

Tikhonov regularization と Non-voigt line shape による SMILES retrieval

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, ²JAXA/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

Abstract

我々はSMILESデータの高精度な特徴を最大限に引き出すためにL2データ処理の高度化を進めている。本研究では、i) 逆解析アルゴリズムにTikhonov Regularization Method (TRM)を取り入れる、ii) ForwardモデルにNon-voigt line shape (GalatryまたはSD-Voigt)を取り入れる、の2つの修正を行うことにより、導出される高度プロファイルがどのように変化するかを調べた。TRMを取り入れた結果、O₃、HCl、HNO₃についてS/N比が低い高度領域のプロファイルが顕著に改善されることが確かめられた。O₃、HClのメインラインにNon-voigt line shapeを取り入れた場合、O₃、HClの値に1%未満、HOCl、CH₃CNの値に数%程度の変化が見られた。

1. はじめに

SMILES(Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder)は国際宇宙ステーションの日本実験棟暴露部に搭載され、2009年10月から2010年4月までの約半年間に渡って地球大気の観測を行った。SMILESは4K冷凍機を使ってサブミリ波受信系を冷却することで実現された低ノイズを特徴としており、成層圏・中間圏におけるオゾン、HCl等の微量気体の情報に富んだ輝度温度スペクトルをこれまでにない精度で測定した[1]。SMILESのL2データ処理では、校正された輝度温度スペクトル(L1Bデータ)から微量気体分子の高度プロファイル等を導出する[2, 3]。Figure 1にL2データ処理のフローチャートを示す。本研究では逆解析で使用する正則化アルゴリズム、および吸収係数計算で使用される吸収線形の高度化について検討を行った。

2. Tikhonov Regularization Method

SMILESのL1Bデータから得られる校正済み輝度温度スペクトルをベクトル $\mathbf{y}$ (要素数 m)、L2処理によって導出する微量気体分子の高度プロファイル等をベクトル $\mathbf{x}$ (要素数 n) で表すと、先験値(a priori)ベクトル $\mathbf{x}_a$ の近傍において

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

のような線型近似が成り立つ。ここで、 $\mathbf{F}$ は装置モデルや放射伝達モデルを組み込んだForwardモデルを表す関数、 $\mathbf{K} = \partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{x} = \nabla\mathbf{F}$ はWeighting Function (Jacobian)である。SMILESの場合、 $m \sim 60000$ 、 $n \sim 250$ 程度の値を持つ。式(1)から得られる独立な条件式の数($\mathbf{K}$ の0より十分大きい特異値の数)は未知パラメータの数(n)に比べて小さいため、不良設定問題になっている。また、実際の測定値はランダムノイズによって真値を中心に広がっている。このような問題の解法として一般化逆行列を使う方法や最小二乗法を使う方法が考えられるが、ここでは後者を用いる。一般に最小二乗法では次式で表される χ^2 (誤差で規格化したスペクトル残差)を最小化する[4]。

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

$\mathbf{S}_y$ は測定値の分散共分散行列であり、SMILESの場合、対角項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、非対角項は0とする。ただし、不良設定問題では χ^2 の最小値近傍に解が無数に存在し、 χ^2 を最小化するだけでは解が一意に求まらないため、 χ^2 に条件 c を加えたCost Function: $M(\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}) + c(\mathbf{x})$ を最小化する。解が先験値から遠い場合は式(1)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 $\delta\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$ が十分小さくなるまで式(3)を反復計算することで高速かつ安定して解を求められる。パラメータ λ を0にすると式(3)はGauss-Newton法の式に一致する。この方法は式(5)のようなHessianの近似によって計算が困難な2次

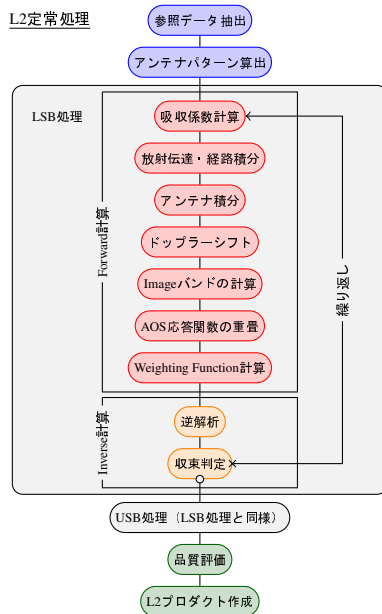


Figure 1: L2定常処理のフローチャート

微分を用いず、Newton法のような2次収束による高速性を持つ。ただし、初期値が悪いと発散することがあるので、 $M(\mathbf{x}_i)$ 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 λ の値を大きくして正定値行列 $\mathbf{D}$ を加え、 $\delta\mathbf{x}$ を最急降下法と同様の方向($\nabla M(\mathbf{x}_i)$)に向ける。

$$\delta\mathbf{x}_i = -[\mathbf{H}_i + \lambda\mathbf{D}]^{-1} \nabla M(\mathbf{x}_i) \quad (3)$$

$$\nabla M(\mathbf{x}_i) = -2\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) + \nabla c(\mathbf{x}_i) \quad (4)$$

$$\nabla^2 M(\mathbf{x}_i) \approx 2\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \nabla^2 c(\mathbf{x}_i) \equiv \mathbf{H}_i \quad (5)$$

ここで、付加条件 c を式(6)のように選ぶとOptimized Estimation Method (OEM)となり、式(7)のように選ぶとTikhonov Regularization Method (TRM) となる[5]。

$$c_{\text{OEM}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (6)$$

$$c_{\text{TRM}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{L}^T \mathbf{S}_r^{-1} \mathbf{L} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (7)$$

$\mathbf{S}_a$ は先験値の分散共分散行列である。解の真値が $\mathbf{x}$ である確率が、 $\mathbf{x}_a$ 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、Bayseの定理を用いて測定値 $\mathbf{y}$ の条件下で事後確率を最大化することでOEMが導ける[6]。システム雑音温度から求まる $\mathbf{S}_y$ と異なり、一般的に $\mathbf{S}_a$ の正確な値を知ることは難しく、正規分布しているとも限らないが、 $\mathbf{S}_a$ の対角項(S_a)は $\mathbf{x}$ の分散の目安となる。SMILESでは O_3 、 HCl 等の微量大気分子や温度の高度プロファイル、アンテナ仰角オフセットといった様々な物理量の同時リトリバルを行っているが、 $\mathbf{S}_a$ を使ってこれらの次元を揃えることができる。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 $\mathbf{D}_a^{-1}$ が使われる。また、 $\mathbf{S}_a$ の非対角項に例えば $[S_a]_{ij} = [S_a]_{ii} \exp[-|z_i - z_j|/z_s]$ のような値を入れて高度 $\mathbf{z}$ にスケール高度 z_s の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や高度グリッドの調整を行わないと解が振動することがある。

一方、TRMの付加条件は先験値との差分($\mathbf{x} - \mathbf{x}_a$)を小さくするためのものであり、正則化行列 $\mathbf{L}$ は適当な n 次差分行列 $\mathbf{L}_n$ の線型結合である[7]。例えば $\mathbf{L}_0$ (恒等行列)を用いれば $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$ が直接的に最小化される。 $\mathbf{L}_1$ であれば、 $[\mathbf{L}_1 \mathbf{x}]_i = x_i - x_{i-1}$ であるから、 $\mathbf{x}_a$ に一定のオフセットを加えた解も許容される。 $\mathbf{L}_2$ 、 $\mathbf{L}_3$ 、 $\dots$ と次数を上げるほど $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$ の最小化は間接的になるが、より多くの高度の解が混ざるために高度分解能が悪くなるので適度な次数を選ぶ必要がある。 $\mathbf{S}_r$ は正則化の"分散共分散行列"に相当し、分子ごとの正則化パラメータ α の逆数からなる対角行列である($[S_r^{-1}]_{ii} = \alpha$)。この α は χ^2 と c_{TRM} 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、適度な α の選択が重要である。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Residual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点に設定する方法等がある[8]。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。

本研究では O_3 、 HCl 、 HNO_3 に対してOEMとTRMを組み合わせた式(8)のような付加条件を課したハイブリッド法を取り入れた。

$$c_{\text{hyb}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{L}^T \mathbf{S}_r^{-1} \mathbf{L} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (8)$$

正則化パラメータの決め方は、差分 $\mathbf{L}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$ が規格化されるように $[S_r^{-1}]_{ii} = \alpha [D_a^{-1}]_{ii}$ とした上で、信号が強い O_3 、 HCl に対しては $\alpha = 10$ 、信号が比較的弱い HNO_3 に対しては $\alpha = 100$ と決めた。現状では正則化行列に分解能の低下が少ない $\mathbf{L}_1$ を用いており、OEMの高度相関も併用している。式(3)に式(8)を入れると以下の式が得られる。

$$\delta\mathbf{x}_i = [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_c^{-1} + \lambda \mathbf{D}_a^{-1}]^{-1} \times [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_c^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] \quad (9)$$

$$\mathbf{S}_c^{-1} = \mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{L}^T \mathbf{S}_r^{-1} \mathbf{L} \quad (10)$$

解の不確定性は $\mathbf{S}_x^{-1} = \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_c^{-1}$ で与えられ、 $\delta\mathbf{x}_i^T \mathbf{S}_x^{-1} \delta\mathbf{x}_i = \delta\mathbf{x}_i^T [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_c^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] \sim n$ が収束の目安である。測定データから十分な情報が得られている有効高度範囲はエラー比が $\sqrt{[S_x]_{ii}/[S_c]_{ii}} < 0.5$ を満たすことが目安となる。 O_3 のリトリバル例をFig. 2に示す。OEMで見られた高度50km以上における振動がOEM+TRMで取り除けていることが分かる。エラー比や残差には目立った変化は見られない。 HCl 、 HNO_3 でも同様の結果が得られている。

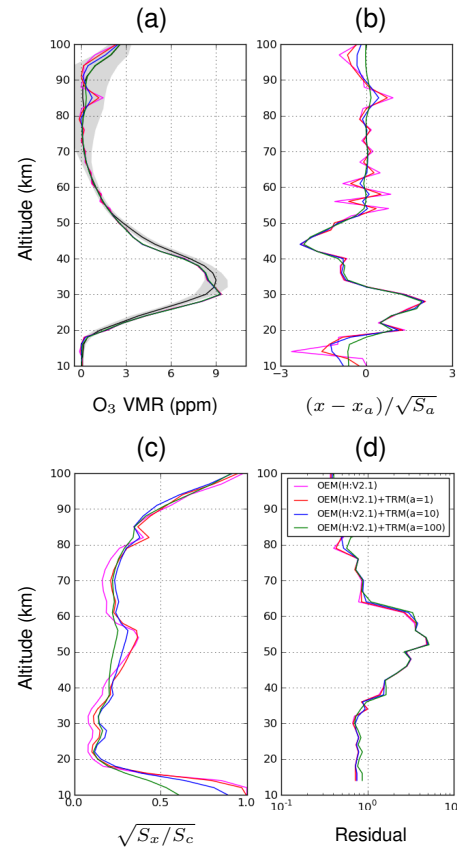


Figure 2: Tikhonov regularizationを用いた O_3 高度プロファイルリトリバル結果: (a) O_3 高度プロファイル (b) アプリオリからの差分 (c) エラー比 (d) スペクトル残差

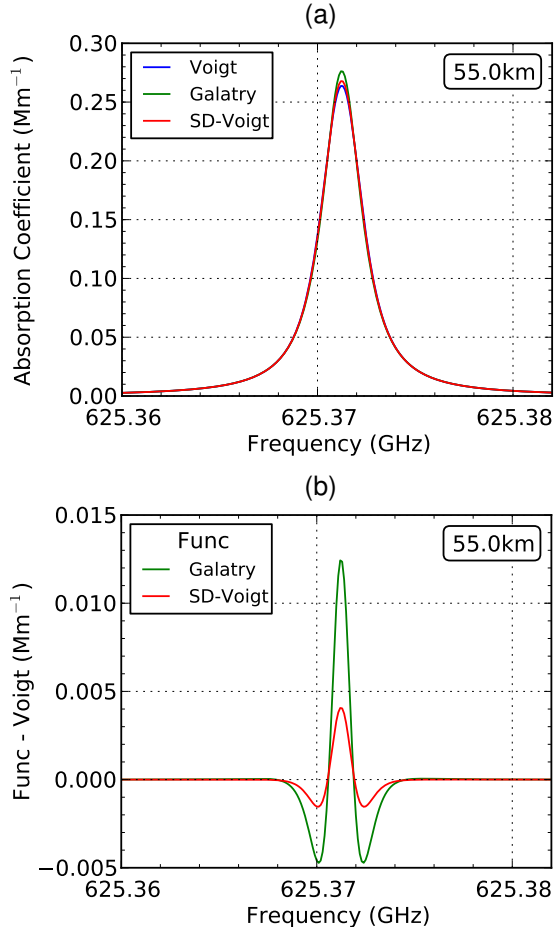


Figure 5: (a) Voigt, Galatry, SD-Voigtの各吸収線形モデルで計算した吸収係数 (b) Voigtからの差分

によって計算する。 (k_B) はBoltzmann定数、 n_{air} は γ の温度依存性の冪) D は分子拡散係数であり、次式により求められる[16]。 (μ, μ_a) は対象分子および空気分子の質量(AMU)、 n は空気分子の数密度(molec./m³)、 T は絶対温度(K)

$$D = \frac{1.52 \times 10^{20}}{n} \sqrt{\left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_a}\right) T} \text{ (m}^2/\text{s)} \quad (18)$$

Figure 5にVoigt, Galatry, SD-Voigtの各関数を使って計算したO₃の吸収係数とVoigtからの差分を示す。Non-voigt line shapeでは面積を一定に保ちつつ線幅が狭くなるため、強度は線中心で大きく、外側で小さくなる。したがって、Voigtからの差分はW字型になることが期待される。

Figure 6に高度15~100 kmの範囲でVoigtとNon-voigt line shapeの吸収係数の違いを調べた結果を示す。SD-Voigtは全高度範囲において線中心付近の強度が強くなっており、すなわち線幅が狭くなっていることが分かる。一方、Galatryは高度40 km以下でVoigtとの違いがあまり見られない。これはDicke Narrowingの効果がDoppler領域で現れるのに対し、線幅の速度依存性は全ての圧力領域で有効であることと整合的であ

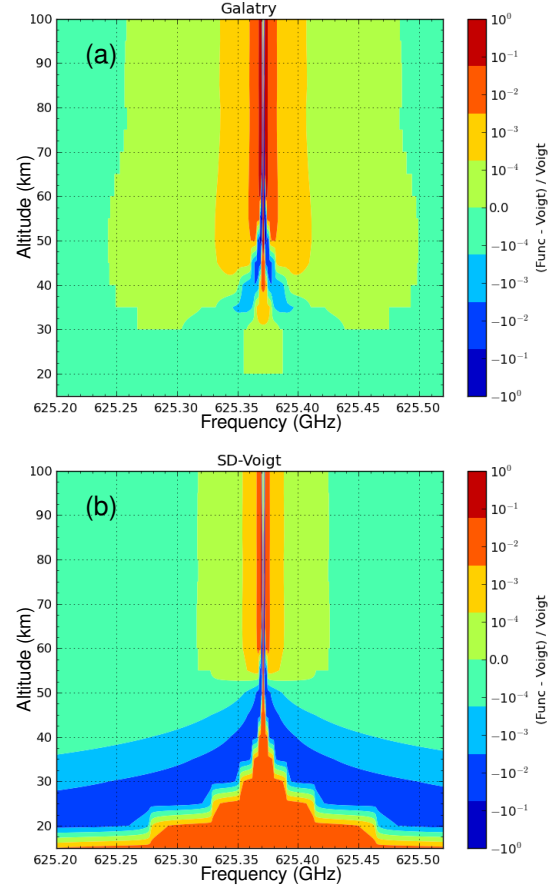


Figure 6: Non-voigt line shapeとVoigtで計算した吸収係数の差分: (a) Galatry (b) SD-Voigt

る。GalatryとSD-Voigtの違いは特に高度50 km以下で顕著であり、この範囲ではSD-Voigtの方が線幅の減少が大きくなっている。

次に、Non-voigt line shapeがリトリバル結果に与える影響を調べた。まず、SMILES L2 ForwardモデルにGalatry関数、SD-Voigt関数を組み込み、SMILES Band A、Band BにあるO₃、HClの主要ライン(4本)にVoigt、Galatry、またはSD-Voigt関数、他のラインにVoigt関数を使って輝度温度スペクトルを作成した。期間は2010年3月31日の3時間とし、大気パラメータ(温度、気圧、風速、分子混合比等)にはSMILES観測点に近いWACCMデータ[17]を使用した。このシミュレーションスペクトルをSMILES L2 Inverseモデルに入力し、全てのラインにVoigt関数を使って逆解析を行った。この結果、約170(昼間75、夜間95)の収束した結果が得られた。Figure 7にO₃の比較結果を示す。差分プロファイルを見ると、Galatryは高度30~40 kmで+0.2%、高度50~80 kmで+0.5%程度の変化が見られる。高高度の振動は測定ノイズに由来し、TRMを導入することで解消されるものである。同様に、SD-Voigtは高度20~30 kmで-0.2%、高度50~80 kmで+0.5%程度の変化が見られる。GalatryとSD-Voigtで変化の方向や高度範囲が異なるのはFig. 6に見られる吸収係数の変化から説明がつく。

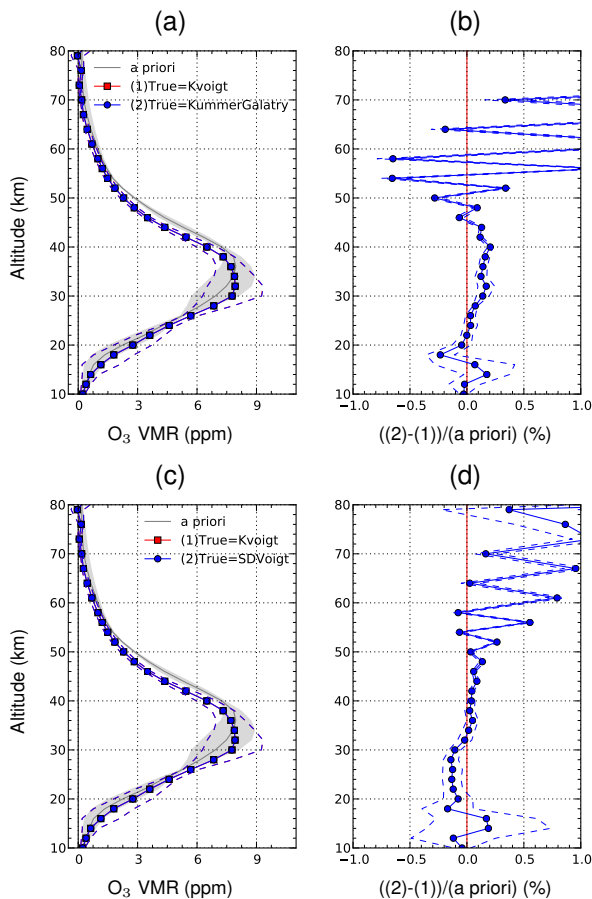


Figure 7: Non-voigt line shape導入によるO₃リトリバル結果への影響: (a) Galatry & Voigt (b) Galatry - Voigt (c) SD-Voigt & Voigt (d) SD-Voigt - Voigt

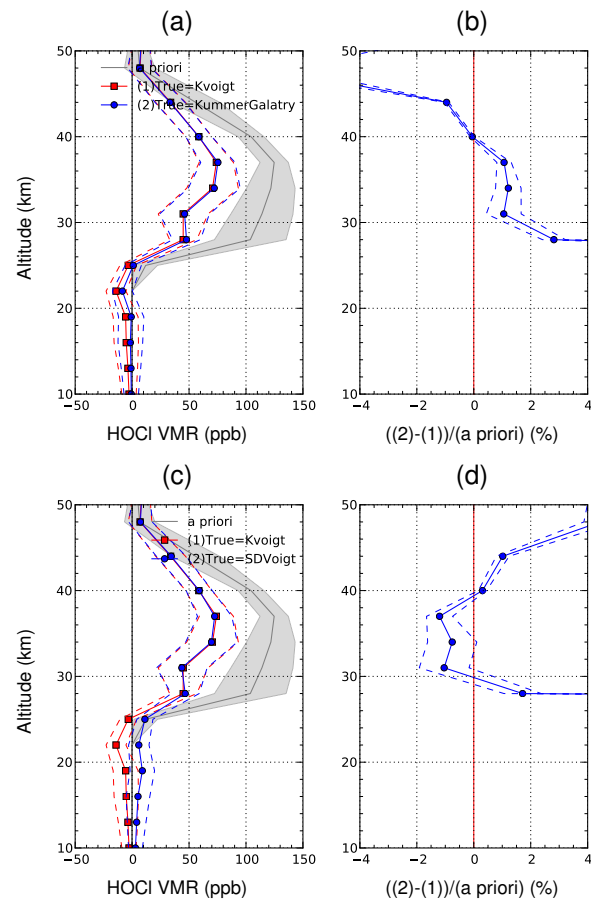


Figure 8: Non-voigt line shape導入によるHOClリトリバル結果への影響: (a) Galatry & Voigt (b) Galatry - Voigt (c) SD-Voigt & Voigt (d) SD-Voigt - Voigt

今回はO₃、HClの主要ラインのみにNon-voigt line shapeを適用したが、これらのライン上に吸収線を持つ他の分子種のリトリバル結果にも影響を与える。例えばHOClの場合はFig. 8のように、高度30~40 kmの範囲においてGalatryで+1%、SD-Voigtで-1%程度の変化が見られた。このようにNon-voigt line shapeを考慮したことでO₃、HCl、HOCl、CH₃CN、温度に見られた値の変化をTable 1にまとめた。

GalatryとSD-VoigtのどちらにおいてもSMILESのリトリバル結果に影響が見られたが、変化の方向や高度範囲に違いが見られた。SMILESの観測データからはどちらが正しいかを決定するのは難しいが、最近の実験室データ[14, 18, 19]を見るとSD-Voigtの方が正しい可能性が高いと思われる。分子同士の衝突が2体問題として扱える圧力範囲においてはGalatryのパラメータ β 、SD-Voigtのパラメータ γ_2 は圧力に比例することが期待される。しかしながら、衝突相手の分子が相対的に非常に軽い場合(e.g. He)を除き、衝突幅がDoppler幅の数倍になる圧力領域においてGalatryのみで線形状のフィッティングを行うと、 β は圧力に対して非線型の振る舞いを示し、さらに高い圧力ではフィッティングが破綻することが報告されている。つまり、線幅の減少は主に線幅の速度依存性によるものであり、Dicke Narrowingの効果は小さいと考えられる。Dicke Narrowingの効果が無視できない場

合においてはSD-Galatryモデル[20]を考慮すべきであるが、通常はSD-Voigtモデルで十分であると考えられる。

Table 1: Non-voigt line shape導入の影響

Product	Band	Galatry diff	km	SD-Voigt diff	km
O ₃ (day)	A	+0.2%	30~40	-0.2%	20~30
O ₃ (day)	B	-0.2%	10~20	-0.2%	20~30
O ₃ (day)	A	+0.5%	50~80	+0.5%	50~80
O ₃ (day)	B	+0.5%	50~80	+0.3%	50~80
O ₃ (night)	A	+0.2%	30~40	-0.3%	20~30
O ₃ (night)	B	-0.2%	15~25	-0.3%	20~30
O ₃ (night)	A	+0.5%	50~80	+0.3%	50~80
O ₃ (night)	B	+0.4%	50~80	+0.2%	50~80
HCl	A	-0.3%	15~25	-0.8%	15~25
HCl	B	-0.2%	15~20	-0.4%	15~20
HOCl (day)	A	+1%	30~40	-1%	30~40
HOCl (night)	A	+2%	30~40	-3%	30~40
CH ₃ CN	A	+3%	10~40	+6%	10~30
Temperature	A,B	-0.1K	20~40	+0.1K	20~40

4. まとめ

SMILES L2データ処理で行われている逆解析にTikhonov Regularization Method (TRM) を取り入れる、吸収係数の計算にNon-voigt line shapeを取り入れる、という2つの修正を行うことにより、リトリバル結果がどのような影響を受けるかを調べた。

O₃、HCl、HNO₃にOEM+TRMのハイブリッド法を取り入れた結果、OEMだけでは振動していた感度の低い高度領域において、有効高度範囲やスペクトル残差に悪影響を与えることなく、滑らかな解が得られるようになった。今後は信号強度が弱い他の分子種にも同様の方法を適用することを検討している。現状では正則化行列に1次の差分行列 L_1 を用いているが、信号強度が弱い分子種に対してはMLS[21]と同様に2次の差分行列 L_2 の使用も検討している。

SMILES Band A、Band BにあるO₃(1本)、HCl(3本)の主要ラインにNon-voigt line shapeとしてGalatry、SD-Voigtの2つの線形状を仮定してシミュレーションを行った結果、O₃、HClのリトリバル結果に1%未満、HOCl、CH₃CNのリトリバル結果に数%程度、温度のリトリバル結果に0.1K程度の変化が見られた。GalatryとSD-Voigtでは変化の方向や高度範囲に違いが見られた。文献によると線形状のVoigtからのずれは主に線幅の速度依存性に由来し、Dicke Narrowingの効果は小さいと考えられる。現状ではNon-voigt line shapeの計算に時間がかかる割に効果が小さいためにL2定常処理には組み込まれていないが、今後高速化に成功すれば実装することも考えている。

References

- [1] K Kikuchi, et al., Overview and early results of the Superconducting Submillimeter - Wave Limb - Emission Sounder (SMILES), J. Geophys. Res., 115(D23), 2010.
- [2] C. Takahashi, S. Ochiai, and M. Suzuki, Operational retrieval algorithms for JEM/SMILES level 2 data processing system, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 111(1):160-173, 2010.
- [3] C. Mitsuda, et al., Current status of level 2 product of Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES), Proc. SPIE 8176, 2011.
- [4] W. H. Press, et al., Numerical recipes in C (2nd ed.): the art of scientific computing, Cambridge University Press, New York, 1992.
- [5] 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.
- [6] C. D. Rodgers, Inverse Methods For Atmospheric Sounding: Theory and Practice, World Scientific, 2000.
- [7] A. Doicu, T. Trautmann, and 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., 9:1883- 1897, 2009.
- [9] K. Imai, M. Suzuki, and C. Takahashi, Evaluation of Voigt algorithms for the ISS/JEM/SMILES L2 data processing system, Advances in Space Research, 45:669-675, 2010.
- [10] R. H. Dicke, The Effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines, Phys. Rev. 89(2):472-473, 1953.
- [11] L. Galatry, Simultaneous Effect of Doppler and Foreign Gas Broadening on Spectral Lines, Phys. Rev. 122(4):1218- 1223, 1961.
- [12] S. G. Rautian, and I. I. Sobel'man, Usp. Fiz. Nauk. 90:209-236, 1966. [English translation: The effect of collisions on the Doppler broadening of spectral lines, Sov. Phys. Usp, 9(5):701-716, 1967.]
- [13] P. R. Berman, Speed-dependent collisional width and shift parameters in spectral profiles, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 12(9):1331-1342, 1972.
- [14] H. Tran, et al., Non-Voigt line-shape effects on retrievals of atmospheric ozone: Collisionally isolated lines, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 111:2012-2020, 2010.
- [15] G. Casa, et al., The line shape problem in the near-infrared spectrum of self-colliding CO₂ molecules: Experimental investigation and test of semiclassical models, J. Chem. Phys., 130:184306, 2009.
- [16] P. M. Banks, and G. Kockarts, Aeronomy, Academic Press, 1973.
- [17] A. Kunz, et al., Chemical and dynamical discontinuity at the extratropical tropopause based on START08 and WACCM analyses, J. Geophys. Res., 116(D24), 2011.
- [18] J.-F. D'Eu, B. Lemoine, and F. Rohart, Infrared HCN Lineshapes as a Test of Galatry and Speed-Dependent Voigt Profiles, J. Mol. Spectrosc., 212(1):96-110, 2002.
- [19] F. Rohart, et al., Galatry versus speed-dependent Voigt profiles for millimeter lines of O₃ in collision with N₂ and O₂, J. Mol. Spectrosc., 251:282-292, 2008.
- [20] R. Ciuryło, and J. Szudy, Speed-dependent pressure broadening and shift in the soft collision approximation, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 57(3):411-423, 1997.
- [21] N. J. Livesey, and W. Van Snyder, EOS MLS Retrieval Processes Algorithm Theoretical Basis, JPL D-16159, Version 2.0, 2004.