技術報告

海洋情報部研究報告 第 57 号 平成 31 年 3 月 28 日
REPORT OF HYDROGRAPHIC AND OCEANOGRAPHIC RESEARCHES No.57 March 2019

空間的に変化する量を観測データに基づき推定する方法について†

矢吹哲一朗*

Method for estimating a spatial distributions function from a number of measurement data†

Tetsuichiro YABUKI*

Abstract

We often must try to estimate and predict an overview image of a measurable quantity in a space based on measurement data at discrete points. In Earth Science, it is sometimes difficult to take the actions necessary to measure in the field and, as a result, obtaining data becomes cumbersome. As a result, we are often forced to work with insufficient data.

On the other hand, because of the progress in modern technology, we are now able to obtain large quantities of data. In this case, we must be systematic when processing such large quantities of data in order to obtain objective and accurate estimations, not ones that are biased.

This paper describes universal approaches to estimating and predicting the distribution function of measurable quantity in space from a finite number of measurement data at discrete points with measurement errors. I assume the nature of “well behavior in space” for the distribution function, which means differentiability in the space. A statistical approach for the prediction is employed by choosing the best solution of the probability distribution functions for the quantities to be estimated.

1　はじめに

地球科学において，時空間（時間と空間の 4 次元空間を考えるが，以下では簡単のため「空間」と表記する.）で測定可能な量について，その空間分布が一様でない場合に，当該分布を示す数値モデルを測定データから求めることは数多くある.

こうした課題へのアプローチにおいては，多くの場合，次の 2 つのいずれか，もしくは両方が課題となる.

①　測定データは，測定の誤差，あるいは測定ポイントの測位誤差を持つことが普通であり，さらに十分な空間密度で存在せず，不均一に分布する離散的な点でのデータとして存在することが多い.

②　測定技術の進歩，ロボット技術，IoT などにより，測定データの量は膨大になっているが，データ一つ一つを人が認識し，評価し，処理するという手続きでは多量の情報の利点を十分に発揮できず，有用な情報が捨てられてしまう可能性がある.

本稿では，こうした課題を踏まえ，空間分布量

† Received October 1, 2018; Accepted November 7, 2018
＊　海洋情報課　Oceanographic Data and Information Division

を，有限離散測定データから推定する方法について，可能な限り問題を一般化・形式化しつつ，実用性に配慮して議論する．

2　インバージョンと予測

議論の対象となる空間を「対象空間」，求める量を「対象量」と呼ぶ．対象量は，対象空間の中の任意の一点があたえられたときに，一意に値が定まることを前提とする．空間の点の座標を $\boldsymbol{x}$，対象量の空間分布関数を $f(\boldsymbol{x})$ とする．

測定データは，測定装置により対象量と関係を持つ何らかの量を測定して得られる一つの数値である．たとえば，錘を沈めて水深を測るような場合は，着底「点」の測定，ある広がりをもった音響ビームを海底にあててその反射シグナルから水深を調査する場合は，ビームの空間的な広がりの中の代表値（必ずしも音波を当てた範囲内の平均とは限らず，最大値，最小値等の場合もある）となる．こうした測定の性質は，測定するシステムに依存するが，既知のものである．

測定データを生み出す対象量の分布 $f(\boldsymbol{x})$ を未知として，実際の測定データから求めることは，インバージョンと呼ばれる．更に，対象量の分布 $f(\boldsymbol{x})$ を推定することは，測定データの得られていない場所で測定した場合のデータを予測することを意味する．

本稿では，こうした課題における解を得る方法を議論する．煩雑さを回避し，問題の本質を明らかにするため，以下，測定は，点測定に限ることとする．さらに，測定は N 個の点（$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N$）で行われ，それぞれ，得られた測定データを（$y_1^0, y_2^0, \cdots y_N^0$）とし，真の対象量と測定データの差を測定誤差（$\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_N$）とすると，測定データについて，観測方程式，

$$y_i^0 = f(\boldsymbol{x}_i) + e_i (i=1, 2, \cdots N) \tag{2.1}$$

が成立する

3　予測を行うための条件

有限個のデータしかなく，対象量が空間的に自由に分布する場合は，一定範囲の広がりで真の値 $f(\boldsymbol{x})$ を数学的に厳密かつ一意的に求めることは不可能である．厳密に正確な分布を求めるためには，全ての求めたいポイントで誤差ゼロである測定を行わなければならない．しかし，必要なすべての点で厳密な測定を行うことは，地球科学では現実的に困難な場合がある．

本稿では，そこで，以下の条件を前提として，実用的な解を得ることを考える．

- 対象量が，次節に述べる「空間的に良い振る舞い」をすることを前提とする．
- 対象量を，唯一の解として厳密に求めることにこだわらず，ある評価可能な指標のもとに幅を持って，その中で可能性を確率的に明らかにすることを許容する．

以下，これら2つの条件を前提にした手法について議論をする．

4　空間的に良い振る舞い

4.1　必要性

一般論として，対象量 $f(\boldsymbol{x})$ が測定可能な物理量であれば，空間的に近い場所では，同じような値となるであろう．任意の2点が与えられたときに，その間の距離が小さければ，$f(\boldsymbol{x})$ の差はゼロに近い値となることが考えられる．この性質を「空間的に良い振る舞い」と呼ぶことにする．

例えば，固体地球表面の形状である地盤の高さと海底の深さを，準拠楕円体からの「高さ」として測る場合，2点の水平距離が小さければ鉛直方向の差も小さくなることは，地球表面の一定の「なだらかさ」を示している．もちろん，地形的になだらかでない状況，断崖絶壁などは，世界各地に数多く存在するので厳密には成り立たない．断崖絶壁は重力的に不安定で相対的に稀ではあるが，決して無視をしてもよいものではない．断崖絶壁を地形の高さの測定から明らかにするには，測定の精度と空間分解能を上げなければならない．

詳細な測定データが存在しない場合，対象空間の中に有効な「小空間」を設定し，その中の平均を求めることが考えられる．求めたい対象量

$f(\boldsymbol{x})$ そのものではなく，点 $\boldsymbol{x}$ を中心し，ある小さな半径の円の範囲内で平均したもの，つまり移動平均を求めたい対象量にすることもできる．これにより，対象量の微細な構造を正確に把握できなくなるが，実用的には十分な場合もある．

以下，本稿では，対象量 $f(\boldsymbol{x})$ が「空間的に良い振る舞い」をするものと仮定する．これにより，測定データと測定点の近傍の対象量とを結びつけ，測定点が対象空間を埋め尽くしていない場合であっても，離散的な測定データから空間分布を予測する方法を導くこととする．

4.2　未知量の離散化

前節の「空間的に良い振る舞い」を前提とすることによる利点は他にもある．十分に密度の高い格子点で対象量を推定し，格子点と格子点の間を一般的な補間の式を用いて近似的に推定（予測）した場合，「空間的に良い振る舞い」の前提があれば，近似による誤差は小さいであろう．格子点の値からその間を数値的に補間する場合，一般には，対象量の空間的な滑らかさ，すなわち「空間的によい振る舞い」を前提にしている．

対象空間の対象量の表現として，対象空間 S の中に格子点を構成し，M 個の格子点（$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_M$）で対象量の真の値である（$f(\boldsymbol{x}_1), f(\boldsymbol{x}_2), \cdots, f(\boldsymbol{x}_M)$）を推定する．簡便のため，この格子点の真の値を以下では（$f_1, f_2, \cdots, f_M$）と表記する．

格子点での真の値が与えられれば，任意の測定点 $\boldsymbol{x}_i$ での真の値 $f(\boldsymbol{x}_i)$ は，例えば，B-Spline 関数などを用いることで，近傍の格子点の重み付き平均で近似的に補間できる．数式で表現すると，

$$f(\boldsymbol{x}_i)=\sum_{j=1}^{M} A_{ij} f_j+\epsilon_i \quad (i=1, 2, \cdots N) \qquad (4.2.1)$$

となる．ここで，A_{ij} は，格子点の間にある測定点の真の値を近似するため重み付き平均の係数であり，また ϵ_i は，格子点からの補間で生じる近似誤差である．本稿では，「空間的によい振る舞い」を前提に，格子点間隔も十分に小さく取るものとし，以下，ϵ_i を無視することとする．

これにより観測方程式（2.1）は，

$$y_i^0=\sum_{j=1}^{M} A_{ij} f_j+e_i \qquad (4.2.2)$$

となる．

ここで，N 個の測定データを N 次元の列ベクトル $\boldsymbol{y}^0$ とし，測定誤差も同様に列ベクトル $\boldsymbol{e}$，また，未知量である対象量の格子点の値は M 次元の列ベクトル $\boldsymbol{f}$ と表記すると，

$$\boldsymbol{y}^0=\boldsymbol{A}\boldsymbol{f}+\boldsymbol{e} \qquad (4.2.3)$$

となり，ここで，$\boldsymbol{A}$ は A_{ij} を要素とする N 行×M 列の行列となる．

5　確率論と統計学の利用

一般に，不確定性がある事象について，確率分布をあてはめ，当該事象を統計的に推定することがある．確定的な結論とならない欠点があるが，測定データが不十分な場合にも一定の結果が得られるなど，応用範囲が広い．本稿では，対象量の分布について，厳密な値の推定をするのではなく，確率分布と統計学の手法により，推定をすることとする．

5.1　測定誤差の確率分布

測定誤差は，すでに数多くの議論がされている．一般には，測定データ y_i^0 に対応する測定誤差 e_i は，十分に制御された測定として，その確率分布密度は，平均はゼロで一定の分散 σ_i^2 の正規分布となることを前提とする．また，測定誤差の議論では，一つ一つの測定の誤差が確率的に独立していることを前提とする．そうではない誤差，いわゆる「系統誤差」も存在するが，そうした場合については本稿では議論しない．

測定誤差 e_i の確率分布 $p(e_i)$ は，正規分布であるから，

$$p(e_i)=(2\pi\sigma_i^2)^{-1/2}\cdot\exp(-e_i^2/2\sigma_i^2) \quad (i=1, 2, \cdots N) \qquad (5.1.1)$$

となる．N 個の測定誤差の組を，列ベクトル形式で書けば，

$$p(\boldsymbol{e})=2\pi^{-N/2}\|\boldsymbol{E}\|^{-1/2}\cdot\exp(-\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}\boldsymbol{e}/2). \qquad (5.1.2)$$

ここで，肩付きの T は転置行列を示す．N 次正方行列 $\boldsymbol{E}$ は，誤差ベクトル $\boldsymbol{e}$ の分散共分散行列であり，各測定誤差が独立であるため，

$$E_{ii}=\sigma_i^2 \quad (5.1.3)$$

$$E_{ij}=\mathbf{Cov}(\boldsymbol{e}_i,\boldsymbol{e}_j)=0 \quad (i\neq j) \quad (5.1.4)$$

となり，また，$\|E\|$ は行列 $\boldsymbol{E}$ の行列式の絶対値を意味する．

5.2　空間的な振る舞いの確率的な扱い

本節では，「空間的に良い振る舞い」を統計的に扱う方法を議論する．

ある点Ｐで対象量 $f(\boldsymbol{x}_p)$ が与えられたとき，Ｐ点の近傍の点 $\boldsymbol{x}_p+\Delta\boldsymbol{x}$ での対象量を確率的に予測することを考える．Ｐ点とその近傍点の対象量の差を $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ と表記すると，

$$f(\boldsymbol{x}_p+\Delta\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}_p)+\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x}) \quad (5.2.1)$$

と書き表すことができる．ここに $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ は，対象量のＰ点での値からの空間変化分であり，以下，本稿では，「変差関数」もしくは「変差量」と呼ぶ．

変差関数 $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ は，真の分布 $f(x)$ とＰ点が与えられれば確定する．また，$\Delta f_p(0)=0$ であり，$\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ は一般に正負どちらの値も取りうる．「空間的に良い振る舞い」の性質から，$\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ は，$\Delta\boldsymbol{x}$ のノルム（長さ）が小さくなるとゼロに近づき，逆に，$\Delta\boldsymbol{x}$ のノルムが大きくなると $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ の絶対値は大きくなる可能性が高まる．

これらの性質を踏まえ，変差関数 $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ を確率的に予測する．このため，

- 確率的に平均ゼロ，分散 σ_d^2 の正規分布に従う，
- 分散 σ_d^2 は，Ｐ点の座標 $\boldsymbol{x}_p$ が与えられれば，あらかじめ決めることができる，
- 分散 σ_d^2 は，Δx の方向に依存せず Δx のノルムに依存して定まり，ノルムが小さい場合には小さくなる，

ことを前提とする．これらは必ずしも，以下の議論において絶対に必要なものではないが，実用性あるものとして導入することにする．

以下，真の対象量を知っていれば定まる変差関数を，真値を知らないことを踏まえ確率的に表現することとし，

$$r\equiv|\Delta\boldsymbol{x}| \quad (5.2.2)$$

$$\sigma_d=\sigma_d(r) \quad (5.2.3)$$

と表記する．$\sigma_d(0)=0$ であるとともに，$\sigma_d(r)$ は r が小さいときに，右上がりに増加する関数で表されるものとする．変差量 $\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})$ は，Δx が与えられた時にその値を確率分布で示すと，

$$p[\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})]=\{2\pi[\sigma_d(r)]^2\}^{-1/2}\cdot \exp\{-[\Delta f_p(\Delta\boldsymbol{x})]^2/2[\sigma_d(r)]^2\} \quad (5.2.4)$$

と，正規分布の形になるものとする．事前に対象量の真の値が知られていない段階で，この式が，対象量分布の推定において，確率的に一定の拘束を与える役割を果たす．

6　統計的推定の方法

測定データがあたえられ，それをもとに，対象量を統計的に推定する．以下では２つの方法を議論する．

6.1 直接推定

ある点Ｐ（格子点とする）の対象量 $f(\boldsymbol{x}_p)$ を，周囲の測定データと空間的な性質から推定してみる．以下では，簡便のため，求めるべき未知量 $f(x_p)$ を f_p と表記し，格子点の一つ一つの推定を独立に行う．

推定の根拠は，N 個（Fig. 1 では６個）の近傍

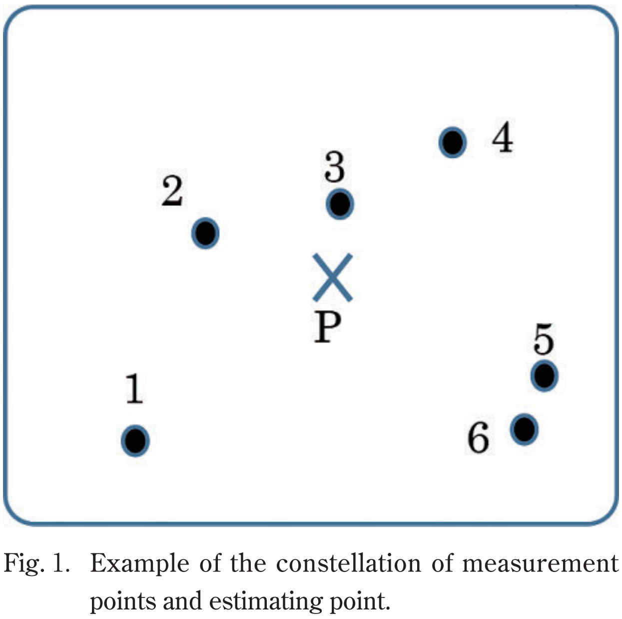

Fig. 1. Example of the constellation of measurement points and estimating point.

図 1．推定点と観測点の配置例

の測定データである．測定は独立で，誤差は正規分布に従い，また，対象量は「空間的に良い振る舞い」をすることを前提とする．

観測方程式（2.1）と，求める点 $\boldsymbol{x}_p$ と測定点 $\boldsymbol{x}_i$ との違いによる変差量の式（5.2.1）を書き直すと，

$$y_i^0 = f(\boldsymbol{x}_i) + e_i \tag{6.1.1}$$

$$f(\boldsymbol{x}_i) = f_p + \Delta f_p(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_p) = f_p + \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \tag{6.1.2}$$

となる．ここに $\Delta \boldsymbol{x}_{ip} \equiv \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_p$ である．この２つの式を統合すると，測定データは，f_p と次式で結びつく．

$$y_i^0 = f_p + e_i + \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \quad (i = 1, 2, \cdots N). \tag{6.1.3}$$

ここで，右辺の測定誤差と変差量をまとめることにし，

$$\delta_{ip} \equiv e_i + \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \tag{6.1.4}$$

と表記する．これにより，式（6.1.3）は，

$$y_i^0 = f_p + \delta_{ip} \quad (i = 1, 2, \cdots N) \tag{6.1.5}$$

となる．式（6.1.4）の右辺の２つの項は，確率的には平均はどちらもゼロ，分散はそれぞれ σ_i^2, $\sigma_d(r_{ip})^2$ の正規分布に従い，互いに相関はない．正規分布の性質として，２つの独立な正規分布に従う量の和も正規分布であり，δ_{ip} の確率分布は，平均ゼロ，分散 $\sigma_i^2 + \sigma_d(r_{ip})^2$ となる．

P 点の対象量 f_p を与えた時に，一つの測定点 $\boldsymbol{x}_i$ の測定値が y_i^0 となる確率は，

$$\begin{aligned} p[y_i^0|f_p] &= p(\delta_{ip}) \\ &= \{2\pi[\sigma_i^2 + \sigma_d(r_{ip})^2]\}^{-1/2} \cdot \\ &\quad \exp\{-(y_i^0 - f_p)^2 / 2[\sigma_i^2 + \sigma_d(r_{ip})^2]\} \end{aligned} \tag{6.1.6}$$

となる．

測定データが，複数（N 個）ある場合に，N 次元のベクトルで表現すると，

$$p[\boldsymbol{y}^0|f_p] = 2\pi^{-N/2} \|\boldsymbol{C}_s\|^{-1/2} \cdot \exp\{-S(f_p)/2\} \tag{6.1.7}$$

となるが，ここに，

$$S(f_p) = [\boldsymbol{y}^0 - \boldsymbol{u}_N f_p]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}_s^{-1} [\boldsymbol{y}^0 - \boldsymbol{u}_N f_p] \tag{6.1.8}$$

である．ここで，N 次元の列ベクトル $\boldsymbol{u}_N$ をすべての要素が１として定義する．また，N 次正方行列 $\boldsymbol{C}_s$ は，δ_{ip} の分散共分散行列である．具体的には，

$$\begin{aligned} C_{Sij} &= \mathrm{Cov}\langle [e_i + \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip})][e_j + \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{jp})] \rangle \\ &= \mathrm{Cov}\langle e_i e_j + e_i \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{jp}) + e_j \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) + \\ &\quad \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{jp}) \rangle \end{aligned} \tag{6.1.9}$$

となる．測定誤差 e と変差関数 $\Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x})$ は，確率的に独立であるから，右辺の第２項，第３項の寄与はゼロであり，

$$C_{Sij} = \mathrm{Cov}\langle e_i \cdot e_j \rangle + \mathrm{Cov}\langle \Delta f_p(\Delta x_{ip}) \cdot \Delta f_p(\Delta x_{jp}) \rangle \tag{6.1.10}$$

となることから，

$$C_{Sii} = \sigma_i^2 + \sigma_d(r_{ip})^2 \tag{6.1.11}$$

$$C_{Sij} = \mathrm{Cov}\langle \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \cdot \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{jp}) \rangle \quad (i \neq j) \tag{6.1.12}$$

となる．C_{Sij} を要素とする行列 $\boldsymbol{C}_S$ は，

$$\boldsymbol{C}_S = \boldsymbol{C}_V + \boldsymbol{E} \tag{6.1.13}$$

と表される．ここに N 次正方行列 $\boldsymbol{C}_V$ は，

$$C_{Vij} \equiv \mathrm{Cov}\langle \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{ip}) \cdot \Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x}_{jp}) \rangle \tag{6.1.14}$$

であり，変差量 $\Delta f_p(\Delta \boldsymbol{x})$ を確率的に予測した場合の分散共分散行列となっている．

対象量 f_p が与えられたときに測定データ $\boldsymbol{y}^0$ を得る確率は，測定データ $\boldsymbol{y}^0$ を与えられたときの対象量 f_p の尤度，

$$L(f_p|\boldsymbol{y}^0) = p(\boldsymbol{y}^0|f_p) \tag{6.1.15}$$

である．

ここで，f_p の最適の推定値 $\hat{f}_p$ として，尤度 $L(f_p|\boldsymbol{y}^0)$ を最大にするものとすると，

$$\begin{aligned} \hat{f}_p &= (\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}_S^{-1} \boldsymbol{u}_N)^{-1} \boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}_S^{-1} \boldsymbol{y}^0 \\ &= (\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{C}_V + \boldsymbol{E})^{-1} \boldsymbol{u}_N)^{-1} \boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{C}_V + \boldsymbol{E})^{-1} \boldsymbol{y}^0 \end{aligned} \tag{6.1.16}$$

となり，推定値 $\hat{f}_p$ は，測定データ $\boldsymbol{y}^0$ の重み付き平均となる．

更に，尤度 $L(f_p|\boldsymbol{y}^0)$ の具体の表現である式（6.1.7）は，c を適当な係数として，以下のように書き直すことができる．

$$\begin{aligned} L(f_p|\boldsymbol{y}^0) &= c \cdot \exp\{-(f_p - \hat{f}_p)^2 / 2(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}_S^{-1} \boldsymbol{u}_N)^{-1}\} \\ &= c \cdot \exp\{-(f_p - \hat{f}_p)^2 / 2(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{C}_V + \boldsymbol{E})^{-1} \boldsymbol{u}_N)^{-1}\}. \end{aligned} \tag{6.1.17}$$

この式から，f_p の尤度は，平均を $\hat{f}_p$，分散を $(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{C}_V + \boldsymbol{E})^{-1} \boldsymbol{u}_N)^{-1}$ とする正規分布となっている．この分散は，求めるべき未知量 f_p の推定誤

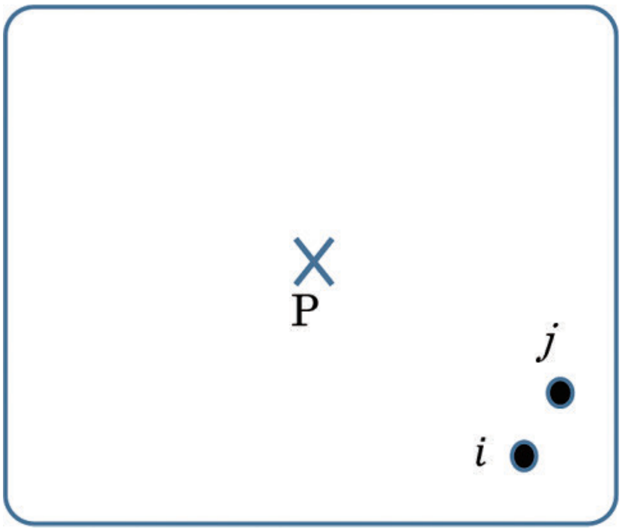

Fig. 2. Measurement points i and j.
図 2. 観測点 i, j

差となる．

この方法では，変差量の分散共分散行列 $\boldsymbol{C}_V$ を定義することが必要となる．$\boldsymbol{C}_V$ の非対角成分は，必ずしもゼロとはならない．測定した点 i と点 j が Fig. 2 のように近いところにある場合は，P 点との差である変差量も近い値になり，その積は平均的にゼロとはならないからである．

Fig. 2 の場合，変差量の相関である C_{Vij} をゼロとすると，これらの測定が過重となり，P 点の推定値に偏りを与える可能性がある．

6.2 ベイズ推定

前節では，変差量の分散共分散行列という特殊な量を定義することが必要となっており，必ずしも簡単ではない．そこで，本節では，別のアプローチとして，ベイズ推定の方法を利用する．ベイズ推定では，求めるべき未知パラメターについて，測定データが得られる前の事前確率分布を構成する．ここでは，「空間的に良い振る舞い」を用いて構成をすることにする．

まず準備として，M 個の格子点での対象量（$f_1, f_2, \cdots, f_M$）が与えられたときに，N 個の測定データ（$y_1^0, y_2^0, \cdots, y_N^0$）が得られる確率 $p(\boldsymbol{y}^0|\boldsymbol{f})$ を求める．観測方程式（4.2.3）と測定誤差の確率分布の式（5.1.2）から，誤差の確率分布 $p(\boldsymbol{e})$ を，未知量 $\boldsymbol{f}$ が与えられ時に測定データ $\boldsymbol{y}^0$ が得られる確率として表現する．

$$p(\boldsymbol{y}^0|\boldsymbol{f}) = p(\boldsymbol{e}) = (2\pi)^{-N/2}\|\boldsymbol{E}\|^{-1/2}\cdot \exp[-(\boldsymbol{y}^0-\boldsymbol{Af})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}(\boldsymbol{y}^0-\boldsymbol{Af})/2]. \tag{6.2.1}$$

次に，測定データが得られる前の未知量 $\boldsymbol{f}$ の確率分布，いわゆる事前確率分布を構成する．ここでは，その構成を「空間的に良い振る舞い」から構成を試みる．

M 個ある格子点から，一組の隣り合う格子点の組 Q と R を選び，その対象量 f_Q と f_R の差を計算し，

$$f_Q - f_R \equiv d \tag{6.2.2}$$

と表記すると，この差は，確率分布的には，平均ゼロ，分散 $\sigma_d(r_1)^2$ の正規分布となる．ここで r_1 は，隣り合う格子点の間隔である．この値の確率分布は，式（5.2.4）により，

$$p(d) = [2\pi\sigma_d(r_1)^2]^{-1/2}\cdot\exp[-d^2/2\sigma_d(r_1)^2] \tag{6.2.3}$$

となる．M 次元のベクトル $\boldsymbol{f}$ から，2 つの隣り合う格子点の要素を取りだしその差を計算することは，一般に，

$$f_Q - f_R = \Sigma_{j=1}^{M} b_j f_j = d \tag{6.2.4}$$

と表記できる．ここで，

$$b_Q = 1,\ b_R = -1,\ b_j = 0\ (j \neq Q, R) \tag{6.2.5}$$

とすればよい．一般に，M 個の格子点から，全ての隣り合う格子点の組（この組の総数を L 組とする）を取りだし，それぞれの差の計算を行列で表記すると，

$$\boldsymbol{Bf} = \boldsymbol{d} \tag{6.2.6}$$

となる．ここで，L 行×M 列の行列 $\boldsymbol{B}$ は，格子点 Q と R に対応する行の j 列成分が式（6.2.4）の b_j となる．

L 次元のベクトル $\boldsymbol{d}$ は，隣り合う格子点の差分であるが，式（6.2.3）と同様に，平均ゼロの正規分布に従うことを前提とし，$\boldsymbol{f}$ の事前確率分布を次のように構成する．

$$p(\boldsymbol{f}) = (2\pi)^{-L/2}\|\boldsymbol{D}\|^{-1/2}\cdot \exp[-(\boldsymbol{Bf})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Bf}/2] \tag{6.2.7}$$

ここで，L 次正方行列 $\boldsymbol{D}$ は隣接格子点の差の統

計的性質から定まる分散共分散行列である．その対角成分は．

$$D_{ii} = \sigma_d(r_1)^2 \tag{6.2.8}$$

である．非対角成分は，

$$D_{ij} = 0 \quad (i \neq j) \tag{6.2.9}$$

とする．これは，必ずしも必要ではないが，隣り合う格子点での対象量の差は，互いに独立し，相関がないことを前提としている．

これにより，$\boldsymbol{f}$ の事前確率分布を式（6.2.7）の $p(\boldsymbol{f})$ とし，式（6.2.1）を用いてベイズの定理により測定データが得られた後の事後確率分布を求めると，c を適当な係数として，

$$p(\boldsymbol{f}\,|\boldsymbol{y}^0) = c \cdot p(\boldsymbol{y}^0|\boldsymbol{f}) \cdot p(\boldsymbol{f}) \tag{6.2.10}$$

$$= c \cdot (2\pi)^{-(N+L)/2} ||\boldsymbol{E}||^{-1/2} \cdot ||\boldsymbol{D}||^{-1/2}$$
$$\exp\{-S(\boldsymbol{f})/2\} \tag{6.2.11}$$

となる．ここに，

$$S(\boldsymbol{f}) = [(\boldsymbol{y}^0 - \boldsymbol{Af})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}(\boldsymbol{y}^0 - \boldsymbol{Af}) + (\boldsymbol{Bf})^{\mathrm{T}}D^{-1}\boldsymbol{Bf}] \tag{6.2.12}$$

である．この場合，$p(\boldsymbol{f}\,|\boldsymbol{y}^0)$ を最大とする $\boldsymbol{f}$ を $\tilde{\boldsymbol{f}}$ と表記すると，

$$\hat{\boldsymbol{f}} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}\boldsymbol{y}^0 \tag{6.2.13}$$

となる．

最後に，測定データ $\boldsymbol{y}^0$ が与えられたときの確率分布 $p(\boldsymbol{f}\,|\boldsymbol{y}^0)$ を，$\hat{\boldsymbol{f}}$ を用いて書き表すと，c' を適当な係数として，

$$p(\boldsymbol{f}\,|\boldsymbol{y}^0) = c' \exp\{-[S(\hat{\boldsymbol{f}}) + (\boldsymbol{f} - \hat{\boldsymbol{f}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_f^{-1}(\boldsymbol{f} - \hat{\boldsymbol{f}})]/2\} \tag{6.2.14}$$

$$\boldsymbol{C}_f = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}^{-1}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{B})^{-1} \tag{6.2.15}$$

となる．求めるべき M 次元のベクトル $\boldsymbol{f}$ の存在確率を示す分布は正規分布となり，その平均は $\hat{\boldsymbol{f}}$，分散を示す分散共分散行列は $\boldsymbol{C}_f$ となる．

7　議論

本稿では，実際への応用を前提とし，測定データをもとに，対象量の空間分布を推定する方法について，不確定性のある量について確率分布を正規分布で表記し，最尤推定の方法を用いた．最適解とその推定誤差を求める手法について，可能な限り一般的，形式的に議論を行ったものである．形式性は，得られたデータの恣意的な選択を行うことなく，誰が行っても同じ成果を得る「客観性」のためでもある．しかし，課題も多い．主なものとして以下の 4 点を指摘する．

7.1　事前確率分布の「形」

本稿で用いたベイズ推定では，事前分布として，式（6.2.7）と（6.2.8）を用いた．ここでは，隣り合う格子点の間の差を抑えるような拘束を与えるものであり，「空間的に良い振る舞い」の一つの具体化である．

ただ，事前分布としての一つの例と考えられ，ほかにも対象量について我々がすでに認識している性質を利用することで，さまざまな事前分布の「形」が考えられる．

一般的なものとしては，未知パラメターを事前にある値に拘束するものであろう（松浦 1994）．また，『「隣り合う格子点の差」の差』を拘束することなども考えられる．

対象課題を踏まえ，適切な形を検討する必要があると考えられる．

7.2　空間的に良い振る舞いの定量化

本稿で用いた「空間的に良い振る舞い」の程度は，具体的には，5.2 節の議論や，式（5.2.3）の具体的な表現に依存している．本稿では具体的に議論をしない．

この良い振る舞いの程度，つまり，分散 σ_d^2 の具体的な形は，事前の対象量に関する知識や，測定データから求めることが考えられる．一つの実用的な解決法としては，事前分布を規定するパラメター（超パラメターと呼ばれる）を用い，超パラメターの最適値を，情報量基準を用いて定めることである．これにより，事前分布の客観性を高めることができる（松浦 1994）．

7.3　測定の独立性と系統誤差の存在

実験室での測定ではない地球科学の測定においては，測定の諸条件を自由に最適化することができない場合が多い．このため，測定誤差に，系統的な誤差が入ることがある．系統誤差が入る場合

は，本稿の議論はそのまま使えないので注意が必要である．

解決策の一つは，5.1 節の議論における測定誤差の共分散の項，式（5.1.4）でゼロとした部分を，ゼロ以外の値とすることが考えられるが，データ処理が煩雑になるので，実用性が損なわれると考えられる．

7.4　極値の推定

対象量の空間分布の極値の場所と大きさの推定については，注意が必要である．

本稿の議論から明らかなことは，対象量分布の極大，極小の場所で，これらを正しく推定するためには，その場所そのものあるいは可能な限り近傍で，精度の高い測定をする必要があるということである．これは，データ処理の段階での手法ではなく測定計画の立案と深くかかわることを意味する．事前に，極値を与える可能性の高い場所を推定し，そこで測定行為を計画的に行うことが必要と考えられる．

8　むすび

本稿は，ジオイドなどの測地データ，地磁気などの物理データ，地球の形などの地形データその他の様々な量の時間空間分布を推定することを想定し，一般的な考え方の整理を試みたものである．具体的な問題への応用は，それぞれの対象量の性質などを考慮し，柔軟にバリエーションを加えることが必要と考えられる．今後，様々な場面で，実際の利用による評価検証をしていくことが必要と考えている．

謝　辞

査読者には，当初のミスや不適切表現の多い原稿を読んでいただき，多くの有益なコメントをしていただきました．記して感謝の意を表します．

文　献

松浦充宏（1994）インバージョン解析法，現代測地学，日本測地学会編，pp.477-482，日本測地学会，東京．

要　旨

ある量の空間分布を，離散的な測定データから推定し予測しなければならないことはしばしばある．特に地球科学では，測定データが不十分な状況で，予測をしなければならないことが多い．

他方，近年の技術の発展により，膨大なデータが集積されることがおきており，その場合には，一定のアルゴリズムでデータを合理的に処理することが客観性の観点から重要となる．

この論文では，測定誤差を含んだ有限の離散的なデータから，求める量の空間分布を推定する一般的な方法を議論する．議論にあたり，求める分布が，空間的に滑らかに連続するという性質を仮定するとともに，統計的な推定の方法を用いる．