

Метод точек перегиба, анализ ошибок регуляризации, анализ данных гетеродинного спектрометра

Факультет Космических Исследований, МГУ

Москва

Поточечная апостериорная оценка решения 1

Пусть заданы множества $Z = Z[a, b]$, $U = U[a, b]$, задано компактное подмножество $\mathcal{M} \subset Z$ ограниченных функций $|z(s)| < C^{max}$. Также часто встречаются случаи, когда

1. ограниченных монотонно возрастающих (не убывающих),
2. выпуклых вверх вниз ограниченных функций
3. комбинированный множества монотонных, выпуклых функций

Поточечная апостериорная оценка решения 2

Рассмотрим задачу в операторном виде:

$$A[x, z(s)] = u(x), \quad z(s) \in \mathcal{M}, \quad u(x) \in U[c, d].$$

с приближенным данными

$$|u(x) - u_\delta(x)| \leq \delta(x)$$

$$|A[x, z(s)] - A_h[x, z(s)]| \leq C^{\max} h(x), \quad x \in [c, d], \quad \forall z(s) \in \mathcal{M}.$$

Поточечная апостериорная оценка решения 3

Введем функцию $\Delta(x) = \delta(x) + h(x)C^{max}$, определим множество

$$\mathcal{Z}_{\Delta}(\mathcal{M}) = \{z(s) \in \mathcal{M} : \\ - \Delta(x) \leq A_h[x, z(s)] - u_{\delta}(x) \leq \Delta(x), x \in [c, d]\},$$

для регуляризованного $z_{\eta}(s) \in \mathcal{Z}_{\Delta}(\mathcal{M})$ решения справедлива оценка:

$$|z_{\eta}(s) - \bar{z}(s)| \leq \sup\{|z_{\eta}(s) - z(s)| : z(s) \in \mathcal{Z}_{\Delta}(\mathcal{M})\} \equiv \mathcal{E}_{\Delta}(s), s \in [a, b].$$

Величина $\mathcal{E}_{\Delta}(s)$ может быть вычислена для ряда множеств в конечномерном случае.

Поточечная апостериорная оценка решения 4

Аналогично для оператора которого справедлива аппроксимация

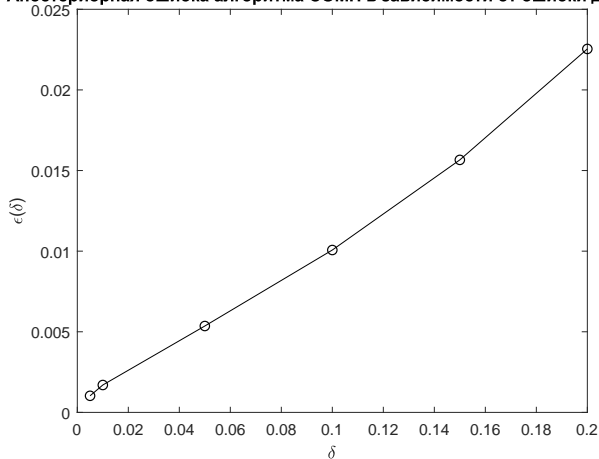
$$\|A_h z - u_\delta\| \leq \delta + h\Omega[z] = \Delta_\eta$$

$$\|z_h - \bar{z}\| \leq \sup\{\|z_\eta - z\| : z(s) \in \mathcal{D}, \Omega[z] \leq C\Omega[z_\eta], \\ \|A_h z - u_\delta\| \leq \Delta_\eta\} \equiv \epsilon_\Omega(\eta).$$

Для оценочной функции $\epsilon_\Omega(\eta)$ доказано $\epsilon_\Omega(+0) = 0$.

График среднеквадратичной ошибки

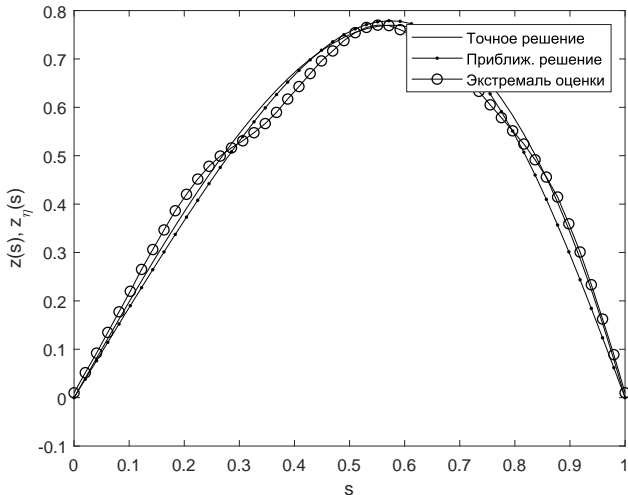
Апостериорная ошибка алгоритма СОМН в зависимости от ошибки данных



Апостериорная точность метода квазирешений.

График среднеквадратичной ошибки

Сравнение точного решения задачи с приближением по методу квазиразностей и экстремально апостериорной оценки погрешности.



Поточечная оценка ϕ -ий с ограниченной вариацией 1

Рассмотрим задачу на области значения и области определения $Z = V[a, b]$ (V -пространство функций с ограниченной вариацией), $U = L_2[c, d]$,

$$A[x, z(s)] = u(x), z(s) \in \mathcal{D}.$$

Поточечная оценка ф-ий с ограниченной вариацией 2

Если $\lim_{h, \delta \rightarrow 0} \|z_{h\delta}(s)\|_V = \|\bar{z}(s)\|_V$, где $\bar{z}(s)$ - точное решение и определено множество

$$Z = \{z(s) : \|z\|_V \leq C\|z_{hs}\|_V, \\ |A_h[z(s)] - u_\delta(x)| \leq \Delta(x), \forall x \in [x_0, x_1]\}, \quad (1)$$

где $\Delta(x) = \delta(x) + Ch(x)\|z_{h\delta}\|_V$. Тогда справедлива поточечная апостериорная оценка точности приближенного решения

$$|z_\eta(s) - \bar{z}(s)| \leq \sup\{|z_{h\delta}(s) - z(s)| : z(s) \in Z\} \equiv \mathcal{E}(s), s \in [a, b]$$

Поточечная оценка ϕ -ий с ограниченной вариацией 2

Конечномерный аналог множества Z_η :

$$\begin{aligned}\hat{Z}_\eta = \{ \hat{z} \in \hat{K} : |z_1| + \sum_{k=1}^{N-1} |z_{k+1} - z_k| \leq C\hat{R}_\eta, \\ - \Delta_\eta(x_i) \leq (\hat{A}\hat{z})_i - u_i \leq \Delta_\eta(x_i), i = 1..M \},\end{aligned}$$

апостериорная оценка примет вид:

$$|\bar{z}(s_k) - (z_\eta)_k| \leq \sup\{|z_k - (z_\eta)_k| : \hat{z} \in \hat{Z}_\eta\} \equiv \hat{\mathcal{E}}(s), s \in [a, b].$$

Метод точек перегиба

Пусть вектор значений $\{\rho_i\}$, $i = 1, M$ описывает вектор концентрации $\rho_i = \rho(h * i)$, $h = H/(M - 1)$. И пусть известно, что точка $k * h$ является точкой перегиба решения, тогда матрицу ограничений \mathcal{F} можно записать в виде:

$$\begin{pmatrix} -2\rho_1 + \rho_2 \leq 0, & i = 1, \\ \rho_{i-1} - 2\rho_i + \rho_{i+1} \leq 0, & i = 2, k - 1, \\ -\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1} \leq 0, & i = k + 1, M - 1, \\ 2\rho_{M-1} - \rho_M \leq 0, & i = M \end{pmatrix}$$

Оценка решения с использованием метода точек перегиба

Рассмотрим задачу

$$\tau(\nu) = \int_0^H K(\nu, z) \rho(z) dz, \quad \nu \in [\nu_0, \nu_1],$$

Аппроксимируем выпуклую функцию $\rho(z)$ так, что

$$\sum_{j=1}^M \varphi_j^l(z) \rho_j \leq \rho(z) \leq \sum_{j=1}^M \varphi_j^r(z) \rho_j, \quad \text{при этом будет справедливо}$$

$$\sum_{j=1}^M \left(\int_0^H K(\nu, z) \varphi_j^l(z) dz \right) \rho_j \leq \tau(\nu) \leq \sum_{j=1}^M \left(\int_0^H K(\nu, z) \varphi_j^r(z) dz \right) \rho_j,$$

для $\nu \in [\nu_0, \nu_1]$, тогда после дискретизации справедливы матричные неравенства $L\bar{\rho} \leq \bar{\tau}_\delta + \delta$, $\bar{\tau}_\delta - \delta \leq R\bar{\rho}$.

Аппроксимация выпуклой функции

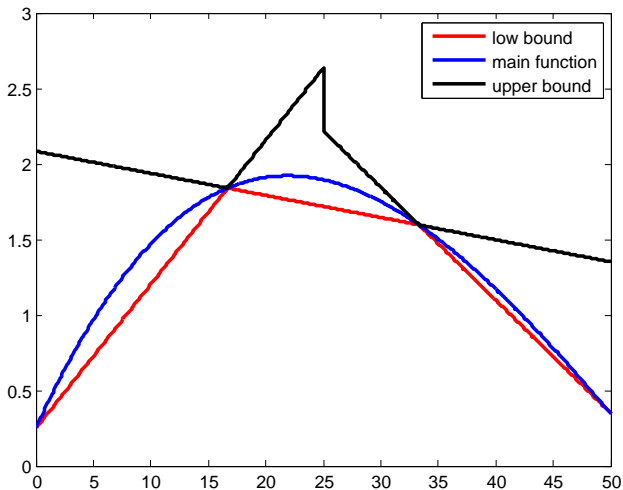


Иллюстрация метода точки перегиба 1

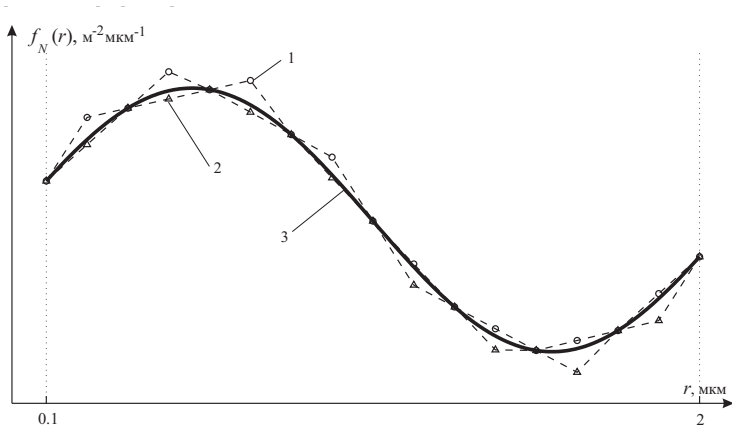
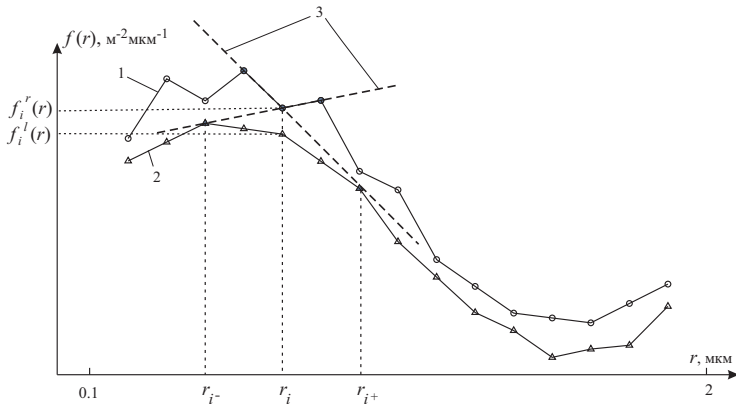


Иллюстрация метода точки перегиба 2



Построение максимальной и минимальной границы

Итак, область содержащая решение при заданных шумах спектра, описывается неравенствами $L\bar{\rho} \leq \bar{\tau}_\delta + \delta$, $-R\bar{\rho} \leq -\bar{\tau}_\delta + \delta$, $\mathcal{F}\bar{\rho} \leq 0$. Данные неравенства объединим в одно $\hat{G}\bar{\rho} \leq \hat{g}$, которое описывает множество, представляющее собой выпуклый ограниченный многогранник. Используя симплекс метод, можно получить величины

$$\rho_j^{\min} = \inf\{\rho_j : \hat{G}\bar{\rho} \leq \hat{g}\},$$

$$\rho_j^{\max} = \inf\{-\rho_j : \hat{G}\bar{\rho} \leq \hat{g}\},$$

ограничивающие сверху и снизу искомое решение.

Системы мониторинга парниковых газов



Системы мониторинга парниковых газов

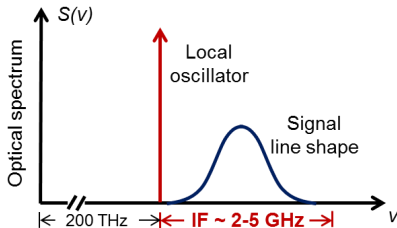


Внешний вид:



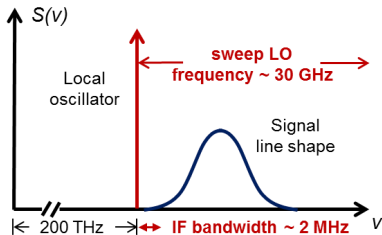
Основная идея:

Общепринятый подход:



- Постоянная частота гетеродина
- Широкая полоса ПЧ

Наш подход:

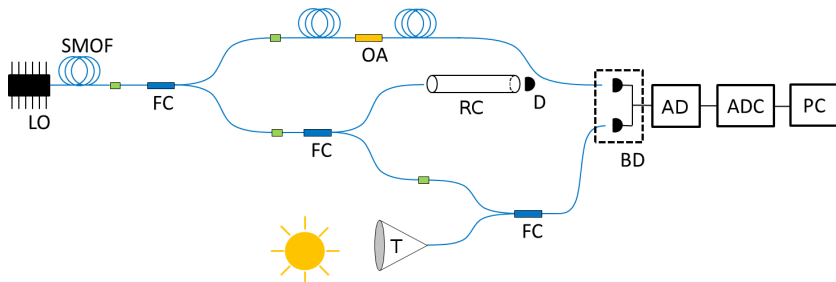


- Сканирование частоты гетеродина
- Узкая полоса ПЧ

Преимущества:

- Не требуется анализатора спектра промежуточных частот
- Широкий спектральный диапазон
- Детектирование на пределе дробового шума

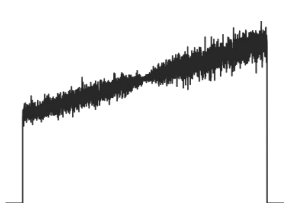
Схема установки для измерения поглощения CH_4



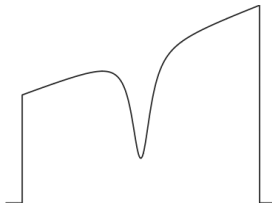
LO – гетеродин, SMOF – одномодовое оптическое волокно; FC – волоконный разветвитель;
OA – оптический аттенуатор; T – микротелескоп; RC – реперная кювета;
BD – балансный детектор; AD- амплитудный детектор

Гетеродинный сигнал:

1.

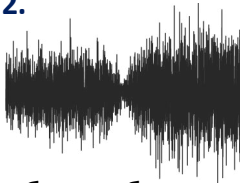


гетеродинный
спектрометр



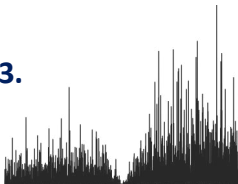
спектрометр
прямого поглощения

2.



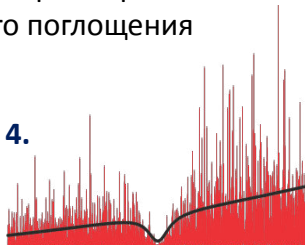
убрать «базовую
линию»

3.



возвести в квадрат

4.



сгладить и накопить

Перенос излучения атмосферы

Уравнение переноса излучения

$$\cos\theta \frac{I(z, \nu)}{dz} = -\alpha(z)I(z, \nu),$$

где $I(z, \nu)$ - интенсивность, $\alpha(z)$ - объемный коэффициент поглощения, θ - зенитный угол, решение уравнения находится по формуле

$$I(z, \nu) = I_{sun} \exp\left\{-\frac{1}{\cos\theta} \int_z^{\infty} \alpha(s) ds\right\},$$

где

$$\alpha(z) = \left(\sum_i k_i(\nu, z)\right)\rho(z),$$

$k_i(\nu, s)$ - сечение поглощения отдельной линии.

Постановка обратной задачи

Пусть известны спектр поглощения $Tr(\nu)$, зенитный угол θ , тогда определена оптическая толщина

$$\tau(\nu) = -\cos\theta \ln Tr(\nu),$$

и, таким образом, имеет место интегральное уравнение

$$\tau(\nu) = \int_0^{\infty} K(\nu, z) \rho(z) dz, \quad \nu \in [\nu_0, \nu_1],$$

откуда требуется определить профиль газа $\rho(z)$, $z \in [0, H]$ ($H = 40$ км), $K(\nu, s) = \sum_i k_i(\nu, z)$ - общее сечение поглощения.

Представим данное уравнение в операторном виде $A\rho = \tau$.

Основные подходы к решению некорректных задач

Пусть заданы оператор $||A\rho - A_h\rho|| < h||\rho||$ и правая часть $||\tau - \tau_\delta|| < \delta$.

Основное условие - минимум невязки

$$||A_h\rho - \tau_\delta||^2 < \delta^2.$$

В некорректных задачах необходимо вводить априорную информацию о решении:

- Сглаживание в некоторой норме

$$\Omega[\rho] \rightarrow \min$$

- Условия монотонности или выпуклости

$$\mathcal{F}\rho \leq 0.$$

Пространство решений

Определяется сглаживающим функционалом

$$\Omega[\rho] = \|\rho\|_{W_p'}^p = \int_0^H [|\rho(z)|^p + |\rho^{(l)}(z)|^p] dz.$$

Также интерес представляет норма (метод минимальной энтропии)

$$\Omega[\rho] = \int_0^H |\rho(z)| \ln[|\rho(z)|] dz + \int_0^H |\rho'(z)| \ln[|\rho'(z)| + 1] dz.$$

Обобщенный Метод Невязки (ОМН)

В качестве приближенного решения задачи $A_h \rho = \tau_\delta$ принимается элемент $\rho_{h\delta}$, который получается из обобщенного метода невязки.

$$\|\rho_{h\delta}\| = \inf\{\|\Omega[\rho]\| : \|A_h \rho - \tau_\delta\| \leq \delta + h\|\rho\|\}.$$

Для сравнения "Метод сглаживающего функционала"

$$M_\delta^\alpha[\rho] = \|A_h \rho - \tau_\delta\|^2 + \alpha \Omega[\rho].$$

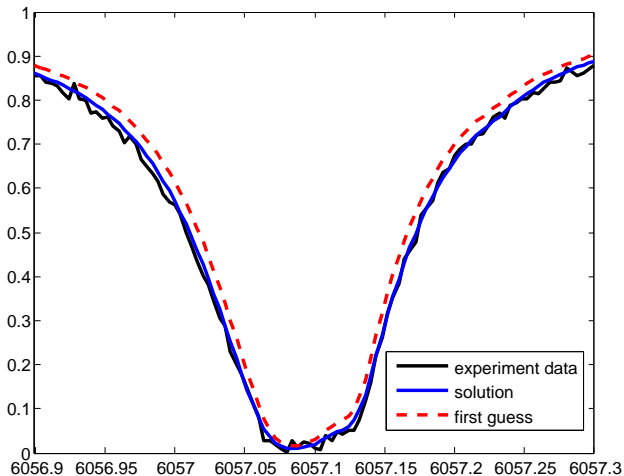
Метод сглаживающего функционала

Решение ищется как минимум функционала

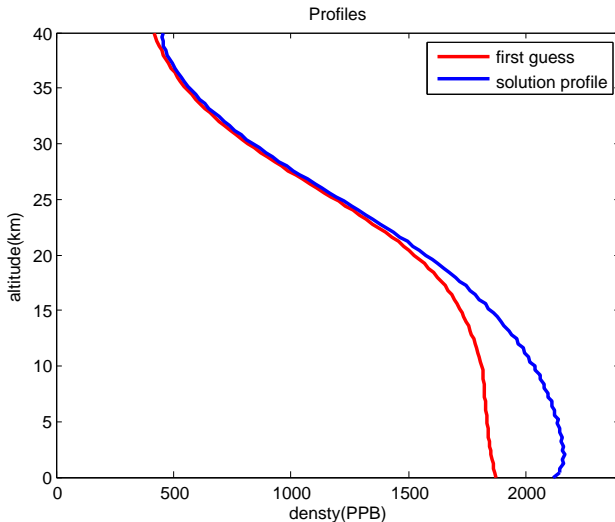
$$M_{\delta}^{\alpha}[\rho] = \|A_h \rho - \tau_{\delta}\|_{L_2[\nu_0, \nu_1]}^2 + \alpha \|\rho - \rho_0\|_{W_2^1[0, H]},$$

Особое значение имеет задача поиска коэффициента α . Пусть $\beta(\alpha) = \|A_h \rho - \tau_{\delta}\|^2$, $\gamma(\alpha) = \|\rho - \rho_0\|_{W_1^2[0, H]}$, тогда можно доказать, что $\varepsilon(\alpha) = \beta(\alpha) - (\delta + h\gamma(\alpha))$ - монотонная функция и возможно однозначно решить уравнение $\varepsilon(\alpha) = 0$.

Сравнение спектров



Результирующий профиль



Измерение концентрации CO2

Оптическая толщина $\tau(\nu)$ пропорциональна концентрации углекислого газа

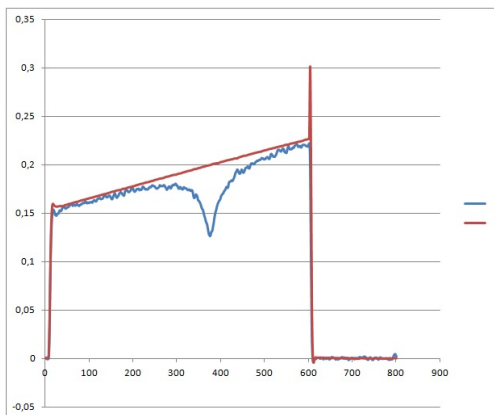
$$\tau(\nu) = \int_0^H K(\nu, \xi) \rho_{CO_2}(\xi) d\xi,$$

формула для пропускания

$$Tr(\nu) = \exp \left\{ -\frac{1}{\cos(\theta)} \tau(\nu) \right\}.$$

Концентрацию CO2 можно считать постоянной $\rho_{CO_2} = \text{const.}$

Базовая линия



Алгоритм определения концентрации

Коррекция базовой линии двумя параметрами t_0 и t_1

$$Tr(\nu) = \frac{Tr_0(\nu)}{bl(\nu; t_0, t_1)}.$$

Минимизация

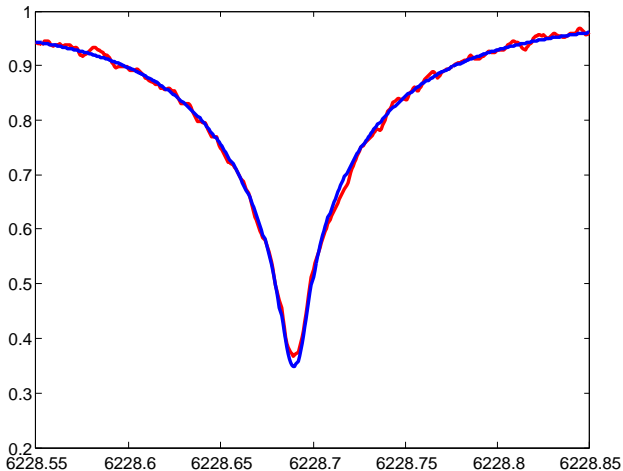
$$\Phi[\rho_0, t_0, t_1] = ||Tr_0(\nu; \rho_0)/bl(\nu; t_0, t_1) - \overline{Tr}(\nu)|| \rightarrow \delta,$$

где $\overline{Tr}(\nu)$ - измеренный спектр, δ - зашумленность спектра.
Точность восстановления концентрации ρ_0 оценивается на уровне 0.3%.

Измерение 1

Время 6.44, угол склонения 9.88 – 11.08

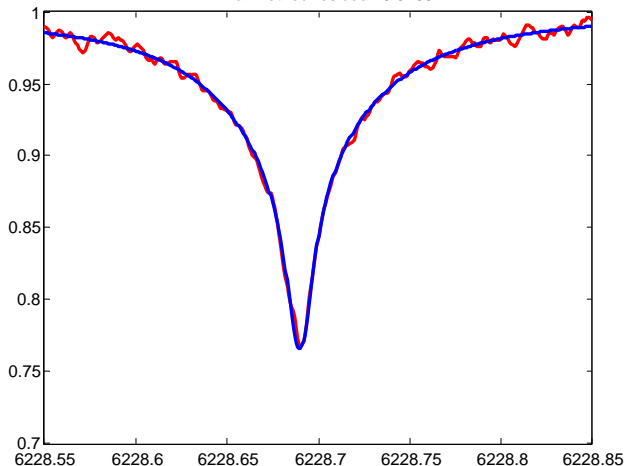
Minimal method residual: 0.86385



Измерение 2

Время 15.13, угол склонения 52.79 - 52.19

Minimal method residual: 0.34601



Измерение 3

Время 18.12, угол склонения 31.02 - 30.04

Minimal method residual: 0.56338

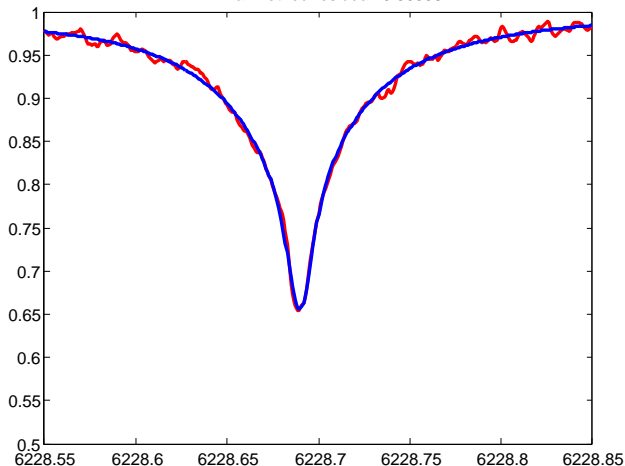


Таблица результатов

Измерения CO2 проведенные 7 июля 2014

N	time	inclination(deg)	CO2 dens(PPM)	residual(%)
1	6.44	10.8	375.02	0.863
3	8.09	22.35	399.95	0.5
6	9.37	34.68	387.2	0.59
7	10.00	37.82	400.67	0.5
11	15.13	52.79	403.11	0.35
12	16.05	47.62	416.44	0.37
13	17.24	37.66	409.66	0.41
14	18.12	31.02	412.16	0.56

График концентрации CO2

Дневной тренд

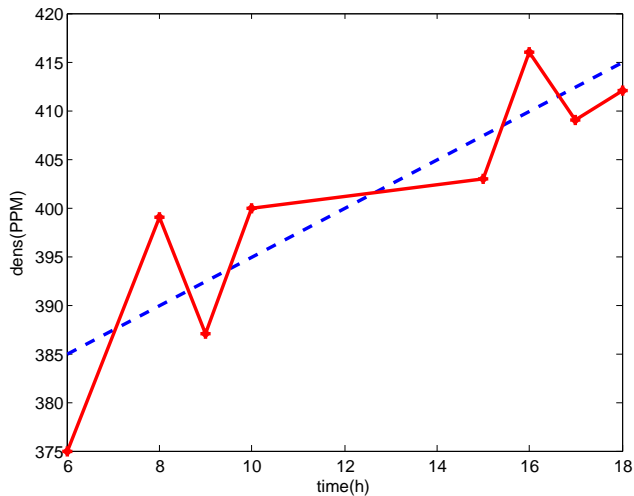
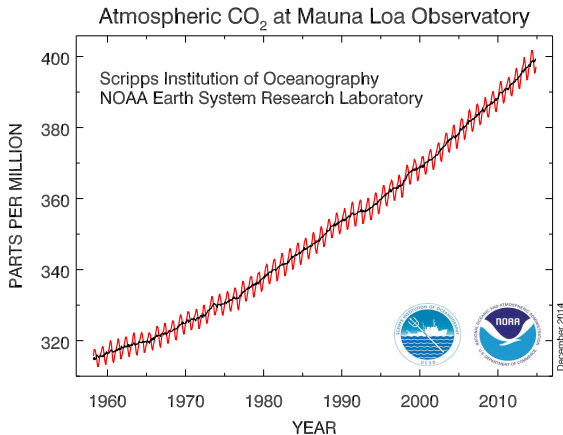


График концентрации CO₂

Общий тренд



Определение профиля атмосферного ветра



Влияние ветра на спектр

Эффект смещение центра линии поглощения из-за эффекта Доплера можно выразить формулой

$$\tau(\nu) = \int_0^H K(\nu - \nu(\xi; v(\xi)), \xi) \rho_{CO_2}(\xi) d\xi,$$

где $K(\nu, \xi)$ - сечение поглощения, смещение по частоте определяется по формуле

$$\nu(\xi; v(\xi)) = \frac{\nu_0 v(\xi)}{c} \sin(\alpha),$$

где ν_0 - частота центра линии, $v(\xi)$ - скорость ветра на высоте ξ , c - скорость света, α - зенитный угол.

Обратная задача

В основе решения обратной задачи лежит Обобщенный Метод Невязки (ОМН) [1]

$$\|v_{h\delta}\| = \inf\{\Omega[v] : \|A_h v - \tau_\delta\| \leq \delta + h\|v\|\}.$$

где

$$\Omega[v] = \int_0^H |v(\xi)| \ln[|v(\xi)|] d\xi + \int_0^H |v'(\xi)| \ln[|v'(\xi)| + 1] d\xi,$$

$$A_h v = \int_0^H K(\nu - \nu(\xi; v(\xi)), \xi) \rho_{CO_2}(\xi) d\xi.$$

Обратная задача

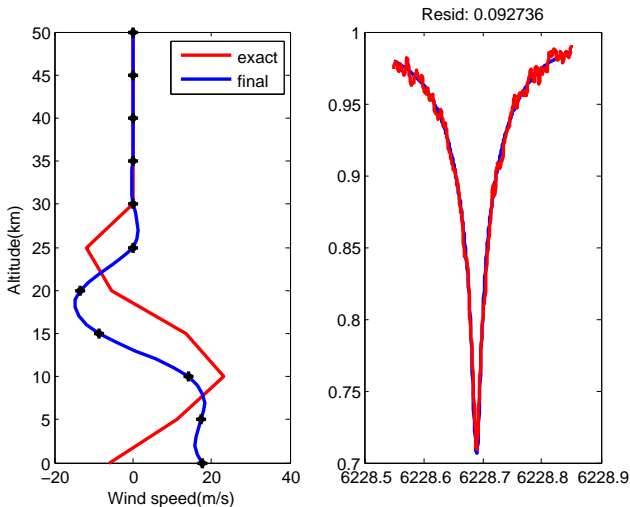
Особое значение при восстановлении профилей имели

- Повышение размерности решения за счет использования азимутальных и меридиональных составляющих скорости $[u, v]$
- Информация о скорости ветра на нулевой высоте
 $v_0 = v(0), u_0 = u(0)$

Результаты расчетов

Без учета скорости ветра на нулевой высоте.

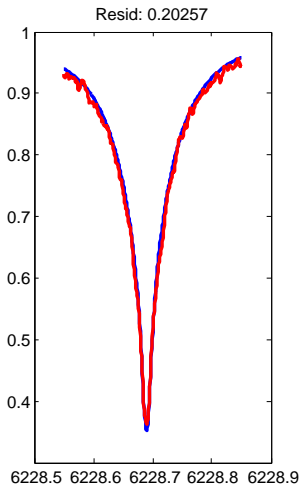
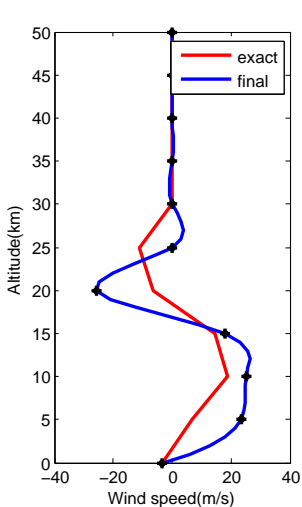
Эксперимент 7 июля, время 6.44



Результаты расчетов

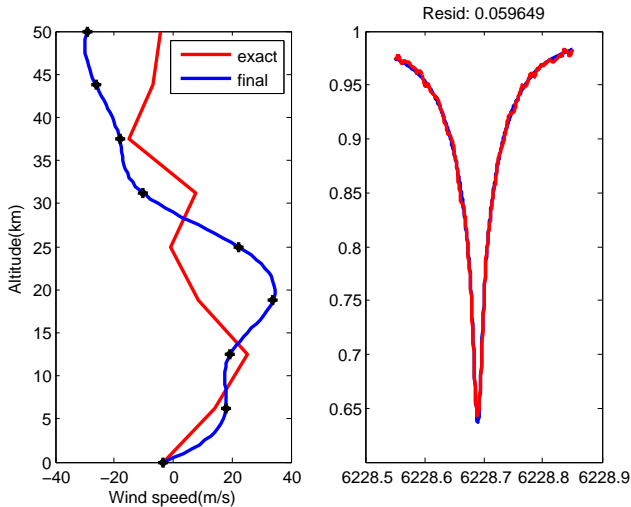
Скорость ветра на нулевой высоте задана.

Эксперимент 7 июля, время 6.44



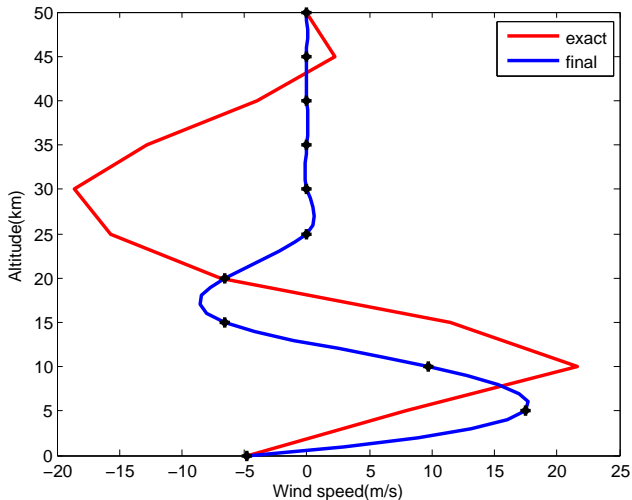
Результаты расчетов

Эксперимент 10 марта, время 9.50



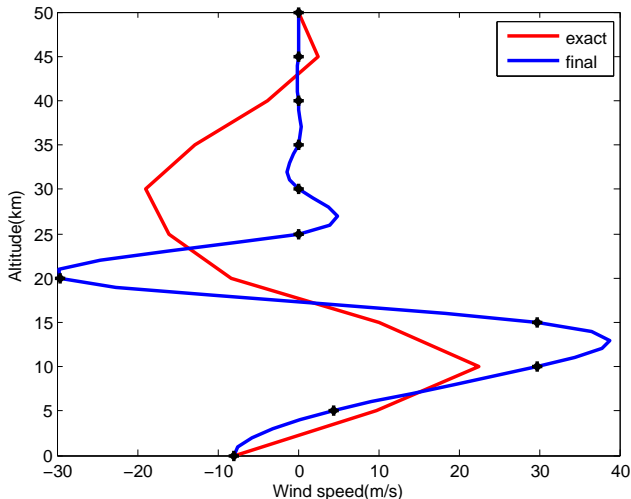
Результаты расчетов

Эксперимент 7 июля, время 9.37



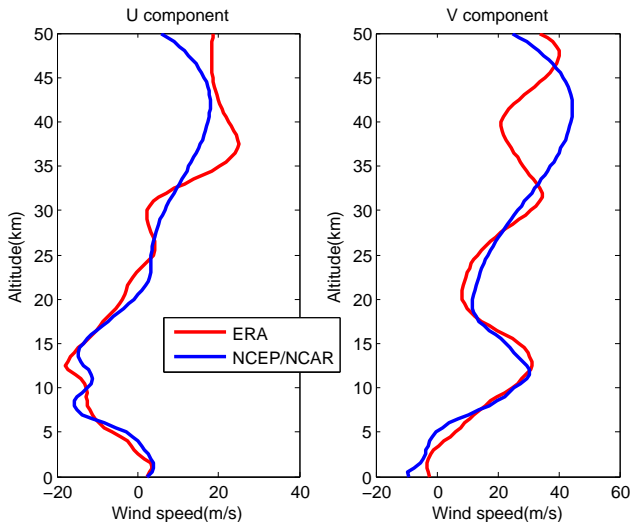
Результаты расчетов

Эксперимент 7 июля, время 10.00



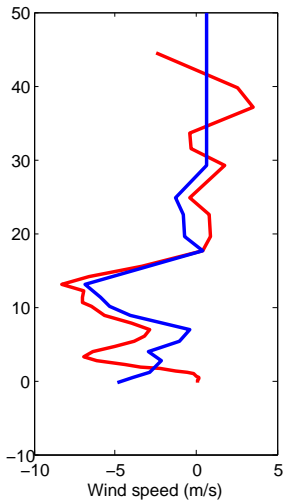
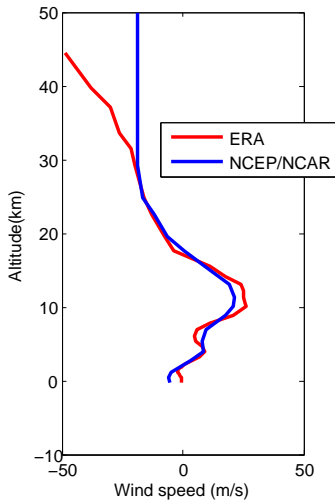
Модели postprocessing 10 мая

Ветер над Москвой 10 марта 2014



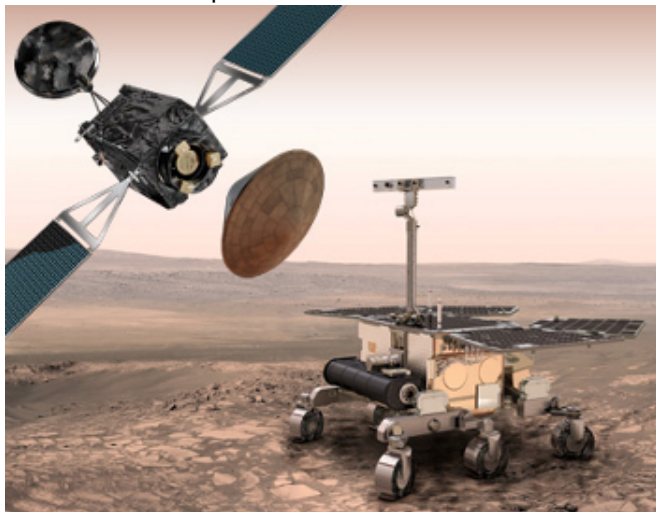
Модели postprocessing 7 июля

Ветер над Москвой 7 июня 2014



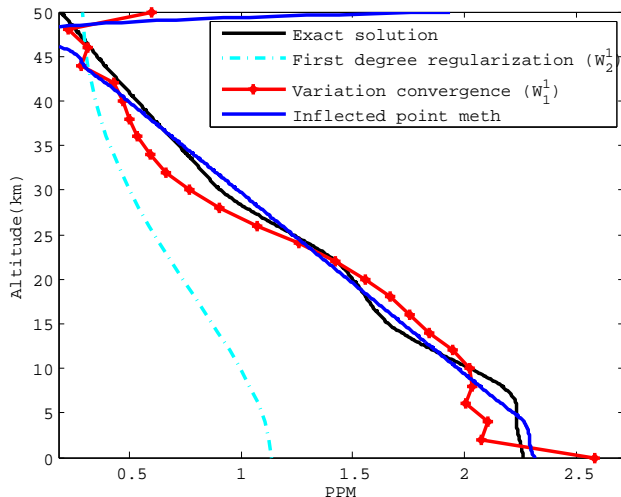
Расчеты профилей воды в атмосфере Марса

Миссия ЭкзоМарс 2016-2020

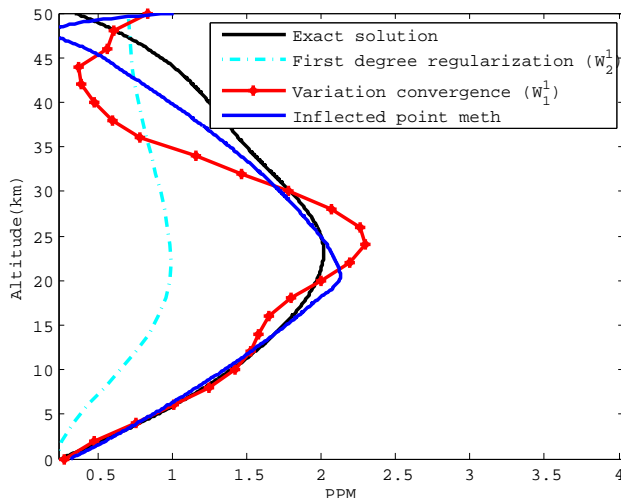


Пример 1

Относительная погрешность правой части $\delta = 0.001$,
погрешность оператора $\delta_A = 0.01$.

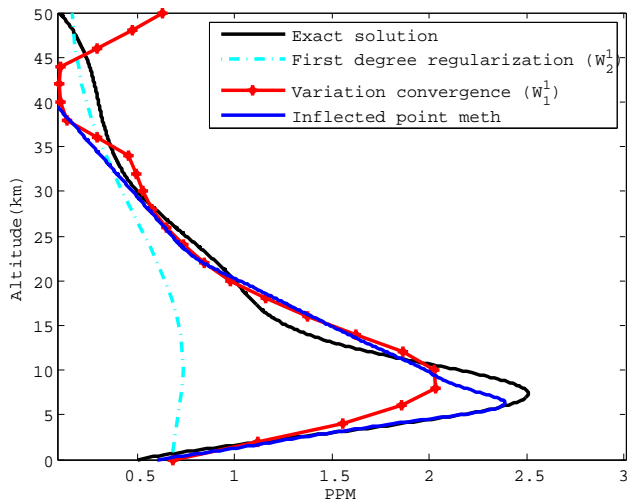


Пример 2

Погрешность правой части $\delta = 0.0003$ 

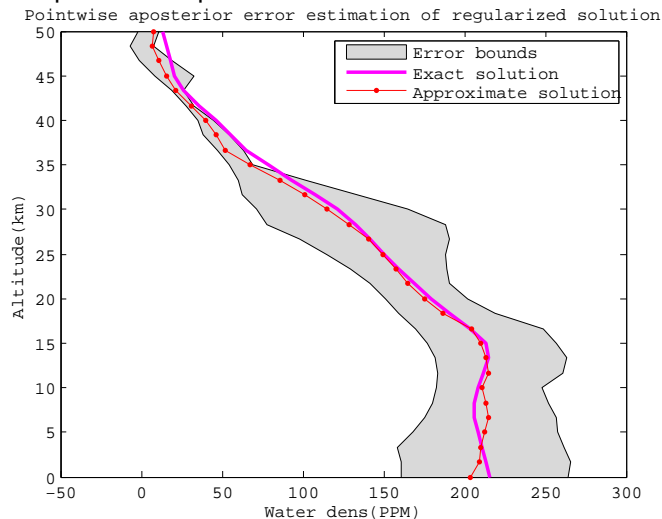
Пример 3

Погрешность правой части $\delta = 0.003$



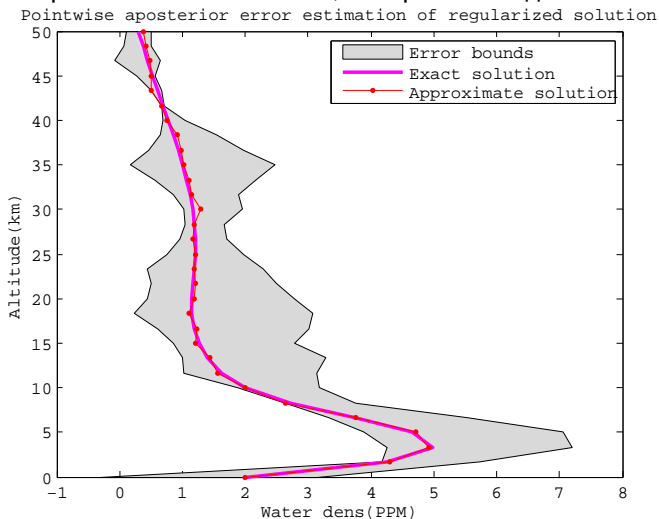
Оценка решения 1

Погрешность правой части $\delta = 0.001$



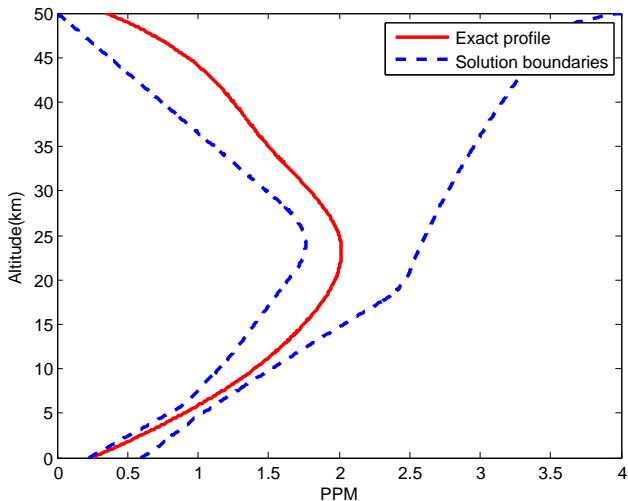
Оценка решения 2

Погрешность правой части $\delta = 0.001$, в обратной задаче

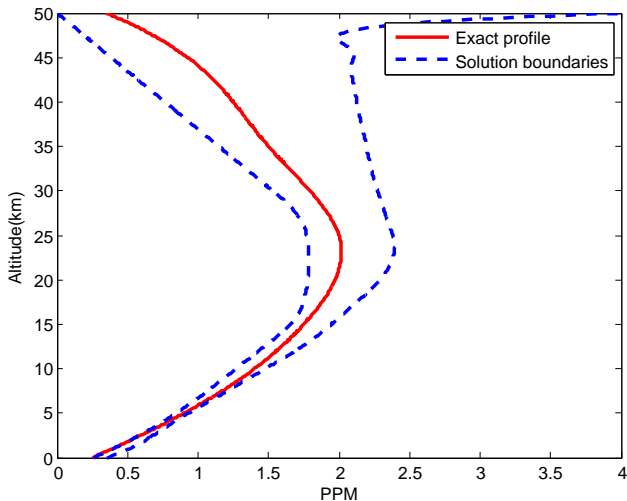


$\delta = 0.0001$

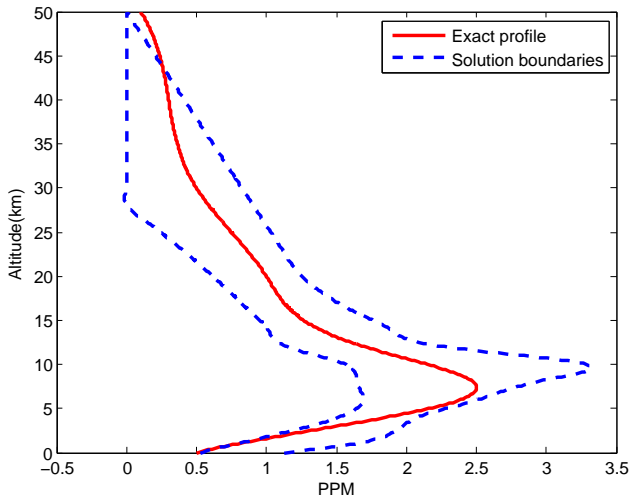
Пример 1



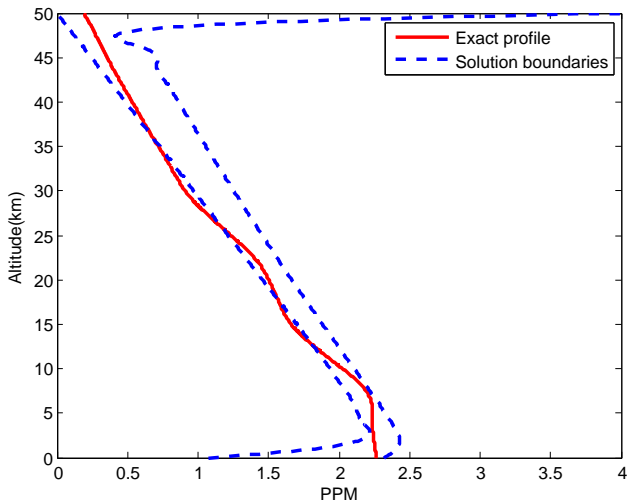
Пример 1 (атмосфера Земли)



Пример 2

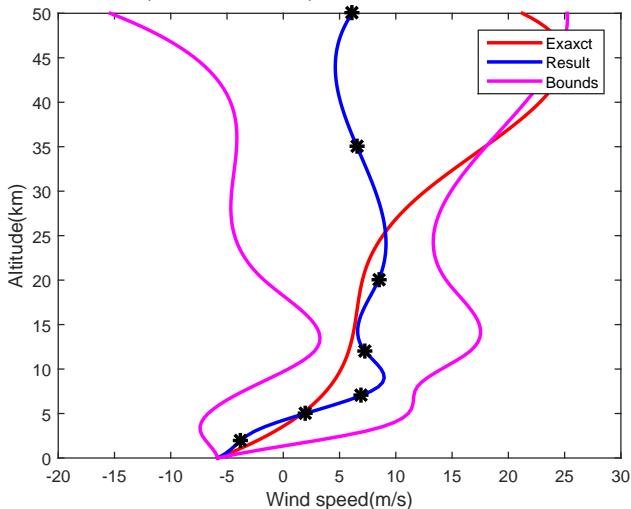


Пример 3



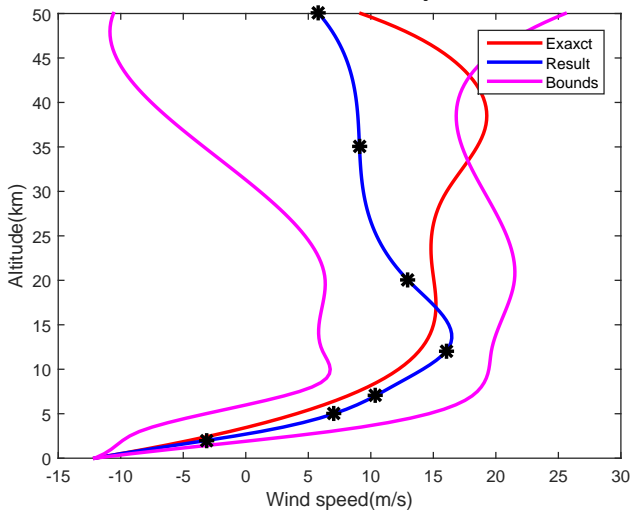
Профили ветра 1

Земля Oxia, сезон Ls 20,



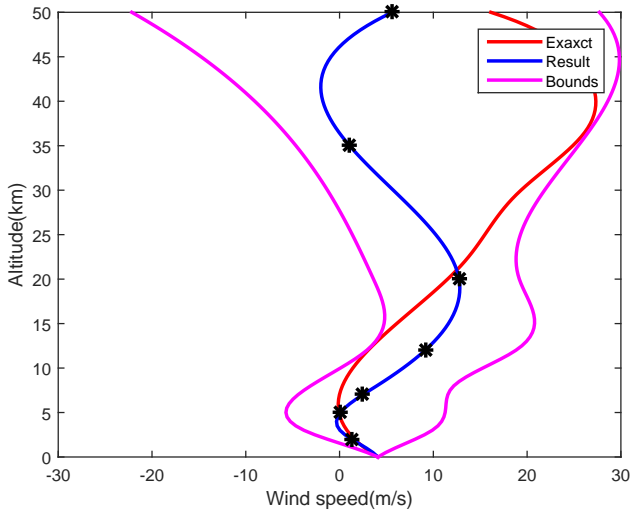
Профили ветра 2

Земля Охiа, сезон Ls 20, Зенитн угол 60,



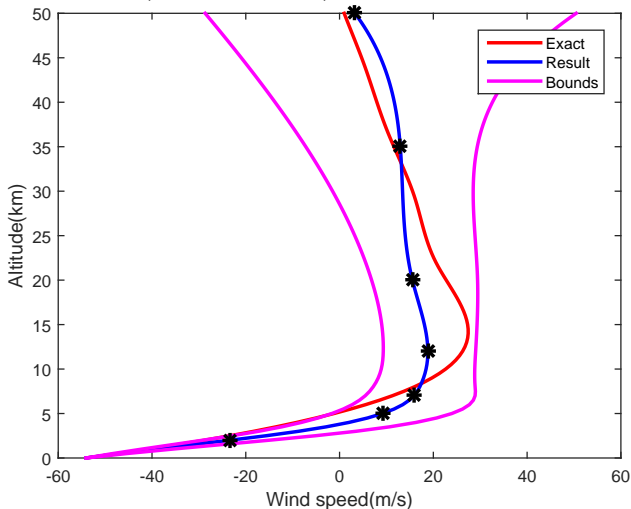
Профили ветра 3

Земля Oxia, сезон Ls 120,



Профили ветра 4

Земля Oxia, сезон Ls 220,



Профили ветра 5

Земля Oxia, сезон Ls 320,

