えると, $\alpha = 1/\sigma_a^2$ の置き換えにより TRM は OEM と一致することが分かる. TRM の α を大きくすることは OEM の σ_a を小さくすることに相当し, 図 1(c) のように測定誤差が大きい ($\sigma_y \gg K/\sqrt{\alpha}$) 場合には解は先験値に縛られる.

次数が 1 であれば $[L_1 x]_i = x_i - x_{i-1}$ となり, 状態ベクトルに任意のオフセットを加えても Cost Function の値は変わらないことから, 状態ベクトルのオフセットは先験値に依らず, 正則化とは無関係にスペクトル残差最小の条件から決まる (ただし, 以下で述べる境界条件の影響を受ける). 同様に, 次数が 2 であれば状態ベクトルのオフセットと傾きは先験値に依存しない. 次数が大きくなるに従って先験値への依存度は少なくなるが, より多くの成分が混ざって高度分解能が悪化するため, 適当な次数を選ぶ必要がある. 次数 k の正則化行列には $(n-k) \times n$ 行列と $n \times n$ 行列の 2 形式が考えられる⁷⁾. 前者は正則化が効かない状態ベクトル (例えば L_1 に対する状態ベクトルのオフセット, すなわち定数ベクトル) を持つが, 後者は k 行が境界条件として働くために解を一意に決めることができる. 一般に, 正則化行列には次数の異なる差分行列の線型結合を用いても構わない. OEM に前述した高度相関を入れることは L_0 と L_1 の線型結合を使うことに相当する. (ただし, OEM の高度相関では正則化の強度を調整することができない.)

正則化パラメータは Cost Function に含まれるスペクトル残差と正則化項のバランス調整の役割を果たし, 小さ過ぎると雑音が多い解, 大き過ぎると先験値に縛られた解になるため, 適した値を選ぶ必要がある. 正則化パラメータの決定方法には α を徐々に大きくしていったスペクトル残差が増加を始める点に設定する方法 (L-curve 法), 平滑化誤差とノイズ誤差を合わせたトータル誤差が最小となるように設定する方法等がある⁸⁾. L-curve 法は正則化パラメータを徐々に大きくしながら逆問題を解いた時, スペクトル残差と正則化項の散布図を描くと L 字状の軌跡が得られることを利用するが, このような図を描かなくても得られた解を見るとスペクトル残差が増加を始める点でそれまで安定していた解が先験値に向かって動き出すことから判断できる. このような状態になる前の解を見て, 振動が適度に抑制される正則化パラメータを選ぶのが良いと考えられる. 正則化の効果は正則化パラメータが多少 (1 桁程度) 変化してもあまり変わらないため, 厳密に最適化する必要はない. ただし, 分子種が異なれば最適値は異なり, 同じ分子種でも日変動するものは昼と夜で最適値が異なる. この問題に対する簡便策として, $L_k^T L_k$ の代わりに $L_k^T S_a^{-1} L_k$ を使用して状態ベクトルの残差を規格化する方法が挙げられる. この規格化により残差はだいたい 1 のオーダーになると考えられ, どの分子種にも同じような正則化パラメータを使うことができる. (次数が 0 で正則化パラメータが 1 であれば OEM と等価である.) 状態ベクトルの大きさに応じた先験値の分散を用いると, 正則化パラメータを定数にする場合と比べて状態ベクトルが小さい範囲でより強く正則化が作用する.

TRM のメリットとして, OEM のような高度グリッドの最適化が不要で等間隔グリッドを使用すること, 解の滑らかさや高度分解能を正則化行列や正則化パラメータの選び方によって調整できることが挙げられる.

2.4 Maximum Entropy Method

Maximum Entropy Method (MEM) は状態ベクトル \mathbf{x} のベクトル関数 $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ について次のように計算される Shannon の情報量を最大化する.

$$S(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^n q_i \ln(q_i) \quad (13)$$

MEM の正則化項には以下の式(14)を用いる.

$$c(\mathbf{x}) = -\alpha S(\mathbf{x}) \quad (14)$$

この式から分かるように, MEM は先験値を必要としないことが特長である. TRM と同様に正則化パラメータ α を使って正則化の強度を調整することにより, 観測結果を束縛条件にして情報量 (不確かさ) が最大になる解が得られる. ここでは文献⁹⁾にない, \mathbf{x} のベクトル関数として以下のように2次差分を規格化したものを用いる.

$$q_i = p_i/p \quad (15)$$

$$p_i = x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1} + 2x_{\max} - 2x_{\min} + \zeta \quad (16)$$

$$p = \sum_{i=1}^n p_i = -(x_1 + x_n) + n(2x_{\max} - 2x_{\min} + \zeta) \quad (17)$$

式(16)で, 定数 $2x_{\max} - 2x_{\min} + \zeta$ (x_{\max} , x_{\min} はそれぞれ \mathbf{x} の成分の最大値, 最小値, $\zeta = 10^{-15}$) は \mathbf{p} の成分が必ず正となるように加えてある. 最小二乗法の計算に必要な Shannon の情報量の1次および2次微分はそれぞれ式(18), 式(19)のようになる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial x_k} &= - \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{p} \left(1 + \ln \left(\frac{p_i}{p} \right) \right) \left(A_{ik} - \frac{p_i}{p} p_k^x \right) \right) \\ \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right) &= - \sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{p p_i} \left(A_{im} - \frac{p_i}{p} p_m^x \right) \left(A_{ik} - \frac{p_i}{p} p_k^x \right) - \frac{1}{p^2} \left(1 + \ln \left(\frac{p_i}{p} \right) \right) \left(A_{ik} p_m^x + A_{im} p_k^x - \frac{2p_i}{p} p_m^x p_k^x \right) \right] \end{aligned}$$

ここで, $A_{ik} = \partial p_i / \partial x_k$ は $i = k$ の時 -2 , $i = k \pm 1$ の時 1 , それ以外は 0 であり, $p_k^x = \partial p / \partial x_k$ は $k = 1$ または n の時 -1 , それ以外は 0 である.

2.5 ハイブリッド法

これまでに説明した OEM, TRM, MEM はスペクトル残差にそれぞれの正則化項を加えたものを最小化する方法であるが, これらの正則化項は組み合わせることもできる. 実際, NASA の Aura 衛星に搭載された Microwave Limb Sounder (MLS) などのリム観測では OEM と TRM を組み合わせで使用している¹⁰⁾.

3. 正則化アルゴリズムの比較

SMILES に適した正則化アルゴリズムを探すため、シミュレーションによって作成した輝度温度スペクトルの疑似データから微量気体分子の混合比を逆算し、真値との比較を行った。問題に適したアルゴリズムは正則化が必要な高度における高度プロファイル（絶対量や微分量）によってケース・バイ・ケースであると考えられるので、様々な分子種（Band A の O_3 、Band B の HCl 、Band C の ClO 、Band C の HNO_3 、Band B の HO_2 、Band A の $HOCl$ の 6 種類）について比較した。真値のプロファイルにはモデル計算（WACCM¹¹⁾）で得られた赤道域の帯状平均（南緯 10° ~ 北緯 10° 、2009 年 11 月 17 日、ローカルタイム 11 ~ 13 時）を使用し、先験値および初期値には真値を 1.5 倍にしたものを用いた。高度グリッドの間隔は 2.5 km とした。比較した逆解析アルゴリズム（16 種類）を表 2 に挙げる。TRM, MEM の正則化パラメータは常用対数スケールで 0.1 刻みずつ値を変化させ、有効高度範囲における平均 2 乗誤差の平方根（RMSE）が最小になる値を選択した。

いくつかの逆解析アルゴリズム（OEM, TRM_k1, TRM_k2, TRM_k2_oem）について、各分子混合比の誤差と真値の高度プロファイルを図 2 に示す。この図から、OEM 単独では真値が大きい高度範囲でランダム誤差が大きくなることが分かる。これは高度グリッド間隔（2.5 km）が解析の高度分解能に比べて細かいためだと考えられる。TRM_k1 と TRM_k2 は似たような誤差プロファイルを示し（例外：高高度の HCl ）、それぞれ単独では主に真値が小さい高高度で誤差が大きくなっている。TRM_k2_oem は OEM と TRM_k2 の良い部分を合わせた形になっており、全高度範囲で誤差が比較的小さくなっている。

全 16 種類の逆解析アルゴリズムについて、図 2 に示した各分子種の有効高度範囲で計算した RMSE（OEM_10km の値で規格化している。TRM, MEM については正則化パラメータごとの値）を図 3 に示す。状態ベクトルの残差を規格化した TRM, 規格化しない TRM, MEM の 3 グループ内では、それぞれ同じような正則化パラメータで RMSE が最小になっており、各アルゴリズムで得られた RMSE の最小値は図 4 のようになった。図 3, 図 4 から以下のことが分かる。

- i) TRM_k1 と TRM_k1_mxn の差はほとんどない（例外： O_3 , HCl ）
- ii) TRM_k2 と TRM_k2_mxn の差はほとんどない（例外： O_3 ）
- iii) TRM_k1_nrm と TRM_k1_hyb の差は小さい
- iv) TRM_k2_nrm と TRM_k2_hyb の差は小さい（例外： HCl ）
- v) TRM_k1_hyb より TRM_k1_oem の方が RMSE の最小値が小さい（例外： HO_2 ）
- vi) TRM_k2_hyb より TRM_k2_oem の方が RMSE の最小値が小さい

項目 i, ii より、TRM の境界条件は多くの場合、解に影響を与えないことが分かる。ただし、 O_3 , HCl については境界条件が無いと高高度で相対誤差が大きくなることが認められた。項目 iii, iv より、状態ベクトルの残差を規格化した場合、TRM に OEM を組み合わせても効果が薄いことが分かる。これは残差の規格化により高高度の正則化が強く働いて誤差が抑えられるためと考えられる。ただし、TRM_k2_nrm では HCl の高高度で大きな誤差が見られ、TRM_k2_hyb では誤差が抑えられていた。項目 v, vi からは、TRM に OEM を組み合わせれば状態ベクトルの残差を規格化しない方が良いことが分かる。この特徴が顕著な HNO_3 について調べてみると、TRM に OEM を組み合わせれば状態ベクトルを規格化した場合、低高度および高高度の真値が小さい範囲において、正則化が強すぎて解が先験値に縛られるために誤差が大きくなっていることが分かった。

各分子種ごとに RMSE の小さい方から順位を付け、各アルゴリズムごとに全分子種の順位を足し合わせると、TRM_k2_oem (14)、TRM_k1_oem (17) で小さい値が得られた。以下、順位の和が 39 ~ 48 のグループ（TRM_k2_hyb, TRM_k0_hyb, TRM_k2_nrm, TRM_k1_nrm, TRM_k1_hyb, MEM_k2_hyb, TRM_k1）、順位の和が 56 ~ 65 のグループ（TRM_k0, TRM_k2, OEM_10km, TRM_k1_mxn, TRM_k2_mxn）と続き、OEM (85)、MEM_k2 (88) で大きい値が得られた。このことから、誤差をなるべく小さくするという観点では TRM_k2_oem または TRM_k1_oem が良いアルゴリズムであると言える。正則化パラメータの設定が楽であることを加味すると、TRM_k2_hyb も良いアルゴリズムである。理想的にはアルゴリズムを一つに限定せず、分子種ごとに最適なアルゴリズムを選択するのが良いと考えられる。MEM_k2 は先験値の情報を利用しないために誤差が比較的大きくなっているが、信頼できる先験値が得られない場合は選択肢に入れても良いと思われる。

表 2 比較を行った正則化アルゴリズム

OEM					TRM				
アルゴリズム	高度相関				アルゴリズム	次数	境界条件 ^a	規格化 ^b	OEM ^c
OEM	×				TRM_k1_hyb	1	○	○	○
OEM_10km	○ (10 km)				TRM_k2	2	○	×	×
TRM					TRM_k2_mxn	2	×	×	×
アルゴリズム	次数	境界条件 ^a	規格化 ^b	OEM ^c	TRM_k2_nrm	2	○	○	×
TRM_k0	0	○	×	×	TRM_k2_oem	2	○	×	○
TRM_k0_hyb	0	○	×	○	TRM_k2_hyb	2	○	○	○
TRM_k1	1	○	×	×	MEM				
TRM_k1_mxn	1	×	×	×	アルゴリズム	次数	OEM ^c		
TRM_k1_nrm	1	○	○	×	MEM_k2	2	×		
TRM_k1_oem	1	○	×	○	MEM_k2_hyb	2	○		

a: 次数 k の正則化行列に $n \times n$ 行列（正方行列）を用いて k 行のベクトルを境界条件とする

b: $\mathbf{L}_k^T \mathbf{L}_k$ の代わりに $\mathbf{L}_k^T \mathbf{S}_a^{-1} \mathbf{L}_k$ を用いて状態ベクトルの残差を規格化する

c: OEMを組み合わせたハイブリッド法を用いる

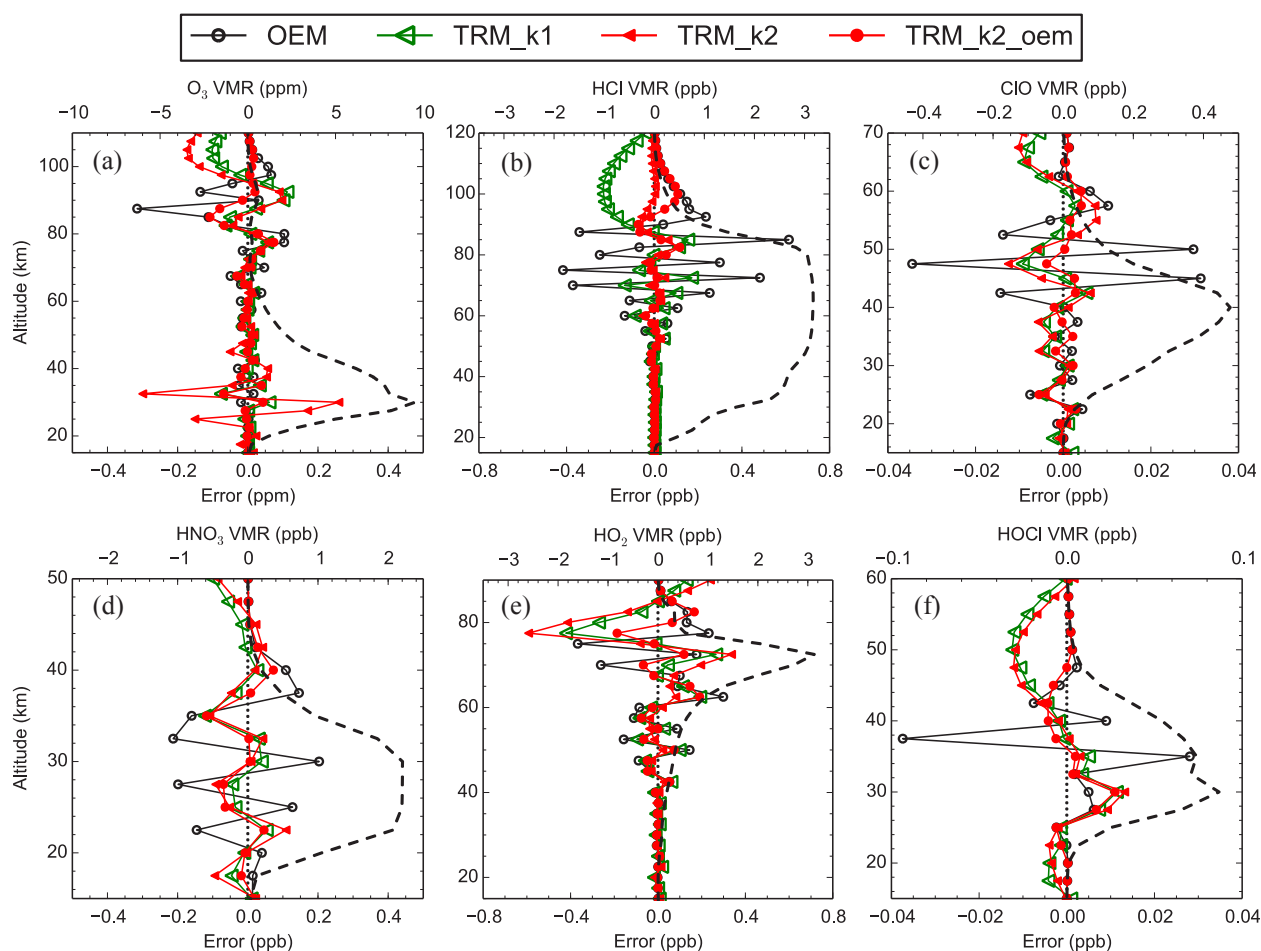


図 2 逆解析結果の誤差(実線)と真値(破線)の高度プロファイル. (a) O₃ (b) HCl (c) ClO (d) HNO₃ (e) HO₂ (f) HOCl.

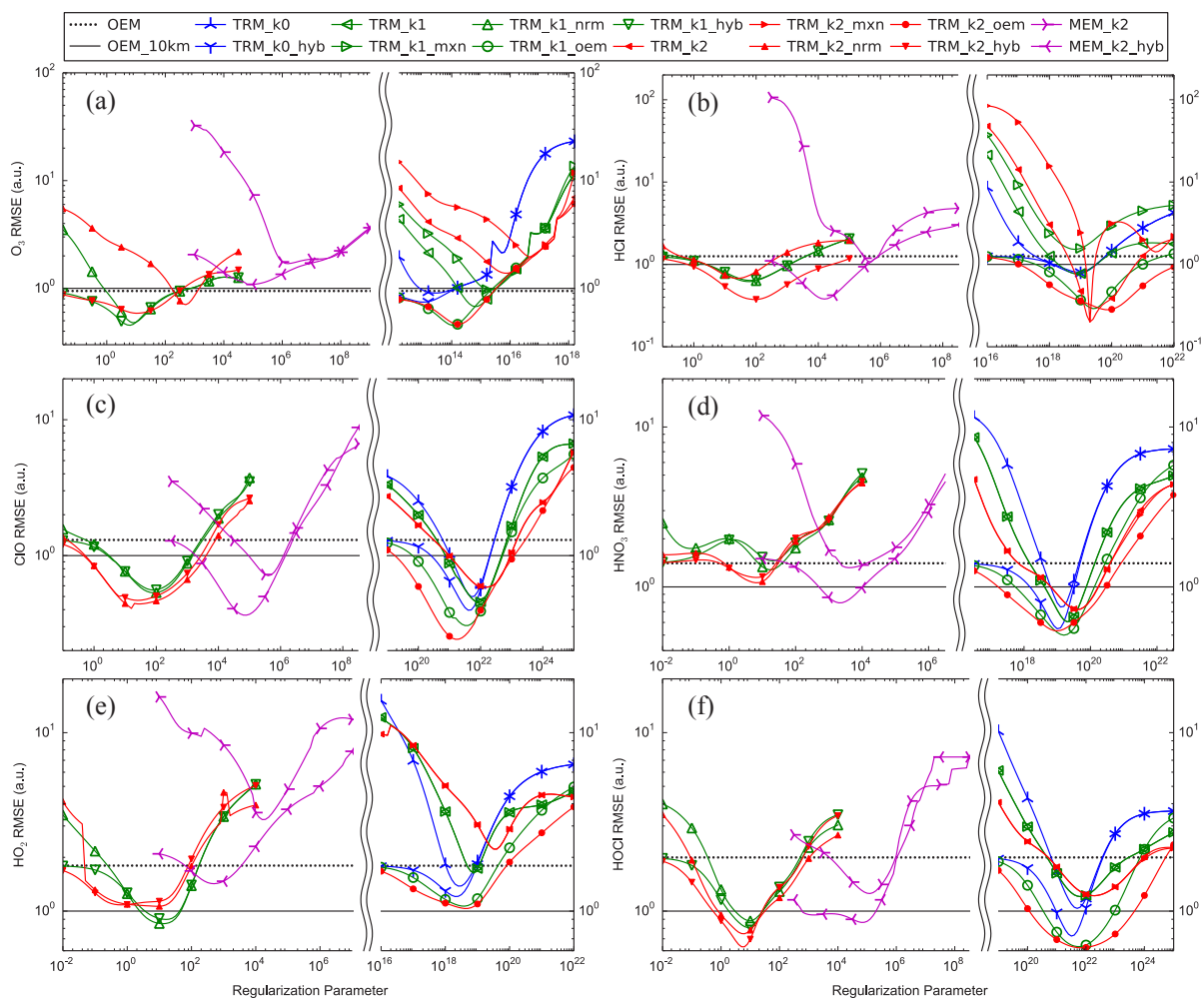


図3 逆解析誤差の正則化パラメータ依存性(OEM_10km の値で規格化, 各パネルの意味は図2と同じ)

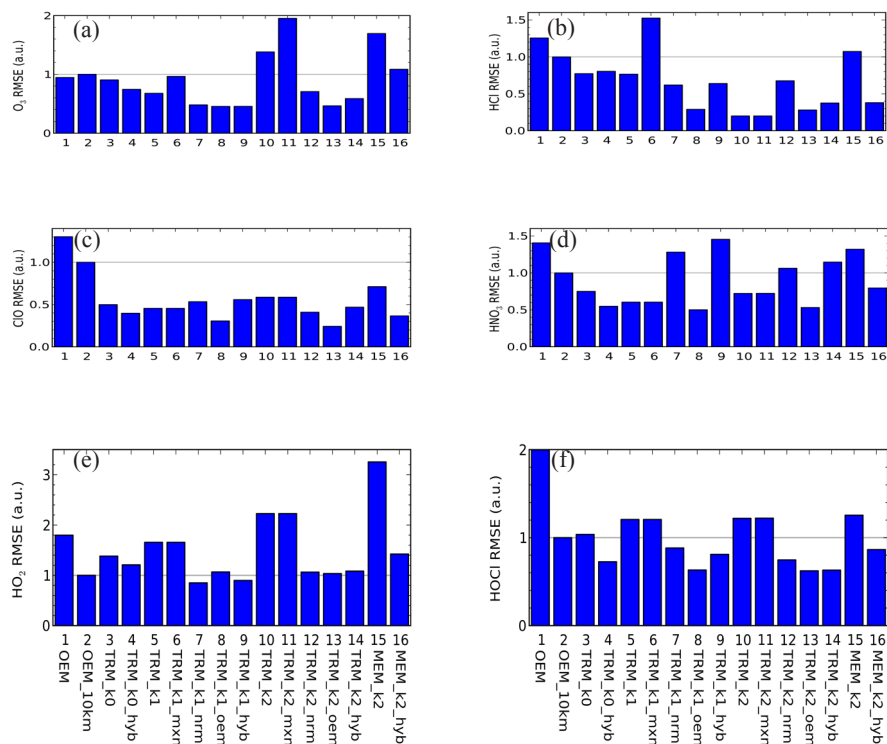


図4 逆解析誤差の最小値(OEM_10km の値で規格化, 各パネルの意味は図2と同じ)

4. SMILES の逆解析手法

SMILES L2 データ処理では、比較的誤差が小さく、正則化パラメータの設定が楽なハイブリッド法 (TRM_k2_hyb) を逆解析に使用する。このハイブリッド法では以下のような正則化項を使用する。

$$c_{\text{hyb}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{L}_2^T \mathbf{S}_r^{-1} \mathbf{L}_2 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (20)$$

$$\mathbf{S}_r^{-1} = \mathbf{M}_a \mathbf{S}_a^{-1} \quad (21)$$

対角行列 \mathbf{M}_a の対角要素は分子種ごとの正則化パラメータである。正則化パラメータの値は基本的に 10 とするが、解の振動を強く抑える必要がある HOCl および HNO_3 に対してはそれぞれ 50 および 1000 とする。

逆問題の解は式(20)を式(5)に代入して得られる以下の式を反復計算することで求められる。

$$\delta \mathbf{x}_i = [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_c^{-1} + \lambda \mathbf{D}_a^{-1}]^{-1} [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_c^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] \quad (22)$$

$$\mathbf{S}_c^{-1} = \mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{L}_2^T \mathbf{S}_r^{-1} \mathbf{L}_2 \quad (23)$$

解が収束したことの目安は解の変動が期待される誤差と同程度になることであり、式(24)の値が状態ベクトルの要素数 n と同程度かどうかで判断できる。

$$\delta \mathbf{x}_i^T \mathbf{S}_x^{-1} \delta \mathbf{x}_i = \delta \mathbf{x}_i^T [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_c^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] \quad (24)$$

$$\mathbf{S}_x^{-1} = \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_c^{-1} \quad (25)$$

導出解 $\hat{\mathbf{x}}$ の特性を評価するために、真値 \mathbf{x} に関する偏微分 $\mathbf{A} = \partial \hat{\mathbf{x}} / \partial \mathbf{x}$ (Averaging Kernel Matrix, 以降単に AKM と表記) が有用である。AKM の行ベクトル (Averaging Kernel) $\partial \hat{x}_i / \partial x_j$ は高度グリッド i の導出解 \hat{x}_i が各高度グリッドの真値にどれほど感度があるかを表し、AKM の列ベクトル $\partial \hat{\mathbf{x}} / \partial x_j$ は高度グリッド j の真値 x_j の変化が各高度グリッドの導出解にどれほど影響を与えるかを表す。理想的な逆解析では AKM は単位行列となるが、現実的には Averaging Kernel の半値全幅で表される有限の高度分解能を持ち、感度が過小 (過大) である場合には Averaging Kernel の和は 1 より小さく (大きく) なる。SMILES では以下の式を使って収束後の結果から AKM の見積もりを行っている。

$$\mathbf{A} = \mathbf{S}_x \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \quad (26)$$

エラー比 $r_e = \sqrt{[\mathbf{S}_x]_{ii} / [\mathbf{S}_c]_{ii}}$ は正則化によって与えられた観測以外の情報が解の正確さに寄与する割合を表し、これまで SMILES では r_e が 0.5 より小さい高度を有効と判定してきた。しかしながら、OEM と TRM のハイブリッド法を導入した場合、OEM に高度相関を入れないと有効高度範囲が狭く見積もられる傾向があった。そこで、有効高度範囲の判定基準を Averaging Kernel の和が 0.6 以上となるように変更した。図 5(b)に見られるように、TRM の正則化が強く働くと導出解の高度から遠く離れた高度に感度を持つことがあるため、Averaging Kernel の和を取る際は各高度グリッド ± 2 グリッドの範囲 (合計 5 グリッド) のみを考慮することにした。これにより OEM の高度相関を省き、TRM のみで解の振動を制御することができるようになった。

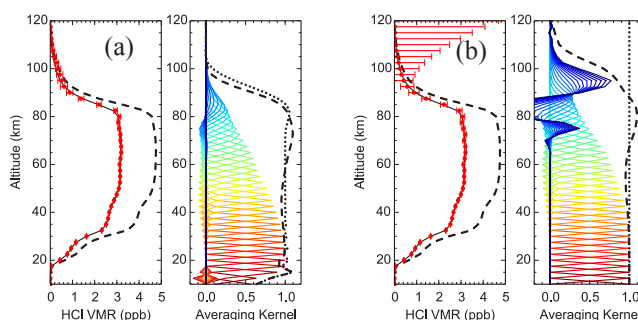


図5 逆解析で得られた HCl の導出解と Averaging Kernel の例。(a) TRM_k2_oem (b) TRM_k2_mxn。各アルゴリズムについて、左パネルの実線は真値、破線は先験値および初期値、点と誤差棒は導出解およびその不確実性を示す。右パネルの実線は Averaging Kernel、点線は Averaging Kernel の和、破線は各高度グリッド ± 2 グリッドの範囲における Averaging Kernel の和を示す。

OEM から OEM+TRM のハイブリッド法に変更したことによる計算量の増加は Forward 計算等に必要な計算量に比べて僅かであり、SMILES L2 データ処理の所要時間への直接的影響は無視できる。ただし、高度グリッドの間隔を 2.5 km に統一したことで状態ベクトルのサイズが増加したため、処理時間が少し増加した。

5. まとめ

SMILES L2 データ処理における逆解析を高度化するため、これまで用いられてきた Optimal Estimation Method (OEM) に加え、Tikhonov Regularization Method (TRM)、Maximum Entropy Method (MEM) についての調査を行った。6つの分子種 (SMILES 観測 Band A の O_3 , Band B の HCl , Band C の ClO , Band C の HNO_3 , Band B の HO_2 , Band A の $HOCl$) について、シミュレーションを用いて様々な正則化法を比較した結果、多くの場合に高度相関を入れた OEM よりも OEM と TRM を組み合わせた方が良い結果が得られることが分かった。これは、OEM では先験値と観測値が与えられた条件で最適な解が得られるものの、OEM の高度相関では正則化の強度が調整できないために解の振動を十分に抑えられないのに対し、TRM では正則化パラメータの調整によって振動が効果的に抑えられるためと考えられる。MEM に関しては、適当な先験値がある場合は OEM や TRM に比べて誤差が大きくなることが確かめられた。

OEMとTRMのハイブリッド法を O_3 , HCl , HNO_3 の 3 分子種に適用したSMILES L2 v2.3, v2.4 はすでにデータが公開され、様々な研究で使用されている^{12,13)}。現在はOEMとTRMのハイブリッド法を全ての分子種に適用したSMILES L2 v3.0 の処理中であり、このデータは 2013 年の秋にリリースされる予定である*。

参考文献

- 1) K. Kikuchi et al., "Overview and early results of the Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES)," *J. Geophys. Res.*, vol. 115, no. D23306, 2010.
- 2) K. Imai et al., "Validation of ozone data from the Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES)," *J. Geophys. Res.*, vol. 118, no. 11, pp. 5750 - 5769, 2013.
- 3) T. Sakazaki et al., "Diurnal ozone variations in the stratosphere revealed in observations from the Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES) on board the International Space Station (ISS)," *J. Geophys. Res.*, vol. 118, no. 7, pp. 2991 - 3006, 2013.
- 4) C. D. Rodgers, *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, World Scientific, 2000.
- 5) C. Takahashi, S. Ochiai and M. Suzuki, "Operational retrieval algorithms for JEM/SMILES level 2 data processing system," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, vol. 111, no. 1, 2010.
- 6) C. Mitsuda et al., "Current status of level 2 product of Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES)," *Proc. SPIE 8176*, 2011.
- 7) A. Doicu, T. Trautmann, F. Schreier, *Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems*, Springer, 2010.
- 8) M. Ridolfi and L. Sgheri, "A self-adapting and altitude-dependent regularization method for atmospheric profile retrievals," *Atmos. Chem. Phys.*, vol. 9, pp. 1883-1897, 2009.
- 9) J. Steinwagner, G. Schwarz and S. Hilgers, "Use of a Maximum Entropy Method as a Regularization Technique during the Retrieval of Trace Gas Profiles from Limb Sounding Measurements," *J. Atmos. Oceanic Technol.*, vol. 23, no. 12, pp. 1657-1667, 2006.
- 10) N. J. Livesey and W. Van Snyder, "EOS MLS Retrieval Processes Algorithm Theoretical Basis," 2004.
- 11) A. Kunz, L. L. Pan, P. Konopka, D. Kinnison and S. Tilmes, "Chemical and dynamical discontinuity at the extratropical tropopause based on START08 and WACCM analyses," *J. Geophys. Res.*, vol. 116, no. D24, 2011.
- 12) R. A. Stachnik et al., "Stratospheric BrO abundance measured by a balloon-borne submillimeterwave radiometer," *Atmos. Chem. Phys.*, vol. 13, pp. 3307 - 3319, 2013.
- 13) A. K. Smith et al., "Satellite observations of ozone in the upper mesosphere," *J. Geophys. Res.*, vol. 118, no. 11, pp. 5803 - 5821, 2013.

* <http://darts.isas.jaxa.jp/iss/smiles/>