

ブロック行列による正規確率場の逐次シミュレーション法について

間瀬 茂[†]・持田 信行[†]・村山 靖洋[†]

(受付 2011年6月29日；改訂 2012年1月27日；採択 1月27日)

要 旨

2次定常正規確率場の理論的に正確な(少なくとも有界なレンジの共分散関数に対して)シミュレーション法としては、共分散行列のコレスキ分解による方法が直接的であるが、共分散行列のサイズが大きくなると数値的困難が生じる。一方で、標準的シミュレーション方法であるFFT(高速フーリエ変換)法を用いた方法は、規則的な格子点上のシミュレーションにしか使えない。この論文では、ブロック化された多変量正規変数の条件付き平均と条件付き分散の一般的な逐次公式を導き、それを用いて正規確率場をブロック毎に逐次的にシミュレーションする方法を提案する。この方法は少なくとも理論的にはFFT法よりも計算量が少ない。

キーワード：正規確率場、逐次的条件付き平均・分散公式、ブロック行列、逐次シミュレーション。

1. 序

地球統計学(Chilès and Delfiner, 1999; 間瀬, 2010; Wackernagel, 2003)を典型として、確率場は連続的空間で観測されるデータのモデルとして重要である。特に条件付きシミュレーション法はデータ観測地点でデータ値と一致する確率場を多数シミュレーションすることにより空間予測を行う。Matheronによる巧妙な方法である確率場の条件付きシミュレーション法(Chilès et al., 1999, pp. 465-468)を用いれば、クリギング予測と確率場の無条件シミュレーションから条件付きシミュレーションを構成できる。幾つかのアドホックな手法を除けば、確率場のシミュレーションは与えられた共分散関数を持つ2次定常(結果として強定常)正規確率場を指定された位置の集合上で生成する。

2次定常確率場のシミュレーション法は、与えられた有限個の位置での確率場の値を同時生成する。そうした方法としては、(1) Matheronによる古典的なturning band法(Matheron, 1973; Chilès and Delfiner, 1999, pp. 472-477), (2) 共分散行列のコレスキ分解を用いた直接法(Davis, 1987; Chilès and Delfiner, 1999, pp. 464-465), (3) そして離散フーリエ変換とFFTアルゴリズムを用いた方法(Pardo-Iguzquiza and Chica-Olmo, 1993; Chilès and Delfiner, 1999, pp. 496-504), が有名である。(1)は任意位置集合での確率場を生成できるが、本質的に近似共分散構造を用い、相対的に計算速度は遅い。また低次元空間に於ける正規確率場をシミュレーションできることが前提となる。(2)も任意位置集合での確率場を生成できるが、共分散行列全体のコレスキ分解を用いるため、そのサイズと分解速度が制約になる。(3)は相対的に高速(位

[†] 東京工業大学大学院 情報理工学研究所：〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1 W8-28

置の数を n とすると計算量は $O(n \log n)$ であるが、位置集合は規則的である必要があり、また範囲が無限の共分散関数に対してはそれを有限範囲な関数で近似する必要がある。

この論文では(2)の手法を拡張し、正規確率ベクトルの条件付き平均と分散の逐次的公式を用い、領域を分割し確率場を部分領域毎に逐次的にシミュレーションする方法を提案する。正規ランダムベクトルを条件付き平均と分散公式を用いて逐次的に生成するというアイデア自体は古典的であるが、この論文では部分領域に対応してブロック化された共分散行列を用い、各部分領域上の正規確率場の条件付き平均と分散を逐次的に更新する公式を与える。この手法では、原理的には位置集合は任意で良く、計算量は $O(n)$ になる。一方で条件付き平均と分散を逐次的に計算する分、実際の計算速度はやはり部分領域とその中の位置集合のサイズに依存する。更に部分領域とその中の位置集合が合同な場合、条件付き共分散行列が極限を持つことを示し、極限条件付き共分散行列を予め計算し、それを用いてシミュレーション速度を早める可能性と、その理論的正当性についても検討する。最後に提案手法を用いたシミュレーションの数値実験結果を紹介する。

1.1 2次定常確率場

d 次元空間を径数集合に持つ確率変数の集合 $Z = \{Z(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}$ を確率場と呼ぶ。統計モデルとしての確率場には以下の2次定常性の仮定が標準である：

- (1) 平均値は一定値 $E\{Z(\mathbf{x})\} = \mu$,
- (2) 共分散は位置の差分 \mathbf{h} のみに依存 $C(\mathbf{h}) = C\{Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}), Z(\mathbf{x})\}$ する。

位置の差分 \mathbf{h} のみに依存する関数 $C(\mathbf{h})$ を確率場の共分散関数と呼び、次のような基本的性質を持つ：

- (1) 偶関数： $C(-\mathbf{h}) = C(\mathbf{h})$,
- (2) 有界性： $|C(\mathbf{h})| \leq C(\mathbf{0}) = V\{Z(\mathbf{x})\}$,
- (3) 非負値定値性：すべての c_1, c_2, \dots, c_n で $\sum_{i,j=1}^n c_i c_j C(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0$.

以下で用いる共分散関数は狭義正定値であるもののみを用いる。共分散関数 $C(\mathbf{h})$ がノルム $\|\mathbf{h}\|$ のみに依存 $C(\mathbf{h}) = C(\|\mathbf{h}\|)$ するとき確率場は等方的であるといわれる。ある $r_0 > 0$ があり、 $r \geq r_0$ ならば $C(r) = 0$ となる時、共分散関数は有限なレンジを持つといい、そうした r_0 の最小値を $C(\cdot)$ のレンジと呼ぶ。地球統計学で用いられる代表的な等方的共分散関数モデルには以下のようなものがある：

- (1) 指数型モデル： $C_{\text{exp}}(r) = b \exp(-r/a)$ ($a, b > 0$).
- (2) 球型モデル：有限なレンジを持つ。

$$C_{\text{sph}}(r) = \begin{cases} b(1 - 3r/(2a) + r^3/(2a^3)) & (r \leq a), \\ 0 & (\text{その他}). \end{cases}$$

- (3) Gaussian モデル： $C_{\text{gau}}(r) = b \exp(-r^2/a^2)$, ($a, b > 0$).
- (4) Gneiting モデル：有限なレンジを持つ。

$$C_{\text{gntg}}(r) = \begin{cases} b(1 + 8sr + 25(sr)^2 + 32(sr)^3) & (0 \leq r \leq a/s), \\ 0 & (\text{その他}). \end{cases}$$

ここで $s = 0.301187465825\dots$ 。このモデルは $d \leq 3$ でのみ使え、6階微分可能である。

1.2 ブロック行列に関する結果

この節では、参考のために、以下の正規確率場の逐次シミュレーション法の議論で必要にな

る, 主としてブロック行列に関する結果を, 必ずしも直接引用しないものを含めまとめておく. T, U, V, W をそれぞれサイズ $m \times m, m \times n, n \times m, n \times n$ の行列とし, ブロック行列 $A = \begin{bmatrix} T & U \\ V & W \end{bmatrix}$ を考える.

補題 1. (ハーヴィル, 2007, 定理 13.3.8) もし T が非特異であれば

$$|A| = \left| \begin{bmatrix} W & V \\ U & T \end{bmatrix}^{-1} \right| = |T| |W - VT^{-1}U|.$$

補題 2. (ハーヴィル, 2007, 定理 8.5.5) ブロック下三角行列 $B = \begin{bmatrix} T & O \\ V & W \end{bmatrix}$ は T と W が共に非特異行列であるときに限って非特異であり $B^{-1} = \begin{bmatrix} T^{-1} & O \\ -W^{-1}VT^{-1} & W^{-1} \end{bmatrix}$.

補題 3. (ハーヴィル, 2007, 定理 8.5.10, 定理 8.5.11) T が非特異であれば A は $Q = W - VT^{-1}U$ (T のシュアアの補元) が非特異なときに限って非特異であり, その逆行列は $A^{-1} = \begin{bmatrix} T^{-1} + T^{-1}UQ^{-1}VT^{-1} & -T^{-1}UQ^{-1} \\ -Q^{-1}VT^{-1} & Q^{-1} \end{bmatrix}$.

補題 4. もし A が対称ならば T のシュアアの補元 $Q = W - VT^{-1}U$ も対称である.

証明. A が対称ならば $T^t = T, U^t = V, V^t = U, W^t = W$ である. 従って

$$Q^t = W^t - (VT^{-1}U)^t = W - U^t(T^{-1})^{-1}V^t = W - VT^{-1}U = Q. \quad \square$$

補題 5. (ハーヴィル, 2007, 定理 14.8.4) T は正定値で非特異行列と仮定する. この時 A が正定値ならば T のシュアアの補元も正定値である.

補題 6. (ハーヴィル, 2007, 系 14.2.12) 正定値行列の任意の主部分行列は正定値である.

補題 7. (ハーヴィル, 2007, 定理 14.9.5) $A = \{a_{ij}\}$ を $n \times n$ 対称行列とし, $k = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$A_k = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix}$$

を次数 k の A の首座部分行列とする. A のすべての首座部分行列 A_1, A_2, \dots, A_n の行列式が全て正のとき, かつそのときに限って A は正定値である.

補題 8. (ハーヴィル, 2007, 補助定理 14.9.6) A_{n-1} を $n \times n$ 対称行列 $A = \{a_{ij}\}$ の $n-1$ 次首座部分行列とする. A が正定値である必要十分条件は A_{n-1} が正定値かつ $|A| > 0$ であることである.

補題 9. (コレスキ分解, ハーヴィル, 2007, 定理 14.5.11) 任意の $n \times n$ 対称正定値行列 A に対して, $A = LL^t$ を満たす正の対角要素を持つ可逆な下三角行列 L が一意に存在する.

以下では対称正定値行列 A のコレスキ分解の下三角行列を $\text{Ch}(A)$ と表すことにする. 多変量正規分布の条件付き平均と分散については, 次の良く知られた結果が基本となる.

補題 10. $n+m$ 次元変量正規確率ベクトル $X = (X_1^t, X_2^t)^t$ の平均ベクトルと共分散行列を

それぞれ

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= (E\{X_1\}^t, E\{X_2\}^t)^t = (\boldsymbol{\mu}_1^t, \boldsymbol{\mu}_2^t)^t, \\ \Sigma &= \begin{bmatrix} C\{X_1, X_1\} & C\{X_1, X_2\} \\ C\{X_2, X_1\} & C\{X_2, X_2\} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

と置く. 条件 $X_1 = \boldsymbol{x}_1$ の下での X_2 の条件付き平均ベクトルと共分散行列は, それぞれ次のようになる:

$$\begin{aligned}E\{X_2 | \boldsymbol{x}_1\} &= \boldsymbol{\mu}_2 + \Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \\ C\{X_2 | \boldsymbol{x}_1\} &= \Sigma_{22} - \Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}.\end{aligned}$$

特に条件付き分散は \boldsymbol{x}_1 に依存せず非ランダムな量になる.

2. ブロック化された条件付き平均ベクトルと共分散行列

平均ゼロで共分散行列 Σ を持つ正規確率ベクトル X を生成する最も単純で直接的な方法は, 共分散行列のコレスキ分解 $\Sigma = LL^t$ と標準正規分布に従う独立な確率ベクトル Y を用いて $X = LY$ とすることである. 実際 $E\{XX^t\} = LE\{YY^t\}L = LL^t = \Sigma$ となる. この節では共分散行列をブロックに分割し, 逐次的に正規確率ベクトルをシミュレーションする方法を考える.

以下では正規確率ベクトルの(正定値)共分散行列を $k \times k$ ブロックに分割したものを

$$\Sigma_k = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & \cdots & \Sigma_{1k} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} & \cdots & \Sigma_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Sigma_{k1} & \Sigma_{k2} & \cdots & \Sigma_{kk} \end{bmatrix}$$

とし

$$\Sigma_{k+1} = \begin{bmatrix} \Sigma_k & B_{k+1}^t \\ B_{k+1} & \Sigma_{k+1,k+1} \end{bmatrix} \quad \text{ここで} \quad B_{k+1} = [\Sigma_{k+1,1} \quad \Sigma_{k+1,2} \quad \cdots \quad \Sigma_{k+1,k}]$$

と置く. また Σ_k のコレスキ分解を $\Sigma_k = L_k L_k^t$ とし, 下三角行列 L_k を Σ_k に準じてブロック化した各ブロックを L_{ij} と置く. 当然 L_k はブロック下三角行列 ($i < j$ ならば $L_{ij} = O$) である. L_{kk} の逆行列を K_{kk} とする. また E と O はそれぞれ適当なサイズの単位行列と零行列とする(同じ式の中でもサイズは異なる可能性がある). さらにいくつかの証明中では, その具体的な形が不要なブロック成分をシンボル * で表現する.

命題 1. L_k は一貫性を持つ, つまり

$$L_{k+1} = \begin{bmatrix} L_k & O \\ Y_{k+1} & L_{k+1,k+1} \end{bmatrix}, \quad \text{ここで} \quad Y_{k+1} = [L_{k+1,1} \quad L_{k+1,2} \quad \cdots \quad L_{k+1,k}].$$

証明. L_{k+1} の左上の $n \times n$ ブロック部分行列を L_k^* とすると

$$\Sigma_{k+1} = \begin{bmatrix} \Sigma_k & B_{k+1}^t \\ B_{k+1} & \Sigma_{k+1,k+1} \end{bmatrix} = L_{k+1} L_{k+1}^t = \begin{bmatrix} L_k^* & O \\ Y_{k+1} & L_{k+1,k+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_k^* & Y_{k+1}^t \\ O & L_{k+1,k+1}^t \end{bmatrix}.$$

$R = \begin{bmatrix} E & O \\ O & O \end{bmatrix}$ を用いると

$$\begin{bmatrix} \Sigma_k & O \\ O & O \end{bmatrix} = R \Sigma_{k+1} R^t = \begin{bmatrix} E & O \\ O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_k & B_{k+1}^t \\ B_{k+1} & \Sigma_{k+1,k+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

となる. 従って $R \Sigma_{k+1} R^t = R L_{k+1} L_{k+1}^t R^t = (R L_{k+1})(R L_{k+1})^t$ であり

$$R L_{k+1} = \begin{bmatrix} E & O \\ O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_k^* & O \\ Y_{k+1} & L_{k+1,k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_k^* & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

となるから

$$\begin{bmatrix} \Sigma_k & O \\ O & O \end{bmatrix} = R \Sigma_{k+1} R^t = (R L_{k+1})(R L_{k+1})^t = \begin{bmatrix} L_k^* & O \\ O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_k^* & O \\ O & O \end{bmatrix}^t.$$

従って $\Sigma_k = L_k^* (L_k^*)^t$ である. コレスキ分解の一意性(補題 9)から $L_k^* = L_k$ となるから, 結局 $L_{k+1} = \begin{bmatrix} L_k & O \\ Y_{k+1} & L_{k+1,k+1} \end{bmatrix}$ となり, 一貫性が保たれる. \square

命題 2. L_k の i 行目のブロック L_{ki} は以下の性質を持つ:

$$L_{k1} = \Sigma_{k1} (L_{11}^t)^{-1}, \quad L_{ki} = \left(\Sigma_{ki} - \sum_{a=1}^{i-1} L_{ka} L_{ia}^t \right) (L_{ii}^t)^{-1} \quad (2 \leq i \leq k-1),$$

$$L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t.$$

証明. 簡単のために $B_k = [\Sigma_{k1} \quad \Sigma_{k2} \quad \cdots \quad \Sigma_{k,k-1}]$, $Y_k = [L_{k1} \quad L_{k2} \quad \cdots \quad L_{k,k-1}]$ と置くと

$$\Sigma_k = \begin{bmatrix} \Sigma_{k-1} & B_k^t \\ B_k & \Sigma_{kk} \end{bmatrix} = L_k L_k^t = \begin{bmatrix} L_{k-1} & O \\ Y_k & L_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{k-1}^t & Y_k^t \\ O & L_{kk}^t \end{bmatrix}$$

となり, $i=1$ の時 $\Sigma_{k1} = L_{k1} L_{11}^t$, $L_{k1} = \Sigma_{k1} (L_{11}^t)^{-1}$, $2 \leq i \leq k-1$ の時は $i < a$ で $L_{ia} = O$ であるから

$$\Sigma_{ki} = \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ia}^t = \sum_{a=1}^{i-1} L_{ka} L_{ia}^t + L_{ki} L_{ii}^t + \sum_{a=i+1}^{k-1} L_{ka} L_{ia}^t = \sum_{a=1}^{i-1} L_{ka} L_{ia}^t + L_{ki} L_{ii}^t,$$

$$L_{ki} = \left(\Sigma_{ki} - \sum_{a=1}^{i-1} L_{ka} L_{ia}^t \right) (L_{ii}^t)^{-1}.$$

そして $i=k$ の時

$$\Sigma_{kk} = Y_k Y_k^t + L_{kk} L_{kk}^t = \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t + L_{kk} L_{kk}^t,$$

$$L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t. \quad \square$$

命題 3. 任意の正整数 s を固定する. $|k-j| > s$ である全ての k, j に対して $\Sigma_{kj} = O$ であれば $L_{kj} = O$ となる.

証明. k を一つ固定する. $j=1$ の時 $\Sigma_{k1} = O$ であれば $L_{k1} = \Sigma_{k1} (L_{11}^t)^{-1} = O$ となる. $j=l$ の時 $\Sigma_{k1} = \Sigma_{k2} = \cdots = \Sigma_{kl} = O$ ならば $L_{k1} = L_{k2} = \cdots = L_{kl} = O$ が成り立つと仮定する. $j=l+1$

の時 $\Sigma_{kj} = O$ であれば

$$L_{kj} = (\Sigma_{kj} - \sum_{a=1}^l L_{ka} L_{ja}^t) (L_{jj}^t)^{-1} = O (L_{jj}^t)^{-1} = O$$

となり, $j = l + 1$ のときも $L_{kj} = O$ となる. 従って数学的帰納法により証明が得られる. \square

有界範囲の共分散関数に対しては, 命題 3 は次のように拡張できる.

命題 4. 任意の正整数 s を固定する. $|k - j| > s$ である全ての k, j に対して $\Sigma_{kj} = O$ であれば, L_{kj} は以下の関係を持つ: $k < s + 2$ の時

$$L_{k1} = \Sigma_{k1} (L_{11}^t)^{-1}, \quad L_{kj} = \left(\Sigma_{kj} - \sum_{a=1}^{j-1} L_{ka} L_{ja}^t \right) (L_{jj}^t)^{-1} \quad (2 \leq j \leq k-1),$$

$$L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t.$$

また $s + 2 \leq k$ の時は

$$L_{kj} = O \quad (1 \leq j \leq k - s - 1),$$

$$L_{k, k-s} = \Sigma_{k, k-s} (L_{k-s, k-s}^t)^{-1},$$

$$L_{kj} = \left(\Sigma_{kj} - \sum_{a=k-s}^{j-1} L_{ka} L_{ja}^t \right) (L_{jj}^t)^{-1} \quad (k - (s-1) \leq j \leq k-1),$$

$$L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=k-s}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t.$$

証明. $k < s + 2$ の時 Σ_k に $\Sigma_{ij} = O$ となるブロックはないので, 命題 2 から直接結論ができる. $s + 2 \leq k$ の時は以下の 3 つの場合に分けて証明される: $1 \leq j \leq k - s - 1$ の時は命題 3 より明らか. $j = k - s$ の時は $1 \leq j \leq k - s - 1$ で $L_{kj} = O$ に注意すると

$$L_{k, k-s} = \left(\Sigma_{k, k-s} - \sum_{a=1}^{k-s-1} L_{ka} L_{k-s, a}^t \right) (L_{k-s, k-s}^t)^{-1} = \Sigma_{k, k-s} (L_{k-s, k-s}^t)^{-1}.$$

$k - (s-1) \leq j \leq k-1$ の時は $1 \leq j \leq k - s - 1$ で $L_{kj} = O$ に注意すると

$$L_{kj} = \left(\Sigma_{kj} - \sum_{a=1}^{j-1} L_{ka} L_{ja}^t \right) (L_{jj}^t)^{-1} = \left(\Sigma_{kj} - \sum_{a=k-s}^{j-1} L_{ka} L_{ja}^t \right) (L_{jj}^t)^{-1}.$$

そして $j = k$ の時は $1 \leq j \leq k - s - 1$ で $L_{kj} = O$ より

$$L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=k-s}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t. \quad \square$$

命題 5. L_k は非特異である.

証明. Σ_k は非特異だから $|\Sigma_k| = |L_k L_k^t| = |L_k| |L_k^t| = |L_k|^2 > 0$. \square

以下では V_k は L_k の逆行列とし, $\{V_{ij}\}$ をそのブロックとする. V_k にも L_k と同様の一貫性がある.

命題 6.

$$V_{k+1} = \begin{bmatrix} V_k & O \\ R_{k+1} & V_{k+1,k+1} \end{bmatrix}, \quad \text{ここで } R_{k+1} = [V_{k+1,1} \quad V_{k+1,2} \quad \cdots \quad V_{k+1,k}].$$

また

$$V_{k+1,k+1} = L_{k+1,k+1}^{-1}, \quad V_{k+1,j} = -V_{k+1,k+1} \sum_{a=j}^k L_{k+1,a} V_{aj} \quad (1 \leq j \leq k).$$

証明. $L_{k+1} = \begin{bmatrix} L_k & O \\ Y_{k+1} & L_{k+1,k+1} \end{bmatrix}$ の逆行列は、補題 2 より

$$L_{k+1}^{-1} = \begin{bmatrix} L_k^{-1} & O \\ -L_{k+1,k+1}^{-1} Y_{k+1} L_k^{-1} & L_{k+1,k+1}^{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_k & O \\ -L_{k+1,k+1}^{-1} Y_{k+1} V_k & L_{k+1,k+1}^{-1} \end{bmatrix} = V_{k+1}$$

となる. また $1 \leq j \leq k$ で $V_{k+1,j} = -V_{k+1,k+1} \sum_{a=j}^k L_{k+1,a} V_{aj}$ となることも同時にわかる. \square

有界範囲の共分散行列の場合は以下の命題が成り立つ.

命題 7. 任意の正整数 s を固定する. $|k-j| > s$ である全ての k, j に対して $\Sigma_{kj} = O$ であれば, $\{V_{kj}\}$ は以下の関係を満たす:

$$V_{kk} = L_{kk}^{-1}, \quad V_{kj} = -V_{kk} \sum_{a=\max\{j, k-s\}}^{k-1} L_{ka} V_{aj} \quad (1 \leq j \leq k-1).$$

証明. $k < s+2$ の時 Σ_k に $\Sigma_{ij} = O$ となるブロックは無く, 任意の j で $L_{kj} \neq O$ となるので V_{kj} は命題 6 から

$$V_{kk} = L_{kk}^{-1}, \quad V_{kj} = -V_{kk} \sum_{a=j}^{k-1} L_{ka} V_{aj}.$$

$s+2 \leq k$ の時 $\Sigma_{kj} = O$ ($1 \leq j \leq k-s-1$) であるから, 命題 3 より $L_{kj} = O$ ($1 \leq j \leq k-s-1$) となる. よって $j=k$ の時 $V_{kk} = L_{kk}^{-1}$. $k-s \leq j \leq k-1$ の時 $V_{kj} = -V_{kk} \sum_{a=j}^{k-1} L_{ka} V_{aj}$. そして $1 \leq j \leq k-s-1$ の時

$$V_{kj} = -V_{kk} \sum_{a=j}^{k-1} L_{ka} V_{aj} = -V_{kk} \sum_{a=k-s}^{k-1} L_{ka} V_{aj}.$$

以上の結果より証明が完了する. \square

3. 逐次シミュレーション法

以上の結果を用いて, ブロック行列を用いた正規確率場の逐次シミュレーション法を考える. 一般性を失うこと無く, 考える確率場の平均は総てゼロと仮定してよい. 考慮する領域 A が n 個の互いに排反な副領域群 A_1, A_2, \dots, A_n に分割されているとする. 各領域 A_i にはそれぞれ p_i 個の点群を考え, 確率場のその各位置での値を与える確率ベクトル X_i を生成する逐次アルゴリズムを考える. 次の二つの命題は, 条件付き平均と分散を逐次的に計算する方法を与える.

命題 8. 条件付き平均 M_k は次の漸化式を持つ:

$$M_1 = \text{ゼロベクトル}, \quad M_k = \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} K_{aa} (X_a - M_a) \quad (k \geq 2).$$

証明. 条件付き平均は $M_k = B_k \Sigma_{k-1}^{-1} [X_1^t \ X_2^t \ \cdots \ X_{k-1}^t]^t$ と表される (補題 10). $\Sigma_k \Sigma_k^{-1} = \Sigma_k (K_k^t K_k) = E$ であるから

$$\begin{aligned} E &= \begin{bmatrix} \Sigma_{k-1} & B_k^t \\ B_k & \Sigma_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{k-1}^t & R_k^t \\ O & K_{kk}^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{k-1} & O \\ R_k & K_{kk} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} * & * \\ B_k K_{k-1}^t K_{k-1} + (B_k R_k^t + \Sigma_{kk} K_{kk}^t) R_k & (B_k R_k^t + \Sigma_{kk} K_{kk}^t) K_{kk} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

となる. ここで $R_k = [K_{k1} \ K_{k2} \ \cdots \ K_{k,k-1}]$ と置いた. 従って $(B_k R_k^t + \Sigma_{kk} K_{kk}^t) K_{kk} = E$ であり $K_{kk}^{-1} = B_k R_k^t + \Sigma_{kk} K_{kk}^t$ である. この結果を代入すると $B_k K_{k-1}^t K_{k-1} + (B_k R_k^t + \Sigma_{kk} K_{kk}^t) R_k = B_k \Sigma_{k-1}^{-1} + K_{kk}^{-1} R_k = O$ となることから $B_k \Sigma_{k-1}^{-1} = -K_{kk}^{-1} R_k = -L_{kk} R_k$ となる. この結果を更に式 $M_k = B_k \Sigma_{k-1}^{-1} [X_1^t \ X_2^t \ \cdots \ X_{k-1}^t]^t$ に代入し, 命題 2 の二番目の関係式を用いれば, 次の逐次公式を得ることが出来る:

$$\begin{aligned} M_k &= -K_{kk}^{-1} \sum_{j=1}^{k-1} K_{kj} X_j = -K_{kk}^{-1} \sum_{j=1}^{k-1} \left[-K_{kk} \left(\sum_{a=j}^{k-1} L_{ka} K_{aj} \right) X_j \right] \\ &= \sum_{j=1}^{k-1} \left(\sum_{a=j}^{k-1} L_{ka} K_{aj} \right) X_j = \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} \left(\sum_{j=1}^{a-1} K_{aj} X_j + K_{aa} X_a \right) \\ &= \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} (-K_{aa} M_a + K_{aa} X_a) = - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} K_{aa} (M_a - X_a). \quad \square \end{aligned}$$

命題 9. 条件付き分散 V_k は関係 $V_k = L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t$ を満たす. 特に $L_{kk} = \text{Ch}(V_k)$ である.

証明. V_k は Σ_k のブロック化 $\Sigma_k = \begin{bmatrix} \Sigma_{k-1} & B_k^t \\ B_k & \Sigma_{kk} \end{bmatrix}$ における Σ_{k-1} のシュア補元 $\Sigma_{kk} - B_k \Sigma_{k-1}^{-1} B_k^t$ であり, 非特異で対称正定値である (補題 4, 5). 従って $\Sigma_k^{-1} = \begin{bmatrix} * & * \\ * & V_k^{-1} \end{bmatrix}$. ここで $\Sigma_k^{-1} = K_k^t K_k$ を用いると

$$\Sigma_k^{-1} = \begin{bmatrix} * & * \\ * & V_k^{-1} \end{bmatrix} = K_k^t K_k = \begin{bmatrix} K_{k-1}^t & Q_k^t \\ O & K_{kk}^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{k-1} & O \\ Q_k & K_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * \\ * & K_{kk}^t K_{kk} \end{bmatrix}.$$

よって $V_k = (V_k^{-1})^{-1} = (K_{kk}^t K_{kk})^{-1} = L_{kk} L_{kk}^t$. 更に命題 2 より $L_{kk} L_{kk}^t = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t$ であるから $V_k = \Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{ka}^t$. \square

以上をまとめると, 確率ベクトル $X_1, X_2, \dots, X_n, \dots$ の逐次的生成法を与える以下の定理を得る.

定理 1. $W_1, W_2, \dots, W_n, \dots$ を (適当なサイズの) 標準正規分布に従う, 互いに独立な成分を持つ, 相互にも独立な確率ベクトルとすると

$$X_1 = L_{11} W_1, \quad X_k = L_{kk} W_k + M_k \quad (k \geq 2).$$

ここで

$$M_1 = \text{ゼロベクトル}, \quad M_k = \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka} L_{aa}^{-1} (X_a - M_a) \quad (k \geq 2).$$

行列 L_{ki} は次の関係から逐次的に定まる:

$$L_{11} = \text{Ch}(\Sigma_{11}),$$

$$L_{k1} = \Sigma_{k1}(L_{11}^t)^{-1} \quad (2 \leq k),$$

$$L_{ki} = \left(\Sigma_{ki} - \sum_{a=1}^{i-1} L_{ka}L_{ia}^t \right) (L_{ii}^t)^{-1} \quad (2 \leq i \leq k-1),$$

$$L_{kk} = \text{Ch} \left(\Sigma_{kk} - \sum_{a=1}^{k-1} L_{ka}L_{ka}^t \right).$$

4. 有限なレンジの場合

前節の結果は、共分散関数が無限のレンジを持つ場合も有効であるが、当然ながらそうした場合、必要な計算量は繰り返し毎に増大する。この節では有限なレンジを持つ共分散関数の場合に、前節の結果が簡略化されることを示す。

定義 1. $|i-j| > s$ を満たす全ての i, j に対して相互共分散行列 $\Sigma_{ij} = O$ となるとき、正整数 s をレンジと呼ぶ。

共分散関数が有限なレンジを持てばそうした s が存在するが、その具体的な値は領域とその中の点列の配置に依存する。例えば $s=1$ であれば

$$\Sigma_k = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & O & \cdots & \cdots & \cdots & O \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} & \Sigma_{23} & \ddots & & & \vdots \\ O & \Sigma_{32} & \Sigma_{33} & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \Sigma_{k-2,k-2} & \Sigma_{k-2,k-1} & O \\ \vdots & & & \ddots & \Sigma_{k-1,k-2} & \Sigma_{k-1,k-1} & \Sigma_{k-1,k} \\ O & \cdots & \cdots & \cdots & O & \Sigma_{k,k-1} & \Sigma_{kk} \end{bmatrix}$$

のようにブロック化される。従ってこの場合次の結果を得る。

定理 2. 有限なレンジ s を持つとき、条件付き平均と分散は以下の漸化式を持つ： $k \geq 2$ で

$$M_k = \sum_{a=\max\{1,k-s\}}^{k-1} L_{ka}L_{aa}^{-1}(X_a - M_a),$$

$$V_k = \Sigma_{kk} - \sum_{a=\max\{1,k-s\}}^{k-1} L_{ka}L_{ka}^t.$$

証明. $\Sigma_{kj} = L_{kj} = O$ ($1 \leq j \leq k - (s+1)$) であることから、命題 8, 9 を用いて結論が得られる。□

5. 極限条件付き分散を用いた正規確率場の逐次シミュレーション法

これまでに述べた正規確率場の逐次シミュレーション法は、一度に扱う行列のサイズを減少させているが、それでも特に条件付き分散を計算する手間が毎回必要になる。一方で領域と其中的点群が合同である場合、数値実験によればこの非ランダムな条件付き分散は、比較的速やかに収束することが観察される。一方、条件付き平均は本来ランダムな量であり収束性は見

られない. 従って, まずこの極限条件付き分散を求め, それを最初から使うことが考えられる. この節ではこうした極限条件付き分散を用いた正規確率場の逐次シミュレーション法とその理論的妥当性を考察する. この節では図 1 のように合同な領域列 A_1, A_2, \dots が並んでおり, 各 A_i 中の点列も格子状に並んでいる必要はないが互いに合同であるとする. 以下の命題 10 の証明の必要上, 領域列と確率ベクトル列はそれぞれ $\dots, A_{-2}, A_{-1}, A_0$ 及び $\dots, X_{-2}, X_{-1}, X_0$ と延長されているとする.

命題 10. 条件付き共分散行列の列 V_k は, 確率 1 で (非ランダムな) 極限 V_∞ を持つ.

証明. まず, 必ずしも正規型でない強定常 2 次確率場を考える. X_n の i 番目の成分を $X_{n:i}$ と置くと, 条件付き共分散行列 $C\{X_n | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$ の (i, j) 成分は $E\{X_{n:i}X_{n:j} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$ と

$$E\{X_{n:i} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}E\{X_{n:j} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$$

の差に分解できるので, 全ての i, j で

$$E\{X_{n:i}X_{n:j} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\} - E\{X_{n:i} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}E\{X_{n:j} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$$

のそれぞれが確率 1 で収束することを示せばよい. $E\{X_{n:i} | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$ の場合の証明を与える.

$E\{X_{0:i} | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}$ ($n = 1, 2, \dots$) はマルチンゲールでありその L^1 ノルムは有界

$$E|E\{X_{0:i} | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}| \leq E\{X_{0:i}\}$$

である. 従って Doob のマルチンゲール前向き収束命題 (Williams, 1991, p. 112) より $E\{X_{0:i} | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}$ は確率 1 で有限な極限を持つことがわかる. 同様な議論から $E\{X_{0:i}X_{0:j} | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}$ も確率 1 で有限な極限を持つ. 結局, 条件付き共分散行列 $C\{X_0 | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}$ は確率 1 で有限な極限行列を持つ.

他方で, 2 次定常な正規確率場であれば同時に強定常性を持つから, $C\{X_0 | X_{-1}, X_{-2}, \dots, X_{-(n-1)}\}$ と $C\{X_n | X_1, X_2, \dots, X_{n-1}\}$ は同じ確率分布に従う. さらに条件付き分散は非ランダム (補題 10) でもあるから, 上で議論した確率 1 の収束は非ランダムな量に対する収束を意味する. 以上から結論が得られる. \square

次に $s = 1$ の場合に, 極限行列 V_∞ を数値的に求める方法を考える. この時 $L_{k,k-2} = 0$ であることに注意すると $V_k = \Sigma_{kk} - L_{k,k-1}L_{k,k-1}^t = \Sigma_{kk} - \Sigma_{k,k-1}V_{k-1}^{-1}\Sigma_{k,k-1}^t$ となり, V_∞ が存在す

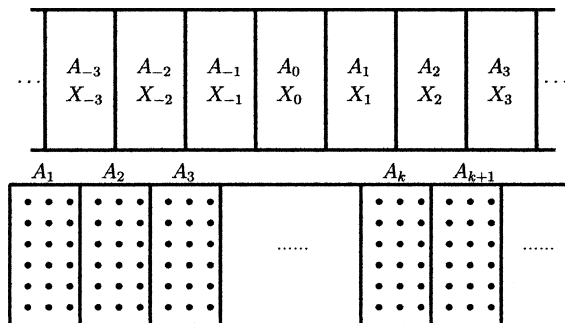


図 1. 合同な領域列と対応する確率ベクトル列 (上) と合同な点配置 (下).

ることを考慮すると

$$(5.1) \quad V_\infty = \Sigma_{11} - \Sigma_{21} V_\infty^{-1} \Sigma_{21}^t$$

となり、極限条件付き分散に関する方程式が求まる。式 (5.1) の形の行列方程式の解法としては以下のものが考えられる (Fital-Akelbek, 2009; Benner and Faßbender, 2007; Varga, 2009) :

- (1) 定義通りに V_k の数値的極限を求める,
- (2) fixed-point iteration,
- (3) Meini's algorithm,
- (4) doubling algorithm,
- (5) butterfly sz algorithm.

以下では $L_2^* = \Sigma_{31} (L_{\infty\infty}^t)^{-1}$ と置き、 L_1^* を行列方程式 $L_1^* = (\Sigma_{21} - L_2^* (L_1^*)^t) (L_{\infty\infty}^t)^{-1}$ の解とする。ここで $L_{\infty\infty} = \text{Ch}(V_\infty)$ である。

fixed-point iteration による式 (5.1) の解法は

$$V_0^* = \Sigma_{11}, \quad V_k^* = \Sigma_{11} + \Sigma_{21} (V_{k-1}^*)^{-1} \Sigma_{21}^t \quad (k \geq 2)$$

となる。しかしこの方法よりは

$$V_0^* = \Sigma_{11}, \quad A_{k-1} = \text{Ch}(V_{k-1}^*), \quad B_k = \Sigma_{21} A_{k-1}^{-1}, \quad V_k^* = \Sigma_{11} + B_k B_k^t \quad (k = 1, 2, \dots)$$

とした方が良い場合が多いようである。

一方, Meini's algorithm (Fital-Akelbek, 2009, pp. 64–83) による式 (5.1) の解法はつぎのようになる:

$$\begin{aligned} V_0^* &= Q_0 = \Sigma_{11}, A_0 = \Sigma_{21}, \\ V_{n+1}^* &= X_n - A_n Q_n^{-1} A_n^t, \\ Q_{n+1} &= Q_n - A_n Q_n^{-1} A_n^t - A_n^t Q_n^{-1} A_n, \\ A_{n+1} &= A_n Q_n^{-1} A_n \quad (n = 0, 1, \dots). \end{aligned}$$

次に、 V_k の代わりに最初から極限条件付き分散 V_∞ を用いて確率場を生成した場合、共分散構造が保たれているかどうかを理論的に検討する。

$s=1$ の場合 $V_1 = \Sigma_{11}, L_{11} = \text{Ch}(V_1)$ であり、 $k \geq 2$ では

$$\begin{aligned} V_{ki}^* &= O \quad (1 \leq i \leq k-2), \\ L_{k,k-1}^* &= \Sigma_{21} (L_{\infty\infty}^t)^{-1}, \quad V_k^* = V_\infty, \quad L_{kk}^* = L_{\infty\infty} \end{aligned}$$

となり、従って

$$L_k^* = \begin{bmatrix} L_{11} & O & \cdots & O \\ \Sigma_{21} (L_{\infty\infty}^t)^{-1} & L_{\infty\infty} & \cdots & O \\ O & \Sigma_{21} (L_{\infty\infty}^t)^{-1} & \cdots & O \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ O & O & \cdots & L_{\infty\infty} \end{bmatrix}$$

となる. これより, 極限条件付き分散を用いた場合の領域全体の共分散 $\Sigma_k^* = L_k^*(L_k^*)^t$ は

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{11} & L_{11}L_{\infty}^{-1}\Sigma_{21}^t & \cdots & O & O \\ \Sigma_{21}(L_{\infty}^t)^{-1}L_{11}^t & \Sigma_{11} & \cdots & O & O \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ O & O & \cdots & \Sigma_{21}V_{\infty}^{-1}\Sigma_{21}^t + V_{\infty} & \Sigma_{21}^t \\ O & O & \cdots & \Sigma_{21} & \Sigma_{21}V_{\infty}^{-1}\Sigma_{21}^t + V_{\infty} \end{bmatrix}$$

となる. この式に (5.1) を代入して

$$\Sigma_k^* = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & L_{11}L_{\infty}^{-1}\Sigma_{21}^t & O & \cdots & O & O \\ \Sigma_{21}(L_{\infty}^t)^{-1}L_{11}^t & \Sigma_{11} & \Sigma_{21}^t & \cdots & O & O \\ O & \Sigma_{21} & \Sigma_{11} & \cdots & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ O & O & O & \cdots & \Sigma_{11} & \Sigma_{21}^t \\ O & O & O & \cdots & \Sigma_{21} & \Sigma_{11} \end{bmatrix}$$

となる. これより, 第 (1,2), (2,1) 成分において期待される共分散構造と一致しないことがわかる. しかし 3 段階目以降 (3 領域目以降) は正確に共分散構造を再現している. つまり X_1, X_2, \dots の代わりに X_3, X_4, \dots を用いれば良い.

$s=2$ の場合 L_1^* の存在が必要になるが, 今回は一般的な存在を証明することができなかった (個別の場合に存在を証明する方法は補題 11 を参照). もしこの存在を仮定すれば

$$\begin{aligned} V_1 &= \Sigma_{11}, L_{11} = \text{Ch}(V_1), \\ L_{ki}^* &= O \quad (1 \leq i \leq k-3), \\ L_{k,k-1}^* &= \lim_{k \rightarrow \infty} L_{k,k-1} = L_1^*, \\ L_{k,k-2}^* &= \Sigma_{31}(L_{\infty}^t)^{-1} = L_2^*, \\ L_{kk}^* &= L_{\infty\infty}. \end{aligned}$$

これより領域全体の共分散は

$$\begin{aligned} (\Sigma_k^*)_{11} &= L_{11}L_{11}^t = V_1 = \Sigma_{11}, \\ (\Sigma_k^*)_{21} &= L_{21}L_{11}^t = \Sigma_{21}, \quad (\Sigma_k^*)_{22} = L_{21}L_{21}^t + V_2, \\ (\Sigma_k^*)_{31} &= L_2^*L_{11}^t, \quad (\Sigma_k^*)_{32} = L_2^*L_{21}^t + L_1^*L_{22}^t, \\ (\Sigma_k^*)_{42} &= L_2^*L_{11}^t, \\ (\Sigma_k^*)_{ii} &= L_2^*(L_2^*)^t + L_1^*(L_1^*)^t + V_{\infty} = \Sigma_{11} \quad (i \geq 3), \\ (\Sigma_k^*)_{i,i-1} &= L_2^*(L_1^*)^t + L_1^*L_{\infty}^t = \Sigma_{31}V_{\infty}^{-1}(\Sigma_{21} - L_2^*(L_1^*)^t)^t + \Sigma_{21} - L_2^*(L_1^*)^t = \Sigma_{21} \quad (i \geq 4), \\ (\Sigma_k^*)_{i,i-2} &= \Sigma_{31}(L_{\infty}^t)^{-1}L_{\infty}^t = \Sigma_{31} \quad (i \geq 5) \end{aligned}$$

となることが分かる. 結局 $s=2$ の場合, 5 領域目以降は期待する共分散構造に従っていることが分かる. つまり X_1, X_2, \dots の代わりに X_5, X_6, \dots を用いれば良い.

補題 11. もし $\|\Sigma_{31}\| \|(L_{\infty}^t)^{-1}\|^2 < 1$ であれば L_1^* が存在する.

証明. 証明は, 距離空間 T における写像 $\Phi: T \rightarrow T$ が縮小写像

$$\text{ある定数 } q < 1 \text{ があり } |\Phi(x) - \Phi(y)| \leq q|x - y| \quad \forall x, y \in T$$

であれば、(1) $\Phi(x_\infty) = x_\infty$ となる不動点 x_∞ が一意に存在、(2) 任意の点 x_0 に対し $x_n = \Phi(x_{n-1})$ によって定義される点列 $\{x_n\}$ は x_∞ に収束する、という良く知られた結果に基づく。行列値関数 $F(A) = (\Sigma_{21} - L_2^* A^t)(L_{\infty\infty}^t)^{-1}$ を定義すると

$$\begin{aligned} \|F(A) - F(B)\| &= \|L_2^*(A^t - B^t)(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\| \\ &\leq \|L_2^*\| \|A - B\| \|(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\| = M\|A - B\|, \end{aligned}$$

ここで

$$M = \|L_2^*\| \|(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\| = \|\Sigma_{31}(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\| \|(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\| \leq \|\Sigma_{31}\| \|(L_{\infty\infty}^t)^{-1}\|^2$$

であるから補題が成立する。□

6. 数値実験例

今回行ったシミュレーション(表 1, 図 2)は、いずれも球型共分散関数を用いた以下の 4 パターンである:

各パラメータの意味は以下の通りである:

- dx : 隣接点間の水平・垂直距離,
- a, b : 共分散関数のレンジとシル,
- c, r : 各部分領域内の横・縦方向のシミュレーション位置の個数,
- n : 部分領域数.

例 1, 2 では a の定義より $s=1$ となる(図 3 参照). V_∞ は、行列方程式を既述の繰り返し解法で $\|V_{n+1} - V_n\| \leq 10^{-9}$ となるまで繰り返し求めた. 例 3, 4 は、共分散関数のレンジがひとつの部分領域の横幅の 2 倍になるため $s=2$ となる. 例 3, 4 では、いずれも $\Sigma_{31} = 0$ であり、補題 11 から L_1^* は存在する. 例えば、例 2 では一つの部分領域中の位置の数は 4,800 であり、条件付き共分散行列のサイズは $4,800 \times 4,800$ となる. 一方で全領域に対する位置の数は 38,400 で、共分散行列のサイズは $38,400 \times 38,400$ であることに注意する.

次に極限条件付き分散を用いた正当性を確認するため、極限条件付き分散を用いて、各例において発生させたシミュレーション値のヒストグラムと、期待される正規確率密度関数のグラフを重ねたものが、図 4 である.

更に

方法 1. 極限条件付き分散を一切用いない、本来の逐次シミュレーション法,

方法 2. 行列方程式を解いて極限条件付き分散を予め求め、それを最初から使う、

方法 3. 本来の逐次シミュレーション法で条件付き分散が収束したら、以降はそれを使う、

の 3 つの方法での繰り返し回数と計算時間を比較する. 方法 1,2 で、極限条件付き分散が求ま

表 1. シミュレーションのパラメータの組み合わせ.

	dx	a	b	c	r	n
例 1	0.1	3	10	30	30	30
例 2	0.1	8	10	80	60	80
例 3	0.1	6	10	30	30	30
例 4	0.1	12	10	60	60	80

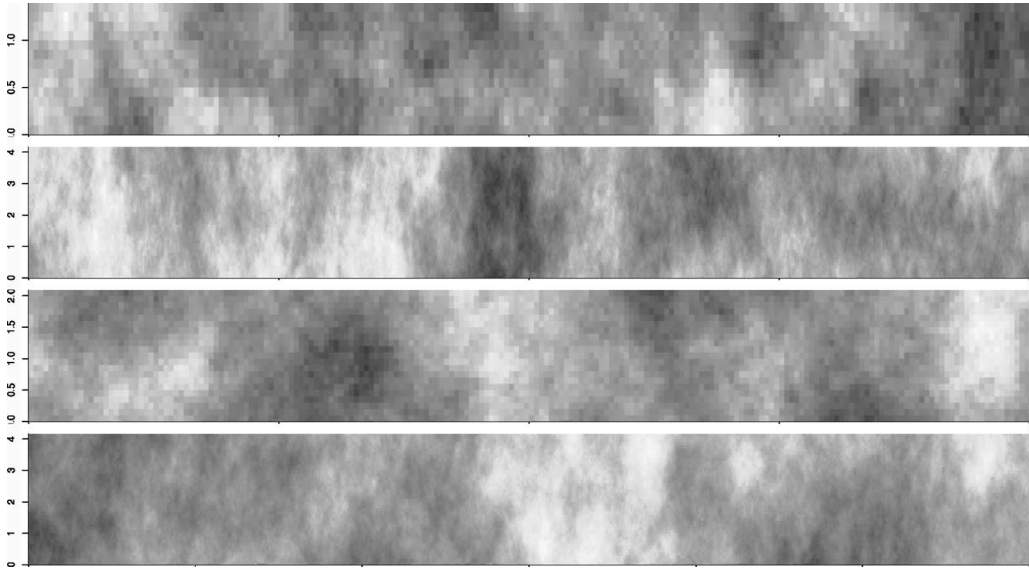


図 2. 極限条件付き分散を用いたシミュレーション図：上から順に，例 1 (21～30 領域)，例 2 (71～80 領域)，例 3 (21～30 領域)，例 4 (71～80 領域)。

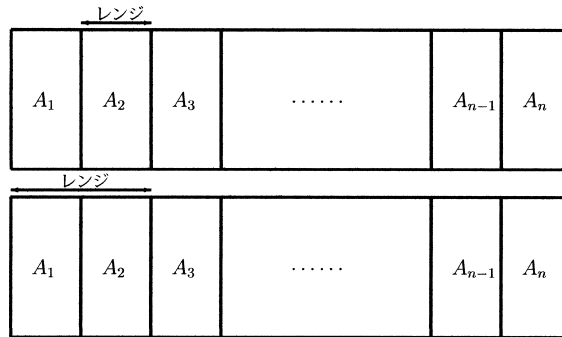


図 3. 例 1, 2 における領域全体のイメージ図(上)，例 3, 4 における領域全体のイメージ図(下)。

るまでの繰り返し回数を比較した結果が表 2 である。また，それぞれの例において領域全体をシミュレーションするのにかかった計算時間を，3つの方法毎に比較した結果が表 3 である。また $c=80$, $r=60$ で，領域数と計算時間の関係をプロットしたものが図 5 である。なお今回の数値実験は以下の環境で行った。

- (1) CPU : Intel Core i7 CPU 860,
- (2) メモリ : 16 GB,
- (3) OS : 32 bit LnuX,
- (4) ソフトウェア : R-12.0

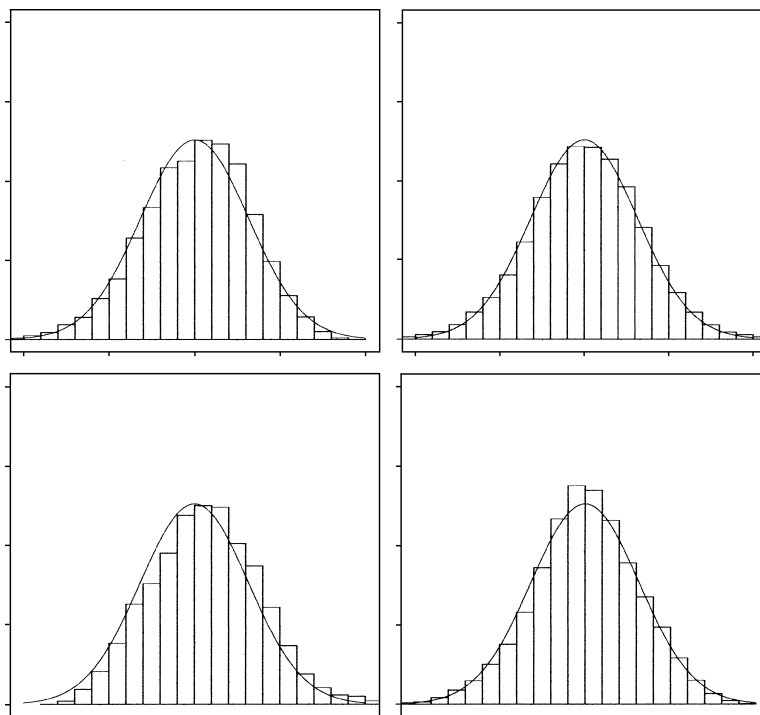


図 4. 各例のシミュレーション値のヒストグラムと平均 0、分散 10 の正規密度関数. 例 1 (上段左), 例 2 (上段右), 例 3 (下段左), 例 4 (下段右).

表 2. 条件付き分散の極限を求めるための計算回数比較.

	計算方法	繰り返し回数		計算方法	繰り返し回数
例 1	方法 1	10 回	例 2	方法 1	13 回
	方法 2	6 回		方法 2	7 回
例 3	方法 1	19 回	例 4	方法 1	20 回
	方法 2	19 回		方法 2	20 回

表 3. 極限条件付き分散の計算方法と計算時間の関係.

	計算方法	計算時間 (秒)		計算方法	計算時間 (秒)
例 1	方法 1	10.5	例 2	方法 1	2,880
	方法 2	1.62		方法 2	819
	方法 3	2.29		方法 3	960
例 3	方法 1	35.2	例 4	方法 1	2,730
	方法 2	19.4		方法 2	810
	方法 3	19.4		方法 3	812

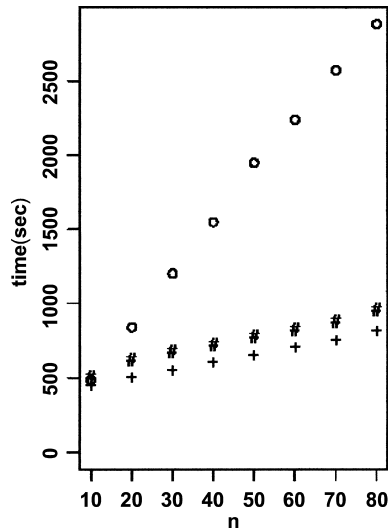


図5. 例2における領域数と計算時間のプロット. 横軸は領域数, 縦軸はシミュレーション計算時間(秒). ○:方法1, +:方法2, #:方法3.

7. 結論

この論文で提案した正規確率場の逐次シミュレーション法は, 原理的には任意の領域, 点配置, そして共分散関数に対して正確なシミュレーション法を与える. しかしながら, 各段階で登場する行列のサイズを小さくするためには, 部分領域とその中の位置集合は適当に小さい必要があり, その分繰り返し回数が多くなる. 特に部分領域やその中の位置点集合が合同でなかったり, 共分散関数が有限なレンジを持たぬ場合, 毎回条件付き平均・分散を更新する必要がある.

点位置集合が格子状の時に限れば, 現在もっとも効率的な方法は離散フーリエ変換とFFT法に基づくアルゴリズムと思われる. しかしこの方法は本質的にトーラス上の確率場に対するアルゴリズムであり, 共分散関数が有限でないときは, それを有限範囲の共分散関数で近似する必要があり, 近似的な手法になる. FFT法によるアルゴリズムの計算量は, 総位置点の数を n とすると $O(n \log n)$ になることが知られている. 一方, 有限範囲の共分散関数に限れば, 今回提案した手法の計算量は図5からも推察されるように $O(n)$ になる. 但し, 実際には毎回かなりの大きさの行列の演算を一定回数必要とするため, この計算量は理論的な興味に留まる.

極限条件付き分散を予め求めておき, それを最初から使う方法は条件付き分散を毎回更新する手間を省き, 最初のステップを除けば正確なシミュレーション結果を与えるという点で, 今回のアルゴリズムの高速化に有効であると思われるが, 対応する行列方程式の解法アルゴリズムは十分な研究が行われていないようで, 今回用いた繰り返しアルゴリズムは, 各部分領域中の点数が大きくなると, 本来の逐次シミュレーションを行い条件付き分散の収束を確認すると, 大差なくなることが分かった.

結論としては, 今回提案したアルゴリズムは, 離散フーリエ変換法が使える状況では太刀打ちできるものではなく, 時間さえかければ実際に実行可能で正確な汎用的逐次シミュレーション法としての理論的興味という側面が強い. しかしながら条件付きシミュレーション法等では, 一度にシミュレーションするには大きすぎる領域上の不規則な配置の点集合上で, 多数回

シミュレーションを行う必要がある。そうした場合に使える正確な手法としては、この論文で提案した逐次アルゴリズムが唯一のものと思われる。ここで、今回提案したアルゴリズムは、各 X_i の成分の幾つかが既知(最初から条件付けられている)の場合でも、適当な変更で有効なことを注意しておく。また、同じ条件で複数回シミュレーションするのであれば、初回で計算した極限条件付き分散や関連した行列を、二回目以降再利用することで高速化が可能になることを最後に注意しておく。

参 考 文 献

- Benner, P. and Faßbender, H. (2007). On the solution of the rational matrix equation, *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*, **2007**, Article ID 21850.
- Chilès, J. P. and Delfiner, P. (1999). *Geostatistics Modeling Spatial Uncertainty*, Wiley & Sons, New York.
- Davis, M. W. (1987). Production of conditional simulations via the LU triangular decomposition of the covariance matrix, *Mathematical Geology*, **19**(2), 91–98.
- Fital-Akelbek, S. (2009). *Selected Nonlinear Matrix Equations*, VDM Verlag Dr. Müller, Leipzig.
- ハーヴェル, D. A. (2007). 『統計のための行列代数上, 下』(伊理正夫 監訳), シュプリンガー・ジャパン, 東京.
- 間瀬茂 (2010). 『地球統計学とクリギング法』, オーム社, 東京.
- Matheron, G. (1973). The intrinsic random functions and their applications, *Journal of Applied Probability*, **5**, 439–468.
- Pardo-Iguzquiza, E. and Chica-Olmo, M. (1993). The Fourier integral method: An efficient spectral method for simulation of random fields, *Mathematical Geology*, **25**(2), 117–217.
- Varga, R. S. (2009). *Matrix Iterative Analysis*, Springer Verlag, Heidelberg.
- Wackernagel, H. (2003). *Multivariate Geostatistics*, 3rd ed., Springer Verlag, Heidelberg.
- Williams, D. (1991). *Probability with Martingales*, Cambridge University Press, Cambridge.

Sequential Simulation of Gaussian Random Fields Based on Block Matrices

Shigeru Mase, Nobuyuki Mochida and Yasuhiro Murayama

Department of Mathematical and Computing Sciences, Tokyo Institute of Technology

As to exact (at least for bounded range covariance function case) simulation methods of Gaussian random fields, the most direct one is based on Choleski decomposition of covariance matrices. But this method becomes intractable as the size of covariance matrix becomes larger. On the other hand, the most frequently used method based on FFT (Fast Fourier Transform) can be used only for simulations on regular grids. In this paper, we derive a general sequential formulas for conditional means and covariances of multivariate Gaussian random vectors and apply them to a sequential (blockwise) simulation method of Gaussian random fields on general type of locations. The computational cost of this method is less than that of FFT method at least theoretically.