

I-720 条件付正規確率場におけるベイジアン・クリッキング

鳥取大学大学院 学 塚本博之
鳥取大学工学部 正 野田 茂

1. まえがき

一般に、条件付確率場の物理量を求める際、多次元結合条件付確率密度関数が必要となる。この場合、母数（平均値と共分散）の推定においては数多くのデータを得なければならない。そのため、現実的には、技術者の先験的な知識などによって、母数の事前情報を与えなければならない。しかし、その母数の推定値は不確定さを伴う。そこで、本研究では、既観測点でデータが与えられた条件下で、母数の不確定性を考慮し、未観測点における物理量の空間分布を推定する方法 (Bayesian Kriging) を示す。さらに、既往の Simple Kriging (SK; 平均値と共分散は既知) と Universal Kriging (UK; 平均値は未知, 共分散は既知) に比し、Bayesian Kriging (BK) の関係を明らかにする。

2. ベイズ推定のための理論

(1) 母数の不確定性

未観測点 X_r における最適推定値 $\hat{W}(X_r)$ は、 N 地点の観測データ $W(X_1) \dots W(X_N)$ に基づいて、求められる。正規確率場 $W(X)$ の平均値は $m(X)$ 、 X_i と X_j 地点の共分散 (X 地点の分散) は $C(W(X_i), W(X_j))$ ($\sigma^2(X)$) である。

平均値は、空間座標に依存し、次式に示すように、確定的な座標関数 $f_j(X)$ の線形結合 (p 次) で表す。

$$m(X) = \sum_{j=0}^p \beta_j f_j(X) \quad (1)$$

ここに、 β_j ($j = 0 \sim p$) は不確定なパラメータである。

共分散は、正の不確定パラメータ θ_1 と θ_2 を導入し、式 (2) でモデル化する。

$$C(W(X_i), W(X_j)) = \theta_1 e^{-\frac{\|X_i - X_j\|}{\theta_2}} \quad (2)$$

(2) 条件付確率場でのベイズ推定

式 (1) と (2) よりわかるように、母数は不確定なパラメータ ($\beta = (\dots \beta_i \dots)^T$ と $\theta = (\theta_1, \theta_2)^T$) よりなる。パラメータ β と θ の事後分布 $p''(\beta, \theta)$ は、ベイズの推定理論を用いると、事前分布などから求められる¹⁾。

今、観測点 X での確率量 $W(X)$ とパラメータ (β, θ) が与えられた下で、未観測点での条件付確率密度関数を $p(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))$ 、条件付平均値を $E(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))$ 、条件付分散を $\sigma^2(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))$ 、推定誤差分散を $\sigma_K^2(W(X_r) | \beta, \theta)$ で表す。事後分布 $p''(\beta, \theta)$ を用いると、特性値は、式 (3) ~ (6) のように更新される。

Bayesian 確率密度関数：

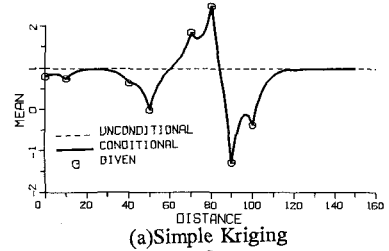
$$\begin{aligned} \hat{p}(W(X_r) | W(X)) \\ = \int_{\beta} \int_{\theta} p(W(X_r) | \beta, \theta, W(X)) p''(\beta, \theta) d\beta d\theta \end{aligned} \quad (3)$$

更新後の条件付平均値 (最適推定値)：

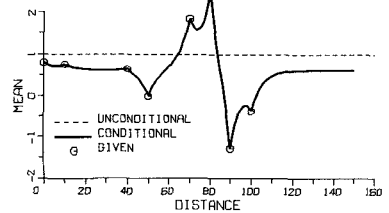
$$\begin{aligned} E(W(X_r) | W(X)) \\ = E_{\beta, \theta} [E(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))] \\ = \int_{\beta} \int_{\theta} E(W(X_r) | \beta, \theta, W(X)) p''(\beta, \theta) d\beta d\theta \end{aligned} \quad (4)$$

更新後の条件付分散：

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^2(W(X_r) | W(X)) \\ = E_{\beta, \theta} [\sigma^2(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))] \\ + \sigma_{\beta, \theta}^2 [E(W(X_r) | \beta, \theta, W(X))] \\ = \int_{\beta} \int_{\theta} \sigma^2(W(X_r) | \beta, \theta, W(X)) p''(\beta, \theta) d\beta d\theta \\ + \int_{\beta} \int_{\theta} [E(W(X_r) | \beta, \theta, W(X)) - \hat{E}(W(X_r) | W(X))]^2 \\ \cdot p''(\beta, \theta) d\beta d\theta \end{aligned} \quad (5)$$

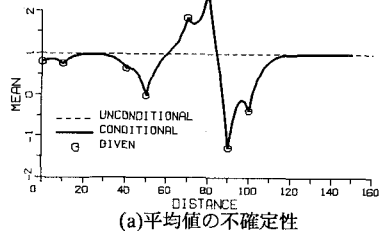


(a) Simple Kriging

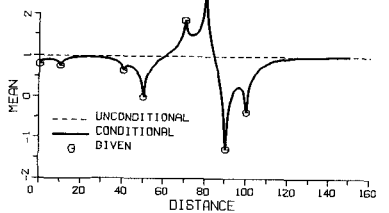


(b) Universal Kriging

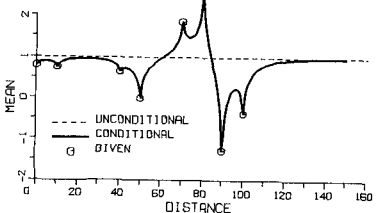
図1 既往のKrigingによる最適推定値



(a) 平均値の不確定性



(b) 共分散の不確定性



(c) 平均値と共分散の不確定性

図2 Bayesian Krigingの最適推定値

更新後の推定誤差分散：

$$\begin{aligned}\sigma_K^2(W(X_r)) &= E_{\beta, \theta}[\sigma_K^2(W(X_r) | \beta, \theta)] \\ &= \int_{\beta} \int_{\theta} \sigma_K^2(W(X_r) | \beta, \theta) p''(\beta, \theta) d\beta d\theta \quad (6)\end{aligned}$$

3. 数値計算結果および考察

ここでは、真値として、 $m(X) = 1$ および $C(W(X_i), W(X_j)) = e^{-\frac{\|X_i - X_j\|}{5}}$ ($\sigma^2(X) = 1$) の正規確率場を考えた。すなわち、平均値は、座標によらず、均一 ($p = 0$, $f_0(X) = 1$) とした。また、観測データ（8点）はシミュレーションによって得た。

上述の如く、母数の不確定性 (BK) や情報不足 (UK) を伴わなければ、式 (1) の β_0 は 1、式 (2) の θ_1 は 1、 θ_2 は 5 となる。UK では単一の未知パラメータ β_0 を含む。BK においては、1) 平均値すなわち β_0 の不確定性、2) 共分散すなわち θ_1 と θ_2 の不確定性および 3) 平均値と共分散の不確定性を同時に考慮したケースを想定した。

β_0 の事前分布に正規分布を設定すると、共役分布ならびに β_0 の事後分布は正規分布となる。同様に、 θ の事前分布をガンマ分布とすると、共役分布と θ の事後分布はガンマ分布で表せる。すなわち、 β と θ の事後平均値と事後分散に対し、 β_0 は $N(1, 0.5)$ 、 θ_1 は $\Gamma(1, 1)$ 、 θ_2 は $\Gamma(5, 25)$ とした。

図 1 と図 2 には最適推定値、図 3 と図 4 には推定誤差分散、図 5 には条件付分散を示す。図 1(a) と図 3(a) は SK、図 1(b) と図 3(b) は UK、図 2 と図 4 は BK の結果 (3つのケース) である。図 5 には BK におけるケース 1 とケース 2 の条件付分散のみを示している。

UK では、平均値が未知なため、SK に比べ、推定誤差分散が大きくなっている。無条件場での平均値の推定結果 (*) は真の値からかけ離れている。そのため、観測点間あるいは遠方場の最適推定値は*に漸近している。

平均値の不確定性を考慮した BK において、最適推定値と推定誤差分散は SK の結果と同一である。これは、平均値の事後分散が最適推定値に関与せず、その事後平均値にのみ依存するからである。推定誤差分散は共分散のみによって決まる。そのため、平均値の不確定性に左右されず、図 4(a) は図 3(a) と同一になる。しかし、条件付分散は、平均値の事後分散に影響され、図 5(a) のようになり、SK の結果よりも大きくなる。

式 (5) と (6) の比較からわかるように、推定誤差分散は観測データ $W(X)$ に依存しないが、条件付分散は $W(X)$ を含んでいる。そのため、BK の条件付分散は、ケース 2 と 3 において、観測データに依存する。特に、観測データが無条件場の平均値 (破線) から離れると (例えば、図 5(b) の 70~100 の範囲)、更新後の条件付確率密度関数は大きく変化する。その結果、図 5 に示すように、条件付分散は破線よりもかなり大きくなる。

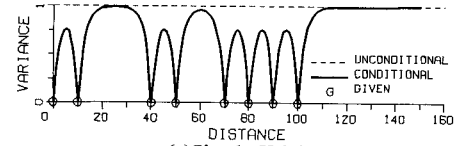
前述のように、推定誤差分散は確率場の共分散にのみ依存する。そのため、 θ_1 と θ_2 の不確定パラメータの分散は推定誤差分散に強い影響を及ぼす。この場合、ガンマ分布を仮定したため、図 4(b) と 4(c) の推定誤差分散は SK のそれ (図 3(a)) よりも小さくなっている。

4. あとがき

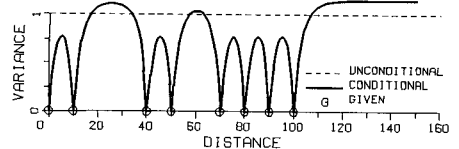
本研究では、条件付正規確率場において、母数の不確定性と観測データを同時に考慮し、ベイズの推定理論を用いて、未観測点における物理量を推定 (補間) する方法を提案した。その結果、1) 母数の不確定性が確率特性 (最適推定値・条件付分散・推定誤差分散) に及ぼす影響や、2) SK、UK と BK 間の数理的かつ定量的関係が明らかになった。

参考文献

- 1) Kitanidis, P.K. : Parameter uncertainty in estimation of spatial functions: Bayesian analysis, Water Resources Research, Vol.22, No.4, pp. 499~507, April 1986.

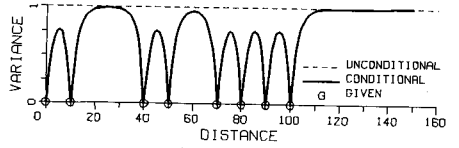


(a) Simple Kriging

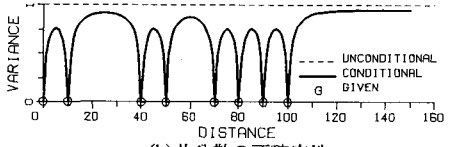


(b) Universal Kriging

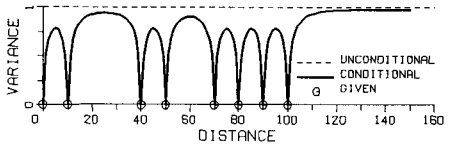
図3 既往のKrigingによる推定誤差分散



(a) 平均値の不確定性

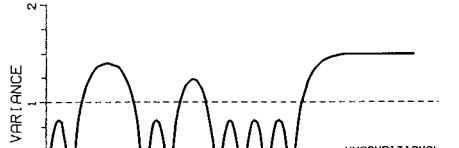


(b) 共分散の不確定性

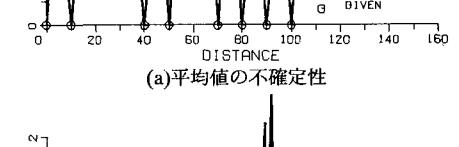


(c) 平均値と共分散の不確定性

図4 Bayesian Krigingの推定誤差分散



(a) 平均値の不確定性



(b) 共分散の不確定性



(c) 平均値と共分散の不確定性

図5 Bayesian Krigingの条件付分散