

# JEM/SMILES Level 2 処理用インバージョンアルゴリズムの高度化

眞子 直弘<sup>1</sup>, 鈴木 睦<sup>1</sup>, 佐野 琢己<sup>1</sup>, 岩田 芳隆<sup>1</sup>, 塩谷 雅人<sup>2</sup>, 山田 道夫<sup>3</sup>, 竹広 真一<sup>3</sup>,  
光田 千紘<sup>4</sup>, 高橋 千賀子<sup>4</sup>, 今井 弘二<sup>5</sup>

<sup>1</sup> ISAS/JAXA, <sup>2</sup> 京大生存圏研, <sup>3</sup> 京大数理研, <sup>4</sup> 富士通 FIP, <sup>5</sup> とめ研究所

## 1. はじめに

これまでの日本の大気リモートセンシングではほとんど Rodgers 法<sup>1-3</sup> が用いられており (例えば IMG<sup>4</sup>)、SMILES の L2 処理もそれに従っている<sup>5</sup>。しかしながら、一般の逆問題解法には様々なものが知られており、近年、海外における研究では Tikhonov Regularization<sup>6</sup> (TR) や Maximum Entropy Method<sup>7</sup> (MEM) 等の解法が取り入れられている (前者の例... SCIAMACHY<sup>8</sup>、Aura/MLS<sup>9</sup>、MIPAS<sup>10</sup>、後者の例... MIPAS<sup>11</sup>)。本研究では、TR、MEM を用いて、SMILES のデータ解析において、より良い解が得られるどうかを検討した。

## 2. 逆解析アルゴリズム

SMILES の L2 処理で求める状態ベクトルを  $\mathbf{x}$  (次元  $n$ )、観測ベクトルおよび観測誤差ベクトルをそれぞれ  $\mathbf{y}$ 、 $\epsilon$  (次元  $m$ ) とすると、

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

のような関係式が書ける。ここで、 $\mathbf{F}$  は放射伝達モデルや装置モデルに基づく Forward モデルを表す。一般に式 (1) は非線型な関係式となっているが、適当なアプリオリ値  $\mathbf{x}_a$  の周りにおける Taylor 展開の 1 次までの項を残すことにより、

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

のような線型な関係式を導くことができる。ここで、 $\mathbf{K} \equiv \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} = \nabla \mathbf{F}$  は Weighting function (Jacobian) を表す  $m \times n$  行列である。一般的なリモ観測では独立な条件式の数 (行列  $\mathbf{K}$  の階数  $p$ ) が求めるべきパラメータの数  $n$  より少ないために不良設定問題となっている。このような問題を解く方法には、特異値分解を用いる方法と最小二乗法を用いる方法の 2 種類があるが、ここでは後者を採用する。通常最小二乗法では、観測ベクトルに関する Residual、すなわち

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

を最小化する解を求める。ここで  $\mathbf{S}_y$  は観測値の分散共分散行列である。今の場合、それだけでは条件式が不足するために一意な解が得られない。そこで、観測以外の先見知識から得られる条件式を付け加える。すなわち、

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

を最小化する解を求める。本研究では、Constraint ( $c$ ) が異なる OEM、TR、MEM の 3 手法について検討する。

## 2.1 OEM

OEM は、状態ベクトルに関する Residual、すなわち

$$c_{\text{OEM}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (5)$$

のような Constraint を課す方法である。ここで、 $\mathbf{S}_a$  はアプリアリ値の分散共分散行列である。OEM は Bayse の定理を使って事後確率を最大化することで導くことができる<sup>3</sup>。

## 2.2 TR

TR は、解を滑らかにするような Constraint

$$c_{\text{TR}}(\mathbf{x}) = \alpha (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{L}^T \mathbf{L} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (6)$$

を課す方法である。 $\mathbf{L}$  は Regularization matrix と呼ばれる行列であり、ここでは  $k$  階微分に相当する行列  $\mathbf{L}_k$  を考える。 $\mathbf{L}_0$  は単位行列であり、 $\mathbf{L}_1$  は例えば  $m = 3$  の場合

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

のように表される。 $\mathbf{L}_1$  は  $(m - 1) \times m$  行列で表される場合もあるが、ここでは正方行列の表現を用いる。 $\mathbf{L}_1$  の最後の行は大気上端における境界条件の役割を果たす<sup>12</sup>。式 (6) の  $\alpha$  は Regularization parameter と呼ばれるパラメータで、Residual と Constraint のバランスを調整し、解の滑らかさを決定付ける。この値は L-curve 法<sup>13</sup>によって定めることができる。ただし、多分子の鉛直プロファイルを同時に求める場合は状態ベクトルの適当な規格化が必要となる。ここでは  $\mathbf{L}^T \mathbf{L} \rightarrow \mathbf{L}^T \mathbf{S}_a^{-1} \mathbf{L}$  の置き換えによって規格化を行った。

## 2.3 MEM

MEM は、Shannon の情報量  $S(\mathbf{x})$  を最大化するような Constraint

$$c_{\text{MEM}}(\mathbf{x}) = -\alpha S(\mathbf{x}) \quad (8)$$

を課す方法である。Shannon の情報量は

$$S(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^n q_i \ln(q_i) \quad (9)$$

のような式で与えられる。ベクトル  $\mathbf{q}$  は通常  $\mathbf{x}$  そのものであるが、ここでは文献<sup>11</sup> に倣って  $\mathbf{x}$  の関数に拡張する。

$$q_i = p_i \left/ \sum_{i=1}^n p_i \right. \quad (10)$$

$$p_i = x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i + 2(x_{\max} - x_{\min}) + \varsigma \quad (11)$$

ここで、ベクトル  $\mathbf{p}$  は  $\mathbf{x}$  の 2 階微分に相当するものであり、 $x_{\max} - x_{\min}$  および  $\varsigma = 10^{-15}$  は  $p_i$  が必ず正数になるように加えた定数である。定義によりベクトル  $\mathbf{q}$  は分子ごとに規格化されている。Regularization parameter  $\alpha$  は TR と同様に L-curve 法によって定める。

## 2.4 Gauss-Newton 法

最小二乗法には様々な解法があるが、本研究では次式で表される Gauss-Newton 法を用いる ( $j$  は反復回数)。

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + [\mathbf{K}_j^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_j + \frac{1}{2} \nabla (\nabla c(\mathbf{x}_j))]^{-1} [\mathbf{K}_j^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_j)) - \frac{1}{2} \nabla c(\mathbf{x}_j)] \quad (12)$$

### 3. シミュレーションデータ解析

本研究の最終目的は SMILES L2 処理プログラムを使って実データを解析することであるが、まず逆解析アルゴリズムを検討するための簡易プログラム (TOY モデル) を開発し、シミュレーションデータを使って解析を行った。TOY モデルは L2 処理プログラムと同じく Forward モデルと Inversion モデルで構成されており、Forward モデルには散乱なしの放射伝達計算、Line-by-Line 計算などが実装されている。Inversion モデルは逆解析手法の変更、リトリーバル分子やリトリーバル高度グリッドの変更などが容易に行えるように設計されている。本体は C++ 言語で書かれているが、線型代数の計算には高速化のために BLAS/LAPACK の Fortran ライブラリを直接呼び出している。

表 1: シミュレーション設定

観測バンド	A (624.32 – 625.52 GHz)
シミュレート分子種	O <sub>3</sub> ( <sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>16</sup> O)、HCl (H <sup>37</sup> Cl)、HNO <sub>3</sub>
リトリーバル分子種	O <sub>3</sub> ( <sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>16</sup> O)、HNO <sub>3</sub> (同時リトリーバル)
観測接線高度	4, 7, …, 85 km (3 km 刻み)
リトリーバル高度	4, 7, …, 85 km (3 km 刻み)
真値	SMILES の実データ解析結果から作成
アプリオリ値	真値の 150%
アプリオリ誤差	アプリオリ値の 50%
初期値	真値の 150%
システムノイズ	350 K ( $\sigma = 0.35$ K)

今回行ったシミュレーションの設定を表 1 に示す。リトリーバル結果は図 1–4 のようになった。OEM では高度 60 km 以下でリーズナブルな解が得られている。ただし、それ以上の高度では解が振動している。これは特異値の小さい特異ベクトルが高高度に集中しているためにノイズの影響を受けやすくなっていることが原因と考えられる。この問題は、リトリーバル高度グリッドの調整や  $S_a$  の非対角項 (すなわち高度相関) を導入して解の平滑化を行うことによって改善が可能である。(実際の L2 処理ではそのような改善を行っている。) ただし、解の平滑化には高度分解能の代償が伴うため、解の滑らかさと高度分解能のバランスを保つ必要がある。

Regularization matrix に  $L_0$  を用いた TR では高高度の振動が大幅に改善されている。OEM の解の平滑化のようにリトリーバル高度グリッドにあまり気を遣わないでも滑らかな解が得られることが TR のメリットであると考えられる。(高度分解能が自動的に調整され、その結果として高高度の Averaging kernel の幅が広がっている。) ただし、 $L_0$  を用いた場合、リトリーバル高度グリッドが細かすぎると真値とアプリオリ値の間で解が振動することが分かった。これは Residual を小さくするためには解を真値に近付けなければならない一方、Constraint を小さくするためには解をアプリオリ値に近付ける必要があるためと考えられる。

Regularization matrix に  $L_1$  を用いた TR も同様に、OEM に比べて高高度の振動が大幅に改善されている。また、リトリーバル高度グリッドに気を遣う必要がない。 $L_1$  を用いた場合は、リトリーバル高度グリッドが細かすぎても解が振動することがないため、 $L_0$  を用いた場合より有利であると考えられる。

MEM も同様に、OEM に比べて高高度の振動が大幅に改善されており、リトリーバル高度グリッドに気を遣う必要がない。(高度グリッドが細かすぎても解が振動することはない。) MEM ではアプリオリは線型化のためだけに使われており、OEM や TR に比べてアプリオリへの依存度が低い点はそれらに比べて有利であると考えられる。また、分子ごとの Regularization parameter の調整が必要ない点は TR に比べて有利であると考えられる。(これについてはもう少し調査が必要である。)

TR や MEM では解の滑らかさは Regularization parameter  $\alpha$  によって決まるが、OEM と同様、解の平滑化には高度分解能の代償が伴うため、解の滑らかさと高度分解能のバランスを保つ必要がある。

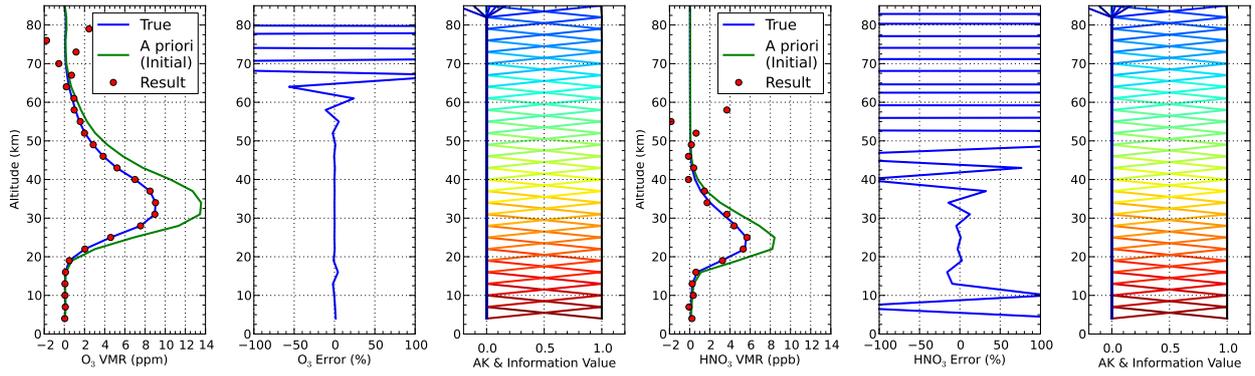


図 1: シミュレーションデータ解析結果 (OEM)

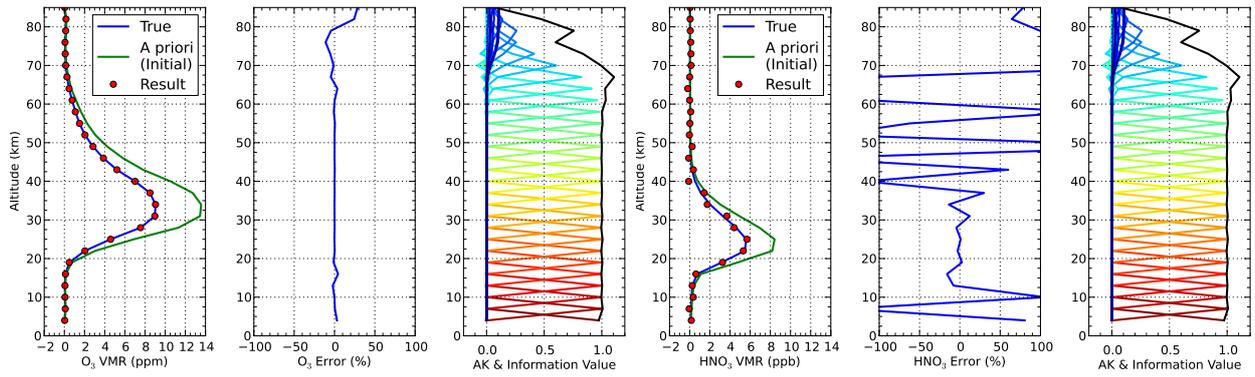


図 2: シミュレーションデータ解析結果 (TR  $L_0$ )

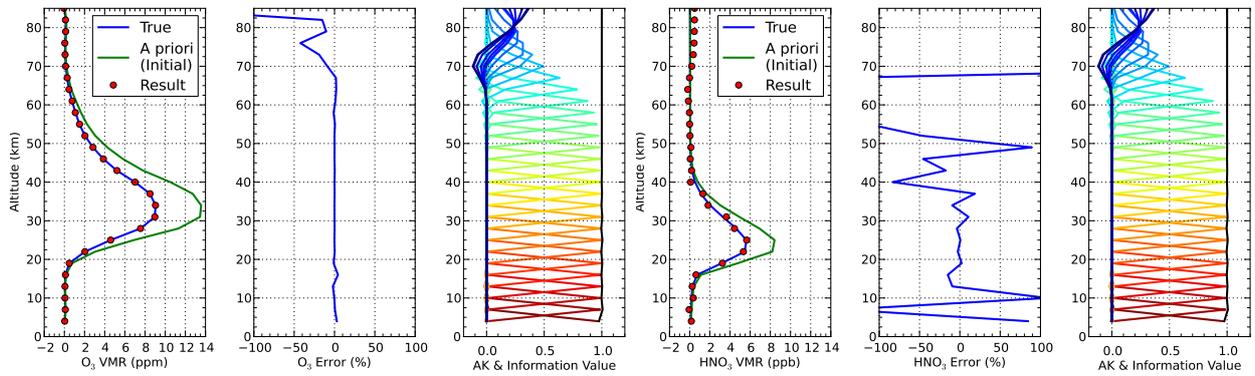


図 3: シミュレーションデータ解析結果 (TR  $L_1$ )

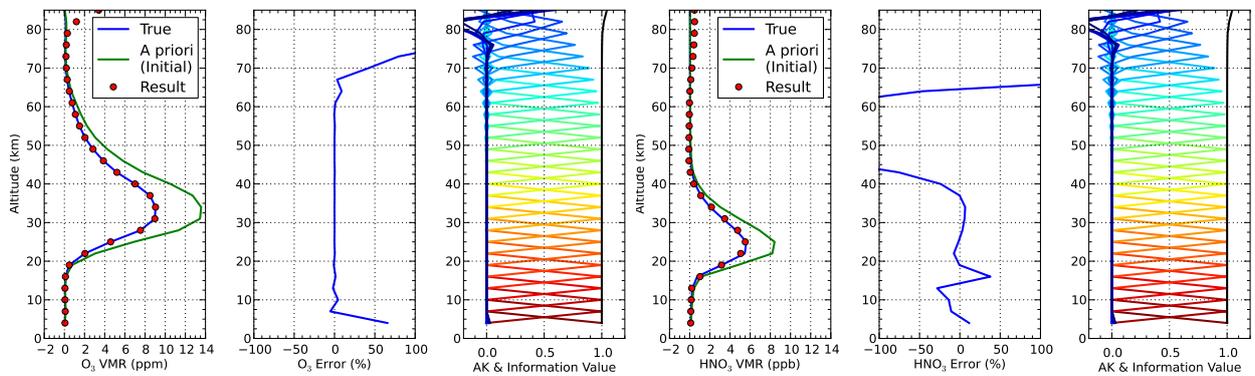


図 4: シミュレーションデータ解析結果 (MEM)

## 4. 実データ解析

今回用いた実データの取得条件を表2に、校正された輝度温度スペクトルデータ (L1B データ) を図5に示す。

表 2: 実データ取得条件

日付	2009/10/12
時間	17:40 (UTC)
緯度	南緯 31 度
経度	東経 82 度
観測バンド	A (624.32 – 625.52 GHz)

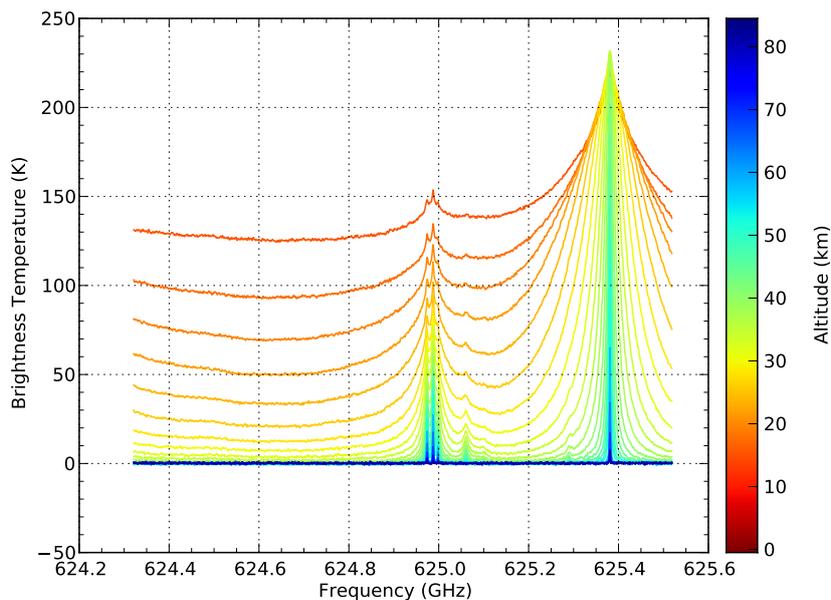


図 5: L1B データ (2009 年 10 月 12 日取得)

解析に用いたプログラムは L2 ver. 0150 と ver. 0200 の中間バージョン (OEM) より開発し、TR ( $L_1$ ) を実装した。リトリバル項目は  $O_3$ 、HCl、 $CH_3CN$ 、HOCl、 $HNO_3$ 、BrO、温度であり、ベースラインおよび高度オフセットは非リトリバル項目 (OEM で最適化した値に固定) とした。

リトリバル結果は図6のようになった (VERY preliminary)。Averaging kernel が広がっていることから分かるように、かなり Regularization を強めにしないと適当な解が得られなかった。原因は調査中である。

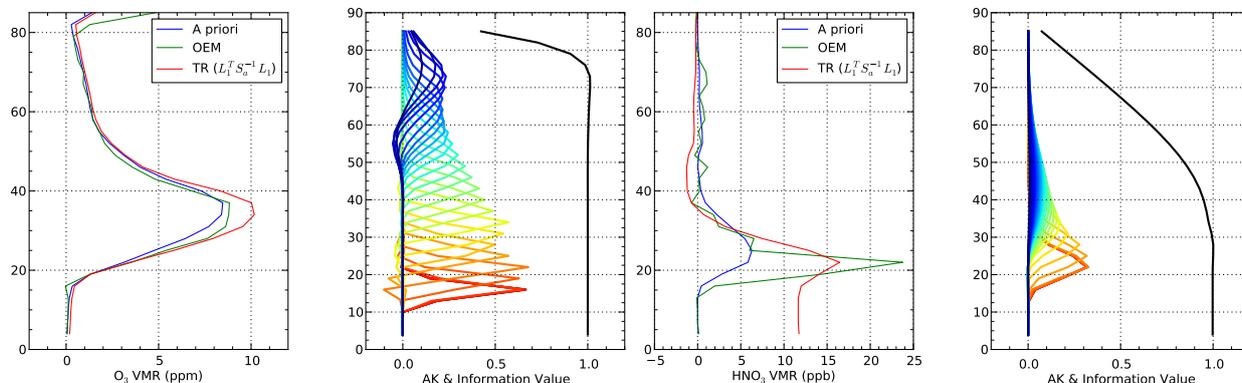


図 6: 実データ解析結果 (TR  $L_1$ ) (VERY preliminary)

## 5. まとめと展望

SMILES L2 データ処理における逆解析手法を改善するための検討を行った。Optimal Estimation Method (OEM)、Tikhonov Regularization (TR)、および Maximum Entropy Method (MEM) を比較した結果、TR (Regularization matrix に  $L_1$  を使用した場合) または MEM を適用することによって、より良い解が得られることが分かった。今後はシミュレーションデータではなく実データの解析をさらに進め、Regularization parameter の調整方法の改良等を行い、実際の SMILES L2 処理に使用できるアルゴリズムの開発を目指す。

## References

- [1] C. D. Rodgers, Retrieval of atmospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation, *Rev. Geophys.* 14 (4) (1976) 609–624.
- [2] C. D. Rodgers, Characterization and Error Analysis of Profiles Retrieved From Remote Sounding Measurements, *J. Geophys. Res.* 95 (D5) (1990) 5587–5595.
- [3] C. D. Rodgers, *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, World Scientific, 2000.
- [4] T. Imamura, T. Ogawa, A Sensitivity Study to Infer Tropospheric Ozone from Atmospheric Thermal Emission at  $9.6\mu\text{m}$  Wavelength Measured with a Nadir View from a Satellite, *J. Meteor. Soc. Japan* 73 (2) (1995) 255–258.
- [5] C. Takahashi, S. Ochiai, M. Suzuki, Operational retrieval algorithms for JEM/SMILES level 2 data processing system, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 111 (1) (2010) 160 – 173.
- [6] A.-I. N. Tikhonov, *Solutions of Ill Posed Problems*, Springer, 1979.
- [7] F. M. Ramos, H. F. C. Velho, J. C. Carvalho, N. J. Ferreira, Novel approaches to entropic regularization, *Inverse Problems* 15 (5) (1999) 1139–1148.
- [8] A. Doicu, F. Schreier, S. Hilgers, A. von Bargaen, S. Slijkhuis, M. Hess, B. Aberle, An efficient inversion algorithm for atmospheric remote sensing with application to UV limb observations, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 103 (1) (2007) 193 – 208.
- [9] N. Livesey, W. Van Snyder, W. Read, P. Wagner, Retrieval algorithms for the EOS Microwave limb sounder (MLS), *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 44 (5) (2006) 1144 – 1155.
- [10] M. Ridolfi, L. Sgheri, A self-adapting and altitude-dependent regularization method for atmospheric profile retrievals, *Atmospheric Chemistry and Physics* 9 (6) (2009) 1883–1897.
- [11] 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 Measurements, *J. Atmos. Oceanic Technol.* 23 (12) (2006) 1657–1667.
- [12] A. Doicu, T. Trautmann, F. Schreier, *Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems*, Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [13] P. C. Hansen, D. P. O’Leary, The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems, *SIAM J. Sci. Comput.* 14 (1993) 1487 – 1503.