

単純な事例に基づく通常型クリギング補間と線形補間に関する考察

(2016/04/10 最終更新)

1. はじめに

とある業務の都合上、クリギング補間の性質について調査する必要が生じた。そこで単純な問題を具体例として、最も基本的な補間手法である線形補間と、クリギング補間の中でよく用いられる通常型クリギング補間の特徴を調べ、考察を行うこととした。本文書はその調査・考察の結果をまとめたものである。

2. 問題設定

簡単な為、空間一次元の問題を考える。A、B を既知点とし、その間に存在する P が未知の点であるとする。A、B、P の座標をそれぞれ $x_A=0$ 、 x_B 、 x とし、A、B での観測値を $\phi(0)$ 、 $\phi(x_B)$ 、P における推定値(未知の量)を $\phi(x)$ とする。データ点間の共分散関数については、球型モデルで記述できるものとする¹。

$$C(h) = \begin{cases} b \left(1 - \frac{3|h|}{2a} + \frac{1}{2} \frac{|h|^3}{a^3} \right) & (0 \leq |h| \leq a) \\ 0 & (|h| > a) \end{cases} \quad \dots (1)$$

ここで h は点間の座標の差である。また $a \geq x_B > 0$ であるとする。

3. 補間式の導出

先ず線形補間式 $\phi_{\text{linear}}(x)$ を導く。 $(x_A=0,0)$ 、 $(x_B, \phi(x_B))$ を通る直線の式であるので、 $\phi_{\text{linear}}(x)$ の表式は以下のように表される。

$$\phi_{\text{linear}}(x) = (x_B - x)\phi(0) + x\phi(x_B) \quad \dots (2)$$

次に通常型クリギング法から推定される補間式 $\phi_{\text{OK}}(x)$ の表式を導く。クリギング補間とは推定値が既知のデータの線形結合で記述できると考え、その重み係数を推定誤差分散が最小となるように定める補間のことを言う。点 A、B に関する重み係数をそれぞれ w_A 、 w_B とすると、

¹ 青木 (2003) によると、球型モデルの式 (1) は、直径 a の球の中に一様に存在するポアソン点の個数に関する共分散と等価である。青木 (2003) にはその導出過程および球型モデルとの対応に関するコメントが掲載されているものの、内容の省略が多くやや分かりにくい。そこで本文書の付録 A では、その導出過程と球型モデルと対応関係の詳細をフォローした。

$$\phi_{OK}(x) = w_A \phi(0) + w_B \phi(x_B) \quad \dots (3)$$

と表される。それぞれの重み係数は以下の連立方程式を解くことで得られる²。

$$\begin{pmatrix} \gamma(0) & \gamma(x_B) & 1 \\ \gamma(x_B) & \gamma(0) & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_A \\ w_B \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(x) \\ \gamma(x_B - x) \\ 1 \end{pmatrix} \quad \dots (4)$$

ここで μ はラグランジュの未定係数、 γ はバリオグラム関数であり、 γ は以下の関係式に示すように、共分散関数によって記述される³。

$$\gamma(h) = C(0) - C(h) \quad \dots (5)$$

(4) 式の行列各成分を書き下すと、

$$\gamma(0)w_A + \gamma(x_B)w_B + \mu = \gamma(x) \quad \dots (6)$$

$$\gamma(x_B)w_A + \gamma(0)w_B + \mu = \gamma(x_B - x_0) \quad \dots (7)$$

$$w_A + w_B = 1 \quad \dots (8)$$

となる。(6) 式と (7) 式の差をとり、 μ を消去すると、

$$\{\gamma(0) - \gamma(x_B)\}w_A - \{\gamma(0) - \gamma(x_B)\}w_B = \gamma(x) - \gamma(x_B - x) \quad \dots (9)$$

となる。(8) 式の両辺に $\gamma(0) - \gamma(x_B)$ を掛けたものと (9) 式の和をとって w_B を消去すると、

$$w_A = \frac{\{\gamma(x) - \gamma(x_B - x)\}}{2\{\gamma(0) - \gamma(x_B)\}} + \frac{1}{2} \quad \dots (10)$$

となる。また (8) 式より、

$$w_B = -\frac{\{\gamma(x) - \gamma(x_B - x)\}}{2\{\gamma(0) - \gamma(x_B)\}} + \frac{1}{2} \quad \dots (11)$$

となる。以下、 $0 \leq x \leq x_B$ の場合、即ち内挿(既知の点間での補間)を行なう場合について考える。(1)、(5) 式よりそれぞれのバリオグラム関数は以下のように表される。

$$\gamma(0) = 0$$

² クリギング法の重み係数を決定する方程式 (4) の導出については、付録 B を参照されたい。

³ バリオグラム関数と共分散関数の関係式 (5) の関係式の導出については、付録 C を参照されたい。

・・・(12)

$$\gamma(x_B) = -b \left(-\frac{3x_B}{2a} + \frac{1x_B^3}{2a^3} \right)$$

・・・(13)

$$\gamma(x) = -b \left(-\frac{3x}{2a} + \frac{1x^3}{2a^3} \right)$$

・・・(14)

$$\gamma(x_B - x) = -b \left\{ -\frac{3(x_B - x)}{2a} + \frac{1(x_B - x)^3}{2a^3} \right\}$$

・・・(15)

(12) ~ (15) 式を (10)、(11) 式に適用し、整理すると、

$$w_A = \frac{\frac{x^3}{a^3} - \frac{3x_B}{2a^3}x^2 - \frac{3}{a}x + \frac{3x_B^2}{2a^3}x + \frac{3x_B}{2a} - \frac{x_B^3}{2a^3} + \frac{1}{2}}{\frac{3x_B}{a} - \frac{x_B^3}{a^3}}$$

・・・(16)

$$w_B = -\frac{\frac{x^3}{a^3} - \frac{3x_B}{2a^3}x^2 - \frac{3}{a}x + \frac{3x_B^2}{2a^3}x + \frac{3x_B}{2a} - \frac{x_B^3}{2a^3} + \frac{1}{2}}{\frac{3x_B}{a} - \frac{x_B^3}{a^3}}$$

・・・(17)

(16)、(17) 式を (3) 式に代入すると、

$$\begin{aligned} \phi_{OK}(x) = & \left(\frac{\frac{x^3}{a^3} - \frac{3x_B}{2a^3}x^2 - \frac{3}{a}x + \frac{3x_B^2}{2a^3}x + \frac{3x_B}{2a} - \frac{x_B^3}{2a^3} + \frac{1}{2}}{\frac{3x_B}{a} - \frac{x_B^3}{a^3}} \right) \phi(0) \\ & + \left(-\frac{\frac{x^3}{a^3} - \frac{3x_B}{2a^3}x^2 - \frac{3}{a}x + \frac{3x_B^2}{2a^3}x + \frac{3x_B}{2a} - \frac{x_B^3}{2a^3} + \frac{1}{2}}{\frac{3x_B}{a} - \frac{x_B^3}{a^3}} \right) \phi(x_B) \end{aligned}$$

・・・(18)

が得られる。ここで線形補間の式 (2) が x の 1 次式であるのに対し、クリギング法の補間式 (18) が x の 3 次式であることに留意されたい。即ち、**球型モデルを適用する場合、クリギング法の式は 3 次の補間式となる**ことが分かる⁴。いまは既知のデータ数が 2 の場合を考えたが、それよりもデータ数が多い場合についても、バリオグラム関数が x の 3 次式となることから、クリギング法の式が 3 次の補間式になることが分かる。また (18) 式がバリオグラム関数の上限値であるシル b に依存しないことにも留意されたい。

以下では具体的な値を与えた場合の補間式の関数形をプロットしてみる。ここでは $x_B=1$ 、

⁴ 付録 E にてクリギング補間式と、同じく 3 次式の補間式として良く用いられる 3 次自然スプライン補間式についての考察を行なった。

$a=1$ 、 $\phi(0)=0$ 、 $\phi(x_B)=1$ の場合について考える。このとき線形補間の式は

$$\phi_{linear}(x) = x \quad \dots (19)$$

となる。一方、クリギング法の補間式は

$$\phi_{OK}(x) = -\frac{x}{4}(2x^2 - 3x - 3) \quad \dots (20)$$

となる。両者をプロットすると、図1のようになる。クリギング法の補間式は、線形補間式に比べて、既知点近傍での空間変化が緩やかになっており、近くの既知点の情報が強く反映されていることが分かる。

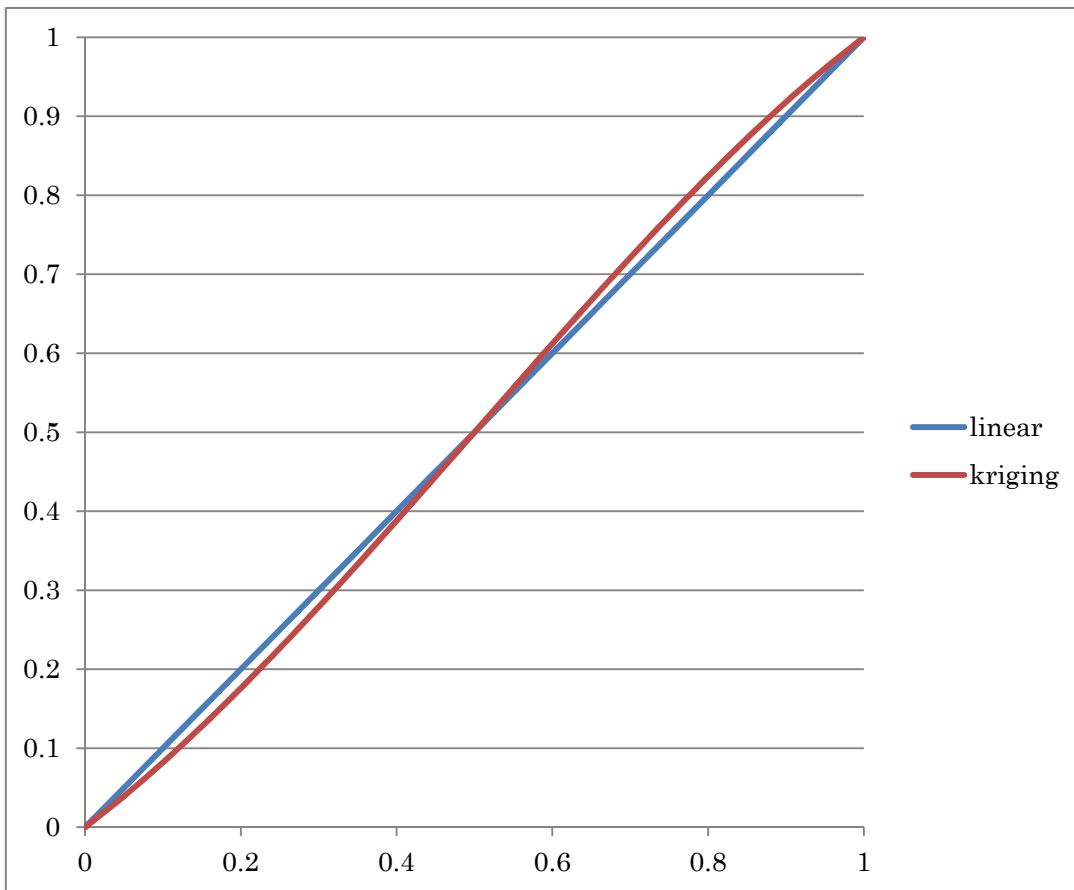


図1 : (0,0), (1,1)を既知点として与えた場合の線形補間(青線)と通常クリギング補間(茶線)。

クリギング法の補間式は、線形補間式に比べて、既知点近傍での空間変化が緩やかになることは、任意の $\phi(0)$ 、 $\phi(x_B)$ について成り立つ。以下ではこのことを確かめる。(18)式で $x_B=1$ 、 $a=1$ とすると、

$$\phi_{OK}(x) = \frac{1}{4}(2x^3 - 3x^2 - 3x + 4)\phi(0) - \frac{1}{4}(2x^3 - 3x^2 - 3x)\phi(1)$$

... (21)

(21) 式を x について微分すると、

$$\phi'_{OK}(x) = -\frac{1}{2}\left(3x^2 - 3x - \frac{3}{2}\right)\{\phi(1) - \phi(0)\}$$

... (22)

(22) 式より

$$\phi'_{OK}(0) = \phi'_{OK}(1) = \frac{3}{4}\{\phi(1) - \phi(0)\}$$

... (23)

となる。ここで $\phi(1) - \phi(0)$ は線形補間を行なったときの直線の傾きであることに注意すると、(23) 式より $\phi(1) - \phi(0) > 0$ の場合、 $0 < \phi'_{OK}(0) = \phi'_{OK}(1) < \phi(1) - \phi(0)$ 、 $\phi(1) - \phi(0) < 0$ の場合、 $0 > \phi'_{OK}(0) = \phi'_{OK}(1) > \phi(1) - \phi(0)$ となる。即ち、既知点での傾きの絶対値は線形補間の直線の傾きの絶対値よりも小さく、既知点近傍で空間変化が緩やかになることが示される。

先に述べたように、クリギング補間では推定誤差分散が最小になるように係数を決定する。クリギング補間のメリットの一つは、(一般に真の空間分布が未知であるにも関わらず、) 補間式が各点でどの程度の誤差を含んでいるかを推定することができる点にある。これは線形補間には見られない特徴である。推定誤差分散を σ^2_E とすると、

$$\sigma^2_E = -\sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_{\alpha} w_{\beta} \gamma(x_{\beta} - x_{\alpha}) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_{\alpha} \gamma(x_{\alpha} - x)$$

... (24)

と表され、今の場合は

$$\sigma^2_E = -\frac{b}{2} \left\{ \left(x^3 - \frac{3}{2}x^2 - \frac{3}{2}x + 1 \right)^2 + 3x^2 - 3x - 1 \right\}$$

... (25)

と表される。b=1 の場合について (25) 式をプロットしたものを図 2 に示す。推定誤差分散は既知のデータ点でゼロとなり、データ点から離れるほどその値が大きくなることが分かる。推定誤差分散はバリオグラム関数に依存し、その選び方の一つの指標となる。

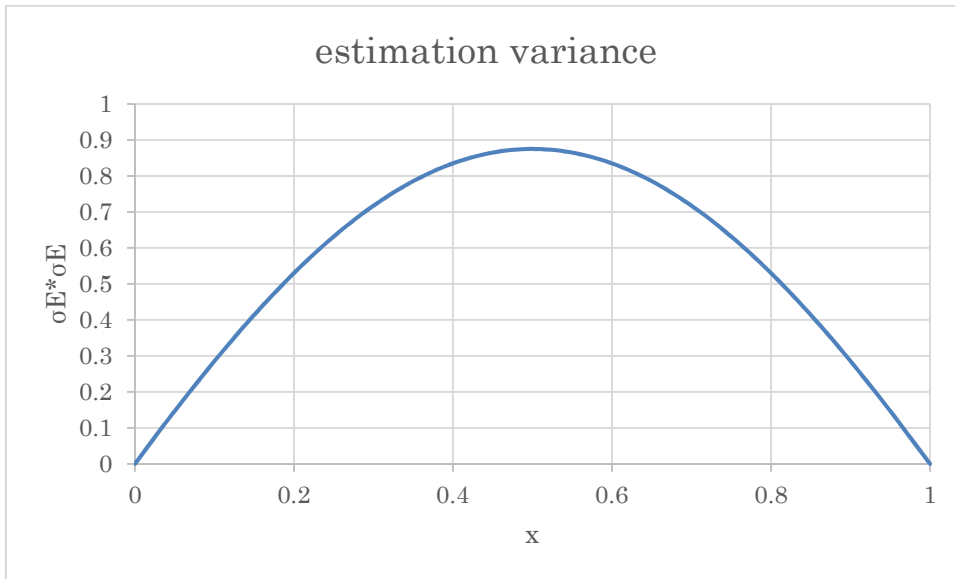


図2：推定誤差分散の空間分布。

ここまでクリギング補間式を内挿(既知の点間での補間)の式として用いてきたが、以下では外挿(既知の点の外部での補間)の式として用いる場合について考える。このとき $-1 \leq x < 0$ では、

$$\phi_{OK}(x) = \frac{x}{4}(x^2 - 3) \quad \dots (26)$$

となる。また $1 < x \leq 2$ では、

$$\phi_{OK}(x) = \frac{1}{4}(x^3 - 3x^2 + 6) \quad \dots (27)$$

となる。さらに $x < -1$ 、 $x > 2$ の場合、

$$\phi_{OK}(x) = \frac{1}{2} \quad \dots (28)$$

となる。(20)、(26)～(28)式をプロットすると図3の青線のようになる。影響半径の重なり方が変わる点では、補間式の導関数が不連続となることが分かる。また各データ点の影響半径を外れた十分遠いところでは、推定値は各データの平均値(この場合は 1/2)に収束する。このことから、空間的に単調に変化することが分かっている場合には、原則として外挿は行うべきではないと言える。

ここまでは球型共分散関数の影響半径 a が 1 である場合について考えてきたが、 a の大きさを変えると各々の式が成り立つ推定値も変化する。例えば $a=2$ の場合について考えると、 $-1 < x \leq 2$ において (20) 式、 $-2 \leq x < -1$ において (26) 式、 $1 < x \leq 2$ において (2

7) 式、 $x < -2$ 、 $x > 3$ において (28) 式が成り立つ(図3の茶色破線)。また $a=1/2$ の場合を考えると、 $-0.5 \leq x < -0.5$ において (26) 式、 $0.5 \leq x \leq 1.5$ において (27) 式、 $x < -0.5$ 、 $x > 1.5$ において (28) 式が成り立つ(図3の緑色破線)。影響半径 a がデータ間隔よりも小さくなると、補間式が不連続となることが分かる。

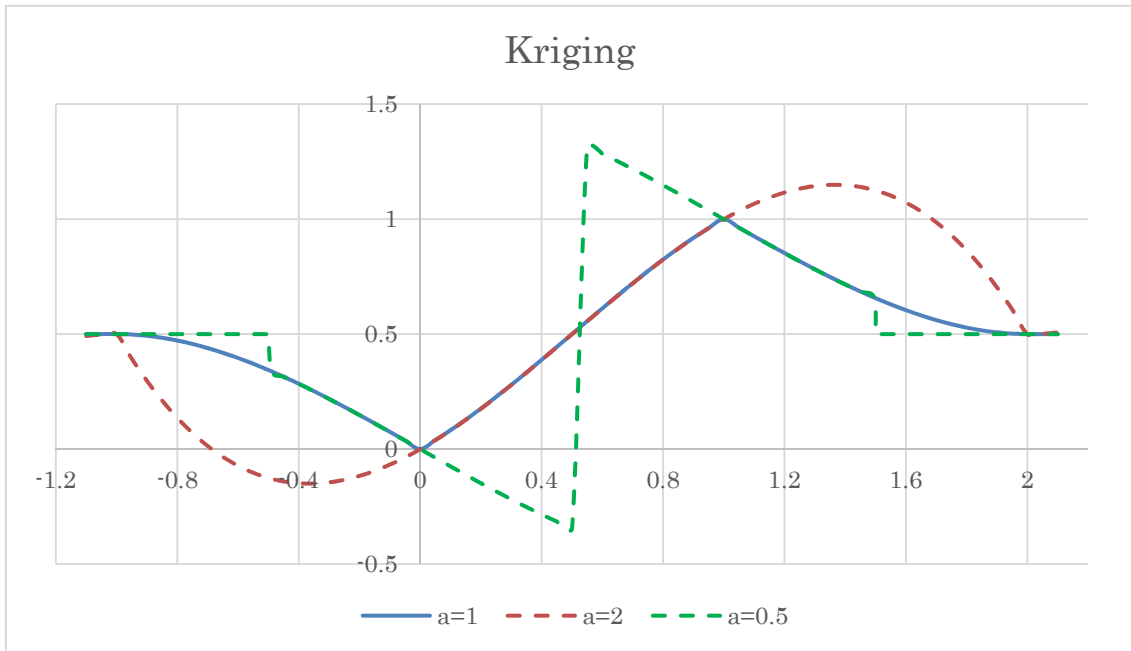


図3：影響半径 a を 1(青色実線)、2(茶色破線)、0.5(緑色破線)と変えた場合のクリギング補間式の違い。

最後にバリオグラム関数がクリギング補間式にどのような影響を及ぼすかについて述べる。ここでは再び(0,0)と(1,1)の二点間での補間を考えることとし、バリオグラムのレンジ a およびシル b は 1 であるとする。球型バリオグラム

$$\gamma_{sph}(x) = \frac{3}{2}x - \frac{1}{2}x^3 \quad \dots (29)$$

に加えて、 $0 \leq x \leq 1$ の区間で $\gamma_{large} > \gamma_{sph}$ を満たす関数

$$\gamma_{large}(x) = -(x-1)^4 + 1 \quad \dots (30)$$

および $\gamma_{small1} < \gamma_{sph}$ 、 $\gamma_{small2} < \gamma_{sph}$ を満たす関数

$$\gamma_{small1}(x) = x^2(x-2)^2 \quad \dots (31)$$

$$\gamma_{small2}(x) = \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{3}x^2$$

について考える (図4)。

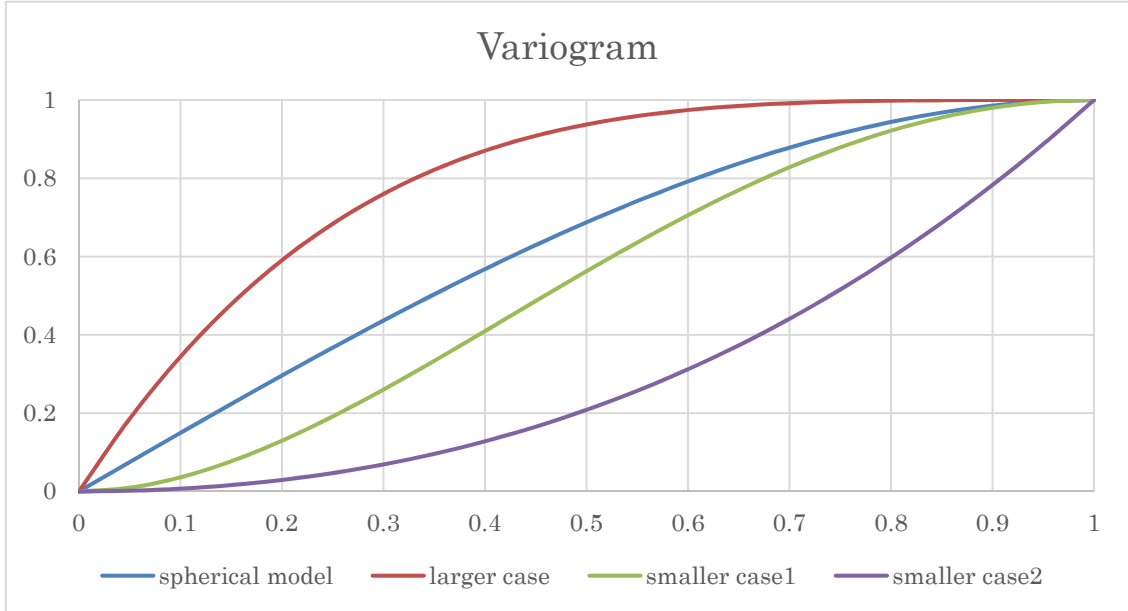


図4 : (29) ~ (32) 式で表されるバリオグラム関数のプロット。



図5 : (29) ~ (32) 式で表されるバリオグラム関数を与えた場合のそれぞれの補間式をプロットしたもの。

(3)、(11)式よりそれぞれのバリオグラムに対する補間式を求めると、以下のようになる。

$$\phi_{sph}(x) = -\frac{1}{2}x^3 + \frac{3}{4}x^2 + \frac{3}{4}x \quad \dots (33)$$

$$\phi_{large}(x) = 2x^3 - 3x^2 + 2x \quad \dots (34)$$

$$\phi_{small1}(x) = -2x^3 + 3x^2 \quad \dots (35)$$

$$\phi_{small2}(x) = \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{7}{6}x \quad \dots (36)$$

(33)～(36)式をプロットすると、図5のようになる。既知点(x=0, 1)の近傍に着目すると、 ϕ_{large} の傾きは ϕ_{sph} より大きく、 ϕ_{small1} の傾きは ϕ_{sph} よりも小さくなっている。このことは次のように説明することができる。バリオグラムは「二点間での値の差(非類似度)が点間距離とともにどのように変化するか」を記述する統計量である。点間距離が1に比べて十分小さい領域でのバリオグラムの値(非類似度)が小さいとき、そこでの推定値は既知点の値とは類似したものとなるので、推定値 ϕ の傾きは小さくなる。逆に非類似度が大きいとき、推定値は既知点の値とは異なるものとなるので、推定値 ϕ の傾きは大きくなる。

一方、 ϕ_{small2} の傾きは ϕ_{sph} よりも大きくなっている。この事実は一見すると上記の説明と整合的でないように思われるが、このこともバリオグラムによって説明することができる。 ϕ_{small2} の場合、点間距離が1に比べて十分小さい領域だけでなく、点間距離が1より十分小さくない領域でもバリオグラムの値が小さくなっている。このことは近傍の既知点データだけでなく、遠方の既知点データの影響も受けることを意味する。即ち、(0,0)に近い領域では(1,1)の影響をより強く受けることで ϕ の推定値が ϕ_{sph} よりも大きくなり、(1,1)に近い領域では(0,0)の影響をより強く受けることで ϕ の推定値が ϕ_{sph} よりも小さくなっている。

ここでの議論をまとめると、次のようになる。「基本的には、既知点におけるバリオグラムの勾配が大きいほど、既知点近傍での補間式の勾配も大きくなる。但し点間距離が大きい領域でもバリオグラムの値が小さい場合には、補間式は遠方の既知点の影響を受けるため、必ずしも成り立たない。」

参考文献

O. Dubrule, 1984: Comparing splines and Kriging, Computers and Geosciences, 10, 327
-- 338

Hans Wackernagel 原著、青木謙治監訳、2003 : 地球統計学、森北出版、266pp

P. Reynaud-Bouret, 2012: Some concentration inequalities that are useful in statistics on
point processes.

<http://math.unice.fr/~reynaudb/clermont.pdf>

金谷健一, 2005: これなら分かる最適化数学 一基礎原理から計算手法まで一, 共立出版、
260pp

付録 A：球内に一様に存在するポアソン点の個数に関する共分散の導出および（1）式との対応関係の考察

脚注で述べたように、球型モデルの式（1）は、直径 a の球の中に一様に存在するポアソン点の個数に関する共分散と等価である。本付録では青木（2003）に従い、その導出過程と球型モデルと対応関係の詳細をフォローすることとする。

導出の準備として、点過程、ポアソン点過程、ポアソン点についてごく簡単に説明する。点過程とは空間上に不規則に配置された点の集合のことを指す。ポアソン点過程とは、点過程のうち、互いに素な集合に存在する個々の点が互いに独立で、その確率分布がポアソン分布に従うものを指す。ポアソン点とはポアソン点過程の条件を満たす点を指す。

点 \mathbf{x} を中心とする直径 a の球 A に含まれるポアソン点の数を N_A 、単位体積当たりに含まれるポアソン点の平均個数を θ とする。更に点 \mathbf{x} から \mathbf{h} だけ離れた点を中心とする直径 a の球 B を考え、その球内のポアソン点の数を N_B とし、 N_A と N_B に関する共分散を $C(\mathbf{h})$ とする。このとき $C(\mathbf{h})$ は定義より

$$\begin{aligned} C(\mathbf{h}) &= E[(N_A - E[N_A])(N_B - E[N_B])] \\ &= E[N_A N_B] - E[N_A]E[N_B] \end{aligned} \quad \dots (A1)$$

と表される。ここで球 A 、 B の共有する領域を V_1 、球 A から V_1 を除いた領域を V_2 、球 B から V_1 を除いた領域を V_3 とし、 V_1 、 V_2 、 V_3 におけるポアソン点の個数をそれぞれ $N(V_1)$ 、 $N(V_2)$ 、 $N(V_3)$ とする。このとき

$$N_A = N(V_1) + N(V_2) \quad \dots (A2)$$

$$N_B = N(V_1) + N(V_3) \quad \dots (A3)$$

が成り立つ。(A2)、(A3) 式を (A1) 式に代入し、期待値の線形性 $E[aX+bY]=aE[X]+bE[Y]$ が成り立つことに注意すると、

$$\begin{aligned} C(\mathbf{h}) &= E\{[N(V_1) + N(V_2)][N(V_1) + N(V_3)]\} - E[N(V_1) + N(V_2)]E[N(V_1) + N(V_3)] \\ &= E[N(V_1)^2] + E[N(V_1)N(V_3)] + E[N(V_1)N(V_2)] + E[N(V_2)N(V_3)] - E[N(V_1)]^2 \\ &\quad - E[N(V_1)]E[N(V_3)] - E[N(V_1)]E[N(V_2)] - E[N(V_2)]E[N(V_3)] \end{aligned} \quad \dots (A4)$$

となる。ポアソン点はその定義より、互いに素な集合（この場合異なる領域）に存在する個々の点が互いに独立、即ち無相関（共分散がゼロ）である。従って共分散の定義より

$$E[N(V_1)N(V_3)] = E[N(V_1)]E[N(V_3)] \quad \dots (A5)$$

$$E[N(V_1)N(V_2)] = E[N(V_1)]E[N(V_2)] \quad \dots (A6)$$

$$E[N(V_2)N(V_3)] = E[N(V_2)]E[N(V_3)] \quad \dots (A7)$$

が成り立つ。(A5)、(A6)、(A7) 式を (A4) 式に適用すると、

$$C(\mathbf{h}) = E[N(V_1)^2] - E[N(V_1)]^2 \quad \dots (A8)$$

となる。 $N(V_1)$ の分散を $V[N(V_1)]$ とすると、定義より

$$\begin{aligned} V[N(V_1)] &= E\{[N(V_1) - E[N(V_1)]]^2\} \\ &= E[N(V_1)^2 - 2N(V_1)E[N(V_1)] + E[N(V_1)]^2] \\ &= E[N(V_1)^2] - E[N(V_1)]^2 \end{aligned} \quad \dots (A9)$$

となる。(A9) 式を用いて (A7) 式を書き換えると、

$$C(\mathbf{h}) = V[N(V_1)] \quad \dots (A10)$$

となり、右辺は $N(V_1)$ の分散となる。ポアソン点の定義より、 $N(V_1)$ の確率分布はポアソン分布に従う。このとき $V[N(V_1)] = E[N(V_1)]$ となり、 $N(V_1)$ の分散と平均は等しくなる。以下ではこのことを示す。

$N(V_1)$ の確率分布 $P(N(V_1)=k)(k=0,1,2,\dots)$ はポアソン分布に従うので、

$$P(N(V_1) = k) = \frac{m^k}{k!} e^{-m} \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad \dots (A11)$$

と表される。ここで m は正の実数である。平均の定義および (A11) 式より、

$$\begin{aligned} E[N(V_1)] &= \sum_{k=0}^{\infty} k P(N(V_1) = k) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} k \frac{m^k}{k!} e^{-m} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{m^k}{k!} e^{-m} \\ &= e^{-m} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^k}{(k-1)!} \\ &= e^{-m} m \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} \end{aligned} \quad \dots (A12)$$

となる。ここで (A12) 式右辺の級数部分に着目すると、 e^m のマクローリン展開に等しいことが分かる。即ち、

$$e^m = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!}$$

・・・(A13)

である。(A13) 式を (A12) 式に代入すると、

$$E[N(V_1)] = m$$

・・・(A14)

が得られる。同様に分散の定義および (A11)、(A13)、(A14) 式より、

$$\begin{aligned} V[N(V_1)] &= \sum_{k=0}^{\infty} \{k - E[N(V_1)]\}^2 P(N(V_1) = k) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (k - m)^2 \frac{m^k}{k!} e^{-m} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} k^2 \frac{m^k}{k!} e^{-m} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} km \frac{m^k}{k!} e^{-m} + \sum_{k=0}^{\infty} m^2 \frac{m^k}{k!} e^{-m} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \frac{m^k}{k!} e^{-m} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} km \frac{m^k}{k!} e^{-m} + \sum_{k=0}^{\infty} m^2 \frac{m^k}{k!} e^{-m} \\ &= e^{-m} \sum_{k=1}^{\infty} \{k(k-1) + k\} \frac{m^k}{k!} - 2e^{-m}m \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^k}{(k-1)!} + e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} \\ &= e^{-m} \sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) \frac{m^k}{k!} + e^{-m} \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{m^k}{k!} - 2e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} + e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} \\ &= e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} + e^{-m}m \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} - 2e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} + e^{-m}m^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^k}{k!} \\ &= m^2 + m - 2m^2 + m^2 \\ &= m \end{aligned}$$

・・・(A15)

となる。(A14)、(A15) 式より

$$E[N(V_1)] = V[N(V_1)]$$

・・・(A16)

が導かれる。

(A10) 式に (A16) 式を適用すると、

$$C(\mathbf{h}) = E[N(V_1)]$$

・・・(A17)

となる。ポアソン点の個数の平均は点数の平均体積密度 θ と体積の積で表されるので、 V_1 の体積を $V(V_1)$ として、

$$C(\mathbf{h}) = \theta V(V_1)$$

・・・(A18)

と書ける。

以下では $V(V_1)$ の具体的な表式を求める。先ず球 A、B の中心間の距離 \mathbf{h} が球の直径 \mathbf{a} よりも大きい場合 ($\mathbf{h} > \mathbf{a}$)、球が重なる領域は存在しないので $V(V_1) = 0$ となる。次に $\mathbf{h} \leq \mathbf{a}$ の場

合について考える。このとき $V(V_1)$ は、球の中心から $h/2$ 離れた点を含む面で切断することで得られるコンタクトレンズ状の領域 V_4 の体積 $V(V_4)$ の二倍に等しい。そこで $V(V_4)$ を計算することとする。球座標 (r, ω, ϕ) を導入すると、 V_4 は

$$V_4: 0 \leq \omega \leq \cos^{-1} \frac{h}{a}, \frac{h}{2 \cos \omega} \leq r \leq \frac{a}{2}, 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

・・・(A19)

と表現される。従って、球座標の体積要素が $dV=r^2 \sin \omega dr d\omega d\phi$ と表されることに注意すると、 $V(V_4)$ は以下のように求まる。

$$\begin{aligned} V(V_4) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\cos^{-1} \frac{h}{a}} \int_{\frac{h}{2 \cos \omega}}^{\frac{a}{2}} r^2 \sin \omega dr d\omega d\phi \\ &= 2\pi \int_0^{\cos^{-1} \frac{h}{a}} \left[\frac{r^3}{3} \right]_{\frac{h}{2 \cos \omega}}^{\frac{a}{2}} \sin \omega d\omega \\ &= \frac{\pi}{12} \int_0^{\cos^{-1} \frac{h}{a}} \left(a^3 \sin \omega - h^3 \frac{\sin \omega}{\cos^3 \omega} \right) d\omega \\ &= \frac{\pi}{12} \left(-a^3 [\cos \omega]_0^{\cos^{-1} \frac{h}{a}} - \frac{h^3}{2} \left[\frac{1}{\cos^2 \omega} \right]_0^{\cos^{-1} \frac{h}{a}} \right) \\ &= \frac{\pi a^3}{12} \left(1 - \frac{3h}{2a} + \frac{1h^3}{2a^3} \right) \end{aligned}$$

・・・(A20)

(A20) 式より

$$C(\mathbf{h}) = \theta V(V_1) = 2\theta V(V_4) = \theta \frac{\pi a^3}{6} \left(1 - \frac{3h}{2a} + \frac{1h^3}{2a^3} \right)$$

・・・(A21)

となる。以上より、

$$C(\mathbf{h}) = \begin{cases} \theta \frac{\pi a^3}{6} \left(1 - \frac{3h}{2a} + \frac{1h^3}{2a^3} \right) & (0 \leq |h| \leq a) \\ 0 & (|h| > a) \end{cases}$$

・・・(A22)

が導かれる。これは (1) 式において $b = \theta \pi a^3 / 6$ と置き換えたものと等しい。

最後に (A22) 式を実際の観測量に関する共分散のモデル式として用いることの解釈について考える。ここまで見てきたように、球内部のポアソン点に関する共分散 $C(\mathbf{h})$ は着目する二つの球が共有する体積に比例する。(A22) 式を共分散のモデル式として採用することは、「それぞれの観測点には直径が一定である球状の仮想的な影響圏が存在し、各観測

データの間の関連性の大きさ（共分散）は影響圏の重なる領域の体積で評価できるとみなしている」ことになる。勿論一般には共分散を影響圏の重なる領域の体積で評価することが正しいという保証はなく、これはあくまでもモデル化の選択肢の一つである。例えば影響圏の形状を円で考えるモデル化や、関連性の大きさを離間距離が大きくなるにつれて線形もしくは指数関数的に減衰するとみなすモデル化なども考えられる。モデルの選択は観測データや着目している現象の特徴に応じて試行錯誤的に行なわなければならないだろう。

付録 B: (4) 式の導出

本付録では通常クリギング法における重み係数を決定する方程式 (4) の導出を行なう。本文では既知のデータ数が 2 の場合について考えているが、ここではより一般的なデータ数が n の場合の方程式を導出しておく。通常クリギング法では、次式に示すように、既知の点 \mathbf{x}_α ($\alpha=1,2,\dots,n$) の確率場 $Z(\mathbf{x}_\alpha)$ の線形結合により、未知の点 \mathbf{x} での確率場の推定値 $Z^*(\mathbf{x})$ を求める。

$$Z^*(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha Z(\mathbf{x}_\alpha) \quad \dots (B1)$$

ここで w_α は重み係数を表す。 w_α については、推定分散

$$\sigma_E^2 = E[\{Z^*(\mathbf{x}) - Z(\mathbf{x})\}^2] \quad \dots (B2)$$

が制約条件

$$\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha = 1 \quad \dots (B3)$$

のもとで最小になるように定める。この問題は条件付き最小値問題であるので、ラグランジュの未定乗数法を適用することで解くことが可能である。即ち、ラグランジュの未定乗数を μ とし、作業関数を

$$F(w_1, w_2, \dots, w_n, \mu) \equiv \sigma_E^2 - 2\mu \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) \quad \dots (B4)$$

と置き、

$$\frac{\partial F}{\partial w_k} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad \dots (B5)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} = 0$$

・・・(B6)

となるように w_α を定めれば良い⁵。

以下では (B4) 式の右边を重み係数とバリオグラム関数で表す為、(B2) 式の右边を変形する。期待値の線形性 $E[aX+bY]=aE[X]+bE[Y]$ が成り立つことに注意すると、

$$\begin{aligned}\sigma_E^2 &= E[\{Z^*(\mathbf{x})\}^2 - 2Z^*(\mathbf{x})Z(\mathbf{x}) + \{Z(\mathbf{x})\}^2] \\ &= E[\{Z^*(\mathbf{x})\}^2] - 2E[Z^*(\mathbf{x})Z(\mathbf{x})] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2]\end{aligned}$$

・・・(B7)

となる。(B7) 式に (B1) 式を適用すると、

$$\begin{aligned}\sigma_E^2 &= E\left[\left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha Z(\mathbf{x}_\alpha)\right)\left(\sum_{\beta=1}^n w_\beta Z(\mathbf{x}_\beta)\right)\right] - 2E\left[\left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha Z(\mathbf{x}_\alpha)\right)Z(\mathbf{x})\right] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \\ &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta E[Z(\mathbf{x}_\alpha)Z(\mathbf{x}_\beta)] - 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[Z(\mathbf{x}_\alpha)Z(\mathbf{x})] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2]\end{aligned}$$

・・・(B8)

ここでバリオグラム関数の定義式

$$\gamma(\mathbf{h}) \equiv \frac{1}{2} E[(Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x}))^2]$$

・・・(B9)

において、期待値の線形性が成り立つことに注意して右边を変形すると、

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})^2] - E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})Z(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} E[Z(\mathbf{x})^2]$$

・・・(B10)

となる。(B10) 式において $\mathbf{x}=\mathbf{x}_\beta$ 、 $\mathbf{h}=\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta$ と置くと、

$$E[Z(\mathbf{x}_\alpha)Z(\mathbf{x}_\beta)] = -\gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\beta)\}^2]$$

・・・(B11)

また (B10) 式において $\mathbf{h}=\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}$ と置くと、

$$E[Z(\mathbf{x}_\alpha)Z(\mathbf{x})] = -\gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x})\}^2]$$

・・・(B12)

(B11)、(B12) 式を (B8) 式に代入すると、

⁵ ラグランジュの未定乗数法の幾何学的的解釈を付録 D にて行なった。

$$\begin{aligned}
\sigma_E^2 &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \left\{ -\gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\beta)\}^2] \right\} \\
&\quad - 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \left\{ -\gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] + \frac{1}{2} E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \right\} + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \\
&= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] + \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta E[\{Z(\mathbf{x}_\beta)\}^2] \\
&\quad + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \\
&= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\beta=1}^n w_\beta \right) \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \right) \left(\sum_{\beta=1}^n w_\beta E[\{Z(\mathbf{x}_\beta)\}^2] \right) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \\
&\hspace{15em} \dots \text{(B13)}
\end{aligned}$$

となる。(B13) 式に (B3) 式を適用すると、

$$\begin{aligned}
\sigma_E^2 &= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\beta=1}^n w_\beta E[\{Z(\mathbf{x}_\beta)\}^2] \right) \\
&\quad + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha E[\{Z(\mathbf{x}_\alpha)\}^2] \right) - E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] + E[\{Z(\mathbf{x})\}^2] \\
&= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) \\
&\hspace{15em} \dots \text{(B14)}
\end{aligned}$$

となる。(B14) 式を (B4) 式に代入すると、

$$\begin{aligned}
F(w_1, w_2, \dots, w_n, \mu) &= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - 2\mu \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) \\
&\hspace{15em} \dots \text{(B15)}
\end{aligned}$$

(B15) 式を (B5) 式に代入すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial w_k} &= \frac{\partial}{\partial w_k} \left\{ - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - 2\mu \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) \right\} \\
&= - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\alpha) - \sum_{\beta=1}^n w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_k) + 2\gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) - 2\mu \\
&= - \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\alpha) - \sum_{\beta=1}^n w_\beta \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\beta) + 2\gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) - 2\mu \\
&= -2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\alpha) + 2\gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) - 2\mu = 0
\end{aligned}$$

即ち

$$\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\alpha) + \mu = \gamma(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

・・・ (B16)

となる。また (B15) 式を (B6) 式に代入すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial \mu} &= \frac{\partial}{\partial \mu} \left\{ - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) - 2\mu \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) \right\} \\
&= -2 \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) = 0
\end{aligned}$$

即ち

$$\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha = 1$$

・・・ (B17)

となる。(B16)、(B17) 式を行列形式で表すと、

$$\begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1) & \cdots & \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_n) & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1) & \cdots & \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n) & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \\ \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}) \\ 1 \end{pmatrix}$$

・・・ (B18)

が得られる。(B18) 式において $n=2$ の場合を考え、 $\mathbf{x}_1=0$ 、 $\mathbf{x}_2=\mathbf{x}_B$ 、 $w_1=w_A$ 、 $w_2=w_B$ と置くことで (4) 式が導かれる。

付録 C : (5) 式の導出

本付録では通常クリギング法における前提条件である確率場の二次定常性、バリオグラム関数の定義に基づいて式 (5) を導出する。位置 \mathbf{x} における確率場を $\mathbf{Z}(\mathbf{x})$ として、二次定常性が成り立つとは次式が成り立つことを意味する。

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})] = E[Z(\mathbf{x})] \equiv m \quad \dots (C1)$$

$$\text{cov}[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r}), Z(\mathbf{x})] = E[\{Z(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - m\}\{Z(\mathbf{x}) - m\}] \equiv C(r) \quad \dots (C2)$$

ここで $E[.]$ は期待値、 $\text{cov}[.,.]$ は共分散である。(C1) 式は平均が位置に依存しないことを表している。また (C2) 式は共分散が二点間の距離 r のみに依存することを表し、共分散関数 $C(r)$ は (C2) 式によって定義される。期待値の線形性 $E[aX+bY]=aE[X]+bE[Y]$ が成り立つことに注意して (C2) 式の中辺を変形すると、

$$\begin{aligned} C(r) &= E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})Z(\mathbf{x}) - mZ(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - mZ(\mathbf{x}) + m^2] \\ &= E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})Z(\mathbf{x})] - mE[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})] - mE[Z(\mathbf{x})] + m^2 \\ &= E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})Z(\mathbf{x})] - m^2 - m^2 + m^2 \\ &= E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{r})Z(\mathbf{x})] - m^2 \end{aligned} \quad \dots (C3)$$

となる。一方、バリオグラム関数は次のように定義される。

$$\gamma(\mathbf{h}) \equiv \frac{1}{2} E[(Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x}))^2] \quad \dots (C4)$$

期待値の線形性が成り立つことに注意して (C4) 式の右辺を変形すると、

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})^2] - E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})Z(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} E[Z(\mathbf{x})^2] \quad \dots (C5)$$

となる。(C3) 式において $\mathbf{r}=\mathbf{0}$ と置くと、

$$E[Z(\mathbf{x})^2] = m^2 + C(0) \quad \dots (C6)$$

となる。また (C3) 式において $\mathbf{x}=\mathbf{x}+\mathbf{h}$ とした上で $\mathbf{r}=\mathbf{0}$ と置くと、

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})^2] = m^2 + C(0) \quad \dots (C7)$$

となる。更に (C3) 式において $\mathbf{r}=\mathbf{h}$ と置くと、

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})Z(\mathbf{x})] = m^2 + C(h) \quad \dots (C8)$$

となる。(C6)、(C7)、(C8) 式を (C5) 式に適用すると、

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{h}) &= \frac{1}{2} \{m^2 + C(0)\} - \{m^2 + C(h)\} + \frac{1}{2} \{m^2 + C(0)\} \\ &= C(0) - C(h) \end{aligned} \quad \dots (C9)$$

となり、(5) 式が導かれる。

付録 D：ラグランジュ未定乗数法の幾何学的解釈

付録 B では、クリギング補間式の重み係数の総和が 1 になるという条件の下で、推定誤差が最小になるように重み係数を決定した。本付録では重み係数の決定の際に用いたラグランジュ未定乗数法について、その幾何学的な解釈を与える。なお本付録の内容は金谷(2005)を参照している。ここでは簡単の為、2 変数の場合について考える。いま最小にしたい関数が

$$f(w_1, w_2) \quad \dots (D1)$$

表されているものとする。また課されている条件が

$$g(w_1, w_2) = 0 \quad \dots (D2)$$

と表されているものとする。 w_1w_2 平面を考えると、(D2) 式は例えば図 D1 の緑色の曲線のように表現される。一方 f については、 $f_0, f_0 + \Delta f, \dots (\Delta f > 0 \text{ とする})$ といった値を与えると、それぞれの値に対応する赤の曲線が得られる。 f の値を少しずつ大きくしていくと、とある f の値のときに(図 D1 では $f=f_0+2\Delta f$)、その値に対応する赤の曲線が緑色の曲線と接するようになる。即ち両者が接する点を (a, b) とすると、この点が (D2) 式という条件の下で f を最小とする点となる。 (a, b) という点で緑色の曲線と赤色の曲線が接するという事は、2 つの曲線の接線は互いに等しくなるということの意味する。接線が等しいということは、接線に垂直な線(法線)もまた等しいということである。緑色の曲線に対する法線の向きは g の勾配ベクトル ∇g によって与えられる。ここで ∇g は具体的に

$$\nabla g = \left(\frac{\partial g}{\partial w_1}, \frac{\partial g}{\partial w_2} \right) \quad \dots (D3)$$

と表される。また赤色の曲線の法線の向きも同様に ∇f によって与えられる。 ∇f についても同様に

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial w_1}, \frac{\partial f}{\partial w_2} \right) \quad \dots (D4)$$

と表される。両曲線の法線が等しいということは、2 つの勾配ベクトルの向きが等しいということである。さらにベクトルの向きが等しいということは、一方のベクトルがもう一方のベクトルの定数倍で与えられるということである。従ってその比例定数を μ とすれば、

$$\nabla f = \mu \nabla g \quad \dots (D5)$$

と表される。いま μ は定数であるので、 $F=f-\mu g$ と置くと、(D5) 式は

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial w_1}, \frac{\partial F}{\partial w_2} \right) = 0$$

・・・(D6)

と表される。また f, g は μ に依存しないので、(D2) 式は

$$\frac{\partial F}{\partial \mu} = 0$$

・・・(D7)

と表すことが出来る。以上より (D6)、(D7) 式を解けば、条件付き最小値問題を解いたことになることが分かる。ここでは簡単の為に 2 変数関数を考えたが、以上の議論はより多くの変数によって記述される関数に対しても一般性を失うことなく成立する。

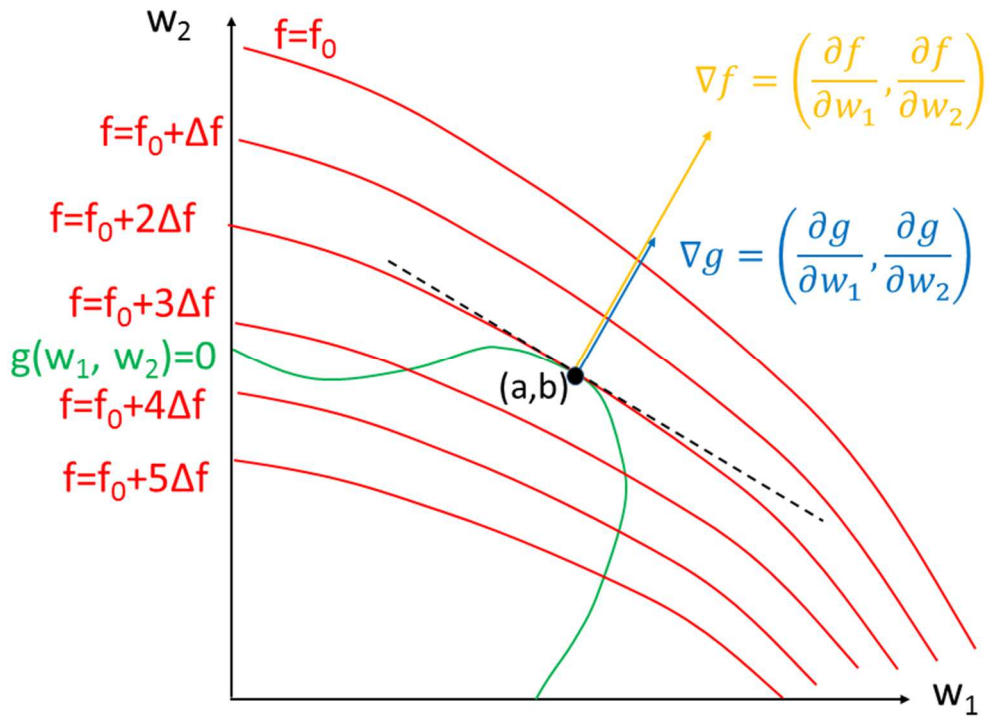


図 D1 : 2 変数の場合のラグランジュ未定乗数法の模式図。

付録 E : クリギング補間と 3 次自然スプライン補間に関する考察

球型モデルを用いた場合のクリギング補間式が 3 次式となることは既に述べたが、他に良く用いられる 3 次の補間式として、3 次自然スプライン補間式が挙げられる。スプライン補間とは、既知の点を最も滑らかに結ぶことによって得られる曲線で補間を行うことを言う。また自然なスプライン補間とは補間式の係数を決定する為に、曲線の端点で二回微分がゼロとなるという条件を加えたスプライン補間のことを指す。本付録では自然スプライン

イン補間式の一般的な表式の導出を行い、その次に簡単な事例に基づき、クリギング補間と自然スプライン補間の特徴を比較する。最後に3次自然スプライン補間式が普遍型クリギング補間式の特別な場合となっていることを導く(普遍型クリギングについては後で説明する)。

まず3次自然スプライン補間の一般的な表式を導出する。先に述べた通り、スプライン補間では既知の点を最も滑らかに結ぶ曲線に基づいて行われる。関数の滑らかさを調べる上で直観的で分かりやすいのは、二次導関数を調べることである。対象領域内において二次導関数の二乗を積分し、それが最小となれば、最も滑らかな曲線を得ることが出来たと考えることが出来る。いま n 個の既知データ $(x_i, \phi_i) (i=1, 2, \dots, n; x_1 < \dots < x_n)$ が与えられているものとし、任意の関数 $f(x)$ のうち、

$$W = \int_{x_1}^{x_n} \{f''(x)\}^2 dx \equiv \int_{x_1}^{x_n} F(f'') dx \quad \dots (E1)$$

なる作業関数が最小となるような関数を求めれば、最も滑らかな曲線が得られたことになる。 W が最小となるとき、その変分 δW はゼロとなる。(E1) 式より、

$$\delta W = \delta \int_{x_1}^{x_n} F(f'') dx = \int_{x_1}^{x_n} \delta F(f'') dx = \int_{x_1}^{x_n} \frac{dF}{df''} \delta f'' dx = \int_{x_1}^{x_n} \frac{dF}{df''} \frac{d(\delta f')}{dx} dx = 0 \quad \dots (E2)$$

となる。ここで部分積分を実行し、曲線の端点で二回微分がゼロとなるという条件を適用すると、

$$\begin{aligned} \delta W &= \left[\frac{dF}{df''} \delta f' \right]_{x_1}^{x_n} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d}{dx} \left(\frac{dF}{df''} \right) \delta f' dx \\ &= [2f''(x) \delta f']_{x_1}^{x_n} - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d}{dx} \left(\frac{dF}{df''} \right) \delta f' dx = - \int_{x_1}^{x_n} \frac{d}{dx} \left(\frac{dF}{df''} \right) \delta f' dx = 0 \quad \dots (E3) \end{aligned}$$

となる。端点では既知の値が与えられており、関数の取り方によらずゼロ ($\delta f=0$) となることに着目し、(E3) 式において再び部分積分を実行すると、

$$\delta W = - \left[\frac{dF}{df''} \delta f \right]_{x_1}^{x_n} + \int_{x_1}^{x_n} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{dF}{df''} \right) \delta f dx = \int_{x_1}^{x_n} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{dF}{df''} \right) \delta f dx = 0 \quad \dots (E4)$$

となる。(E4) 式が任意の x について成立する為には、被積分関数がゼロでなければならない。即ち、

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{dF}{df''} \right) = 2 \frac{d^4 f}{dx^4} = 0 \quad \dots (E5)$$

となる。3次自然スプラインの補間式を $\phi_{\text{spline}}(x)$ とし、(E5) 式の両辺を積分すると、

$$\frac{d^3\phi_{Spline}}{dx^3} = B \quad \dots (E6)$$

となる。但し B は積分定数である。(E6) 式の両辺を積分すると、

$$\frac{d^2\phi_{Spline}}{dx^2} = Bx + C \quad \dots (E7)$$

となる。ここで後の議論の便宜上、(E7) 式を次のように書き換えておく。

$$\frac{d^2\phi_{Spline}}{dx^2} = \sum_{i=1}^n b_i |x - x_i| \quad \dots (E8)$$

(E8) 式を更に 2 回積分することにより、次式が得られる。

$$\phi_{Spline}(x) = \sum_{i=1}^n b_i |x - x_i|^3 + c_1 x + c_0 \quad \dots (E9)$$

以下、単純な事例として $(x_i, \phi_i) = (0,0), (1,1), (2,0)$ の 3 点が観測データとして与えられた場合について考える。この場合のクリギング補間式(影響半径 a は 1 とする) $\phi_{OK}(x)$ およびスプライン補間式 $\phi_{spline}(x)$ を求める。このときクリギング補間式は

$$\phi_{OK}(x) = \sum_{i=1}^3 w_i \phi_i = w_2 \quad \dots (E10)$$

と表される。重み係数は以下の連立方程式を解くことで得られる。

$$\begin{pmatrix} \gamma(0) & \gamma(1) & \gamma(2) & 1 \\ \gamma(1) & \gamma(0) & \gamma(1) & 1 \\ \gamma(2) & \gamma(1) & \gamma(0) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(x) \\ \gamma(x-1) \\ \gamma(x-2) \\ 1 \end{pmatrix} \quad \dots (E11)$$

(1)、(5) 式を用いて (E11) 式の定数行列を書き換えると、

$$\begin{pmatrix} 0 & b & b & 1 \\ b & 0 & b & 1 \\ b & b & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(x) \\ \gamma(x-1) \\ \gamma(x-2) \\ 1 \end{pmatrix} \quad \dots (E12)$$

となる。(E12) 式の定数行列の逆行列は

$$\begin{pmatrix} -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b} & -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b} & \frac{1}{3b} & -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

・・・(E13)

であるので、

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b} & -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b} & \frac{1}{3b} & -\frac{2}{3b} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma(x) \\ \gamma(x-1) \\ \gamma(x-2) \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{2}{3b}\gamma(x) + \frac{1}{3b}\gamma(x-1) + \frac{1}{3b}\gamma(x-2) + \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b}\gamma(x) - \frac{2}{3b}\gamma(x-1) + \frac{1}{3b}\gamma(x-2) + \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3b}\gamma(x) + \frac{1}{3b}\gamma(x-1) - \frac{2}{3b}\gamma(x-2) + \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3}\gamma(x) + \frac{1}{3}\gamma(x-1) + \frac{1}{3}\gamma(x-2) + 1 \end{pmatrix}$$

・・・(E14)

となる。(E10)、(E14)式より、

$$\phi_{OK}(x) = w_2 = \frac{1}{3b}\gamma(x) - \frac{2}{3b}\gamma(x-1) + \frac{1}{3b}\gamma(x-2) + \frac{1}{3}$$

・・・(E15)

となる。(1)、(5)式を(E15)式に適用すると、

$$\phi_{OK}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(-x^3 + 2x^2 + x) & (0 \leq x \leq 1) \\ \frac{1}{2}(x^3 - 4x^2 + 3x + 2) & (x > 1) \end{cases}$$

・・・(E16)

が得られる⁶。

次にスプライン補間式 $\phi_{\text{spline}}(\mathbf{x})$ を求める。(E9)式において端点で二回微分がゼロと

⁶ 本編で2点でのクリギングを行なった場合、①バリオグラム関数の上限値であるシルbに依存しない点と、②線形補間式に比べて、既知点近傍での空間変化が緩やかになっており、既知点の情報が強く反映される点を指摘した。3点での補間の場合、①は同様に成り立つ。②については、データ点(1,1)において傾きが線形補間の場合と等しくなっているものの、それよりは大きくなる事が分かる。

いう条件を適用すると、

$$b_1 = b_3 = -\frac{1}{2}b_2 \quad \dots (E17)$$

となる。(E9) 式に既知点のデータを代入し、(E17) 式を適用すると、

$$\begin{pmatrix} -3 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_2 \\ c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \dots (E18)$$

となる。(E18) 式の定数行列の逆行列は

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{2} & -\frac{3}{4} \end{pmatrix} \quad \dots (E19)$$

と表されるので、

$$\begin{pmatrix} b_2 \\ c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{2} & -\frac{3}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad \dots (E20)$$

となる。(E17)、(E20) 式を (E9) 式に適用すると、

$$\phi_{Spline}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(-x^3 + 3x) & (0 \leq x \leq 1) \\ \frac{1}{2}(x^3 - 6x^2 + 9x - 2) & (x > 1) \end{cases} \quad \dots (E21)$$

が得られる。

2つの補間式 (E16)、(E21) をプロットしたものを図 E1 に示す。両者はともに3次式であるものの、推定される値は異なっている。クリギング補間式は確率統計学的に最も推定誤差分散が小さくなるように係数を定めたものであり、対象となるデータが従う関数の導関数が連続であることを前提としない。一方、スプライン補間式はデータ点の間が滑らかにつながっていることが分かる。(E9) 式から関数の値そのものと1次導関数、2次導関数が連続となっていることも分かる。スプライン補間はクリギング補間に比べて計算量が少ないので、空間構造を手軽に定性的に知りたい場合に用いるのに適している (Dubrule, 1984)。しかしスプライン補間はクリギング補間とは異なり、誤差の推定を行う

ことが出来ないという短所がある。Dubrule(1984)など多くの地質学的研究では、実際の観測データを用いて、クリギング補間とスプライン補間の補間誤差を調べ、クリギング補間の誤差の方が小さくなることを報告している。

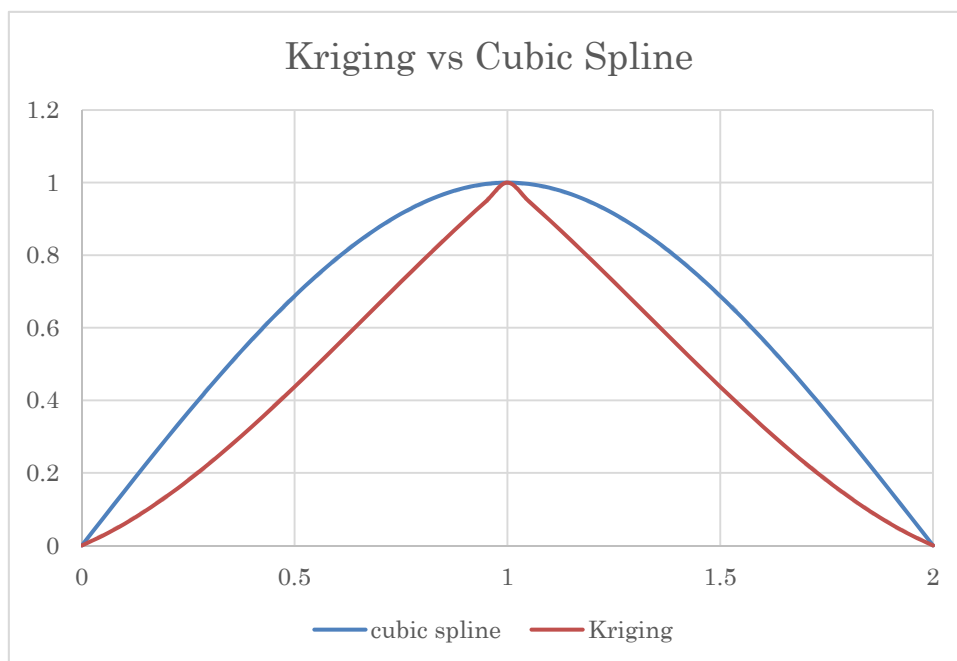


図 E 1 : クリギング補間(茶線)と 3 次自然スプライン補間(青線)。

最後にクリギング補間とスプライン補間の関係について言及しておく。Dubrule(1984)は、普遍型クリギング補間において、バリオグラム関数が $\gamma(\mathbf{h})=|\mathbf{h}|^3$ と表され、ドリフトが $\mathbf{m}(\mathbf{x})=\mathbf{a}_1\mathbf{x}+\mathbf{a}_0$ と表される場合を考えると、3 次自然スプライン補間と等価となることを示した。普遍型クリギング補間とは、確率場 $\mathbf{Z}(\mathbf{x})$ が平均ゼロの 2 次定常確率場 $\mathbf{Y}(\mathbf{x})$ と決定論的に定まる成分(ドリフトと呼ばれる) $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ の和で表されると仮定し、次式に示すように、既知の点 $\mathbf{x}_\alpha (\alpha=1,2,\dots,n)$ の確率場 $\mathbf{Z}(\mathbf{x}_\alpha)$ の線形結合により、未知の点 \mathbf{x} での確率場の推定値 $\mathbf{Z}^*(\mathbf{x})$ を求める手法のことである⁷。

$$\mathbf{Z}^*(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \mathbf{Z}(\mathbf{x}_\alpha) \quad \dots (E 2 2)$$

重み関数については、通常型クリギング補間と同様に

$$\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha = 1 \quad \dots (E 2 3)$$

⁷ 通常型クリギング補間は、普遍型クリギング補間においてドリフトがゼロの場合とした場合に相当する。

という制約条件を課すものとする。またドリフト $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ が関数 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ の線形結合

$$\mathbf{m}(\mathbf{x}) = a_0 + \sum_{l=1}^L a_l f_l(\mathbf{x}) \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 4})$$

で記述されるものとする。このとき確率場の 2 次定常性から、

$$\sum_{\alpha=1}^L w_\alpha f_l(\mathbf{x}_\alpha) = f_l(\mathbf{x}) \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 5})$$

という別の制約条件が得られる。普遍型クリギングでは、(E 2 3)、(E 2 5) 式という制約条件の下で推定誤差分散を最小にするように重み係数を決定することになる。即ち付録 B と同様に

$$\begin{aligned} F(w_1, w_2, \dots, w_n, \mu_0, \mu_1, \dots, \mu_n) &\equiv \sigma_E^2 - 2\mu_0 \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) - 2 \sum_{l=1}^L \mu_l \left(\sum_{\alpha=1}^L w_\alpha f_l(\mathbf{x}_\alpha) - f_l(\mathbf{x}) \right) \\ &= - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n w_\alpha w_\beta \gamma(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha) + 2 \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \gamma(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}) \\ &\quad - 2\mu_0 \left(\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha - 1 \right) - 2 \sum_{l=1}^L \mu_l \left(\sum_{\alpha=1}^L w_\alpha f_l(\mathbf{x}_\alpha) - f_l(\mathbf{x}) \right) \end{aligned} \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 6})$$

と置き、

$$\frac{\partial F}{\partial w_k} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 7})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mu_l} = 0 \quad (l = 0, 1, \dots, L) \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 8})$$

となるように w_α を定めれば良い。このとき重み係数を定める式を行列形式で書くと、

$$\begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1) & \dots & \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_n) & 1 & f_1(\mathbf{x}_1) & \dots & f_l(\mathbf{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1) & \dots & \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n) & 1 & f_1(\mathbf{x}_n) & \dots & f_l(\mathbf{x}_n) \\ 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f_1(\mathbf{x}_1) & \dots & f_1(\mathbf{x}_n) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_l(\mathbf{x}_1) & \dots & f_l(\mathbf{x}_n) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \\ \mu_0 \\ \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \\ \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}) \\ 1 \\ f_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_l(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad \dots (\text{E } 2 \text{ 9})$$

となる。特に $L=1$ 、 $f_1(\mathbf{x})=\mathbf{x}$ の場合を考えると、

$$\begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1) & \cdots & \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_n) & 1 & \mathbf{x}_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1) & \cdots & \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n) & 1 & \mathbf{x}_n \\ 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_n & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \\ \mu_0 \\ \mu_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \\ \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}) \\ 1 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad \dots \text{(E30)}$$

となる。ここで (E30) 式の定数行列の逆行列の第 ij 成分を $\{d_{ij}\}$ と表すと、

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \\ \mu_0 \\ \mu_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1n} & d_{1n+1} & d_{1n+2} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{n1} & \cdots & d_{nn} & d_{nn+1} & d_{nn+2} \\ d_{n+11} & \cdots & d_{n+1n} & d_{n+1n+1} & d_{n+1n+2} \\ d_{n+21} & \cdots & d_{n+2n} & d_{n+2n+1} & d_{n+2n+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \\ \vdots \\ \gamma(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}) \\ 1 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad \dots \text{(E31)}$$

となる。(E31) 式よりそれぞれの重み係数は

$$w_\alpha = \sum_{i=1}^n d_{\alpha i} \gamma(x - x_i) + d_{\alpha n+1} + d_{\alpha n+2} x \quad \dots \text{(E32)}$$

と表される。(E32) 式を (E22) 式に代入すると、

$$\begin{aligned} Z^*(x) &= \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \sum_{i=1}^n d_{\alpha i} \gamma(x - x_i) + d_{\alpha n+1} + d_{\alpha n+2} x \right\} Z(x_\alpha) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha i} Z(x_\alpha) \gamma(x - x_i) + \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha n+1} Z(x_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha n+2} Z(x_\alpha) x \end{aligned} \quad \dots \text{(E33)}$$

となる。(E33) の右辺において

$$b_i = \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha i} Z(x_\alpha) \quad \dots \text{(E34)}$$

$$c_0 = \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha n+1} Z(x_\alpha) \quad \dots \text{(E35)}$$

$$c_1 = \sum_{\alpha=1}^n d_{\alpha n+2} Z(x_\alpha) \quad \dots \text{(E36)}$$

と置くと、

$$Z^*(x) = \sum_{i=1}^n b_i \gamma(x - x_i) + c_1 x + c_0 \quad \dots \text{(E37)}$$

となる。ここで (E9) 式と (E37) 式を比較すると、

$$\gamma(x - x_i) = |x - x_i|^3$$

・・・(E38)

のときに両者は形式的に一致する。以上より、普遍型クリギング補間において、バリオグラム関数が $\gamma(\mathbf{h}) = |\mathbf{h}|^3$ と表され、ドリフト $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ が 1 次関数で表される場合を考えると、3 次自然スプライン補間と等価となることが分かる。