５　最適な推定

数値予報モデルで将来の大気の状態を予想するためには、まず現在の大気の状態を知る必要がある。このような場合、現在の大気の状態は格子点データとして与えられることが多い。格子点データは、数値予報モデルの初期値として使われるだけでなく、さまざまな用途で実況の把握のために用いられる。ここでは、過去の初期値から数値予報モデルで予想した現在の時刻の「予想値」に観測値を取りこむことによって予想値の誤差を修正し、最適な推定値を得る方法を考える。

５．１　ベイズの定理と評価関数

たとえば、ある地点で、気温の予想値が２０℃±１℃、観測値が２２℃±１℃とする。「±１℃」と書いたのは予想値や観測値の誤差である。ここで、推定値を２０℃としたら、「推定の誤差の度合い」がどうなるか計算してみよう。推定値と予想値との間の差はゼロである。しかし、推定値と観測値との間の差は２℃＝２σである。つまり、予想値の誤差はゼロ、観測値の誤差は２℃＝２σということになる。これら２つの誤差を合成して、推定の誤差の度合いを計算すると、

$$\sqrt{\left(\frac{20-20}{1}\right)^2+\left(\frac{20-22}{1}\right)^2}=2$$

となる。では、推定値を２１℃としたらどうなるであろうか。推定値と予想値との間の差は１℃＝１σ、推定値と観測値との間の差も１℃＝１σである。これら２つの誤差を合成して、推定の誤差の度合いを計算すると、

$$\sqrt{\left(\frac{21-20}{1}\right)^2+\left(\frac{21-22}{1}\right)^2}=\sqrt{2}$$

となり、推定値を２１℃としたほうが誤差の度合いが小さくなることがわかる。実は、この例では、推定の誤差の度合いが最小になるのは、推定値を２１℃にした場合である。つまり、最適な推定値は２１℃であるといえる。予想値と観測値には同程度の誤差があり、信頼性は同じくらいだから、両者の中間を推定値とするのが妥当である、という直観的な判断と整合的な結論である。

さて、予想値の誤差と観測値の誤差が等しくない場合は、どうなるであろうか。たとえば、予想値が２０℃±１℃、観測値が２２℃±０．５℃とする。ここで、推定値を z ℃としたら、推定の誤差の度合いは、

$$\sqrt{\left(\frac{z-20}{1}\right)^2+\left(\frac{z-22}{0.5}\right)^2}$$

と表せる。以下、計算の便宜のため、式全体を２乗したもの、つまり、平方根の中身を推定の誤差の度合いとして定義しなおすことにする。このとき、推定の誤差の度合い J は、

$$J=\left(\frac{z-20}{1}\right)^2+\left(\frac{z-22}{0.5}\right)^2$$

と書ける。ここで、 J が最小となる z を求めよう。 J を z で微分すると、

$$\frac{dJ}{dz}=2\left\{\left(\frac{1}{1}\right)^2(z-20)+\left(\frac{1}{0.5}\right)^2(z-22)\right\}$$

となる。Jが最小になるとき、Jの微分はゼロになるはずだから、

$$\frac{dJ}{dz}=0$$

とすると、

$$\left(\frac{1}{1}\right)^2(z-20)+\left(\frac{1}{0.5}\right)^2(z-22)=0$$

となって、$z=21.6$℃が得られる。観測値のほうが誤差が小さく信頼性が高いので、観測に近い値を推定値とするという、直観にも矛盾しない結論である。定量的には、予想値の誤差の２乗と観測値の誤差の２乗で、予想値と観測値を内分した値が、最適な推定値であることがわかる。

ここまで、「推定の誤差の度合い」としてきたJは、一般には**評価関数**とよばれる。ひとつの予想値と観測値から、評価関数を最小にする推定値（以下では**解析値**という）を求める方法をまとめてみよう。予想値と観測値をそれぞれ、x、yとする。また、それぞれの誤差をσ_x、σ_yとする。このとき、評価関数Jは、

$$J=\frac{(x-z)^2}{\sigma_x^2}+\frac{(y-z)^2}{\sigma_y^2} \tag{[1]}$$

と書ける。Jをzで微分すると、

$$\frac{dJ}{dz}=2\left\{\frac{x-z}{\sigma_x^2}+\frac{y-z}{\sigma_y^2}\right\} \tag{[2]}$$

となる。Jが最小になるとき、

$$\frac{dJ}{dz}=0$$

が成り立つから、

$$\left(\sigma_x^2\right)^{-1}(x-z)+\left(\sigma_y^2\right)^{-1}(y-z)=0 \tag{[3]}$$

と書ける。[3]を変形すると、

$$\left\{\left(\sigma_x^2\right)^{-1}+\left(\sigma_y^2\right)^{-1}\right\}z=\left\{\left(\sigma_x^2\right)^{-1}+\left(\sigma_y^2\right)^{-1}\right\}x+\left(\sigma_y^2\right)^{-1}(y-x)$$

となって、

$$z=x+\frac{\sigma_x^2}{\sigma_x^2+\sigma_y^2}(y-x) \tag{[4]}$$

が得られる。

評価関数が[1]のように表される理由を考えてみよう。一般に、確率事象P、Qが発生する確率について、

$$E(P\cap Q)=E(P)E(Q|P) \tag{[5]}$$

が成り立つ。ただし、$E(P)$ は P が発生する確率、$E(P\cap Q)$ は P と Q の両方が発生する確率、$E(Q|P)$ は P が発生したという条件のもとで Q が発生する確率である。これを**ベイズの定理**(Bayes' therorem)という。ベイズの定理によると、真の値が a となる確率事象を A 、予想値が x となる確率事象を X、観測値が y となる確率事象を Y とおいたとき、確率事象 X と y が発生した（予想値が x 、観測値が y であった）という条件のもとで、A という確率事象が発生する（真の値が a である）確率は、

$$E(A|X\cap Y)=\frac{E(A\cap X\cap Y)}{E(X\cap Y)}=\frac{E(A)E(X\cap Y|A)}{E(X\cap Y)}$$

が成り立つ。真の値 a に対する予想値の誤差 $x-a$ と観測値の誤差 $y-a$ が独立であるという条件のもとでは、一般に

$$E(X\cap Y)=E(X)E(Y)$$

であるが、条件付き確率の場合も同様に考えて、

$$E(X\cap Y|A)=E(X|A)E(Y|A)$$

が成り立つので、

$$E(A|X\cap Y)=\frac{E(A)E(X|A)E(Y|A)}{E(X\cap Y)} \qquad [6]$$

となる。ここで、真の値 a の頻度分布は一様、つまり $E(A)$ は一定であると仮定する。このとき、予想値が x 、観測値が y という条件のもとで真の値が a である確率 $E(A|X\cap Y)$ は、$E(X|A)E(Y|A)$ に比例する。予想値の誤差 $x-a$ と観測値の誤差 $y-a$ の確率分布がガウス分布に従うとすると、

$$E(X|A)\sim\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(x-a)^2}{\sigma_x^2}\right],\ E(Y|A)\sim\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(y-a)^2}{\sigma_y^2}\right]$$

だから、予想値が x 、観測値が y という条件のもとで真の値 a の確率分布は、

$$E(A|X\cap Y)\sim E(X|A)E(Y|A)\sim\exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\frac{(x-a)^2}{\sigma_x^2}+\frac{(y-a)^2}{\sigma_y^2}\right\}\right] \qquad [7]$$

となる。確率分布[7]が最大値をとるのは、

$$\frac{(x-a)^2}{\sigma_x^2}+\frac{(y-a)^2}{\sigma_y^2}$$

が最小になるときである。したがって、評価関数 J を、

$$J=\frac{(x-z)^2}{\sigma_x^2}+\frac{(y-z)^2}{\sigma_y^2} \qquad [8]$$

のように定義し、J が最小となるような z を推定値とすることが最も妥当な推定であると考えられる。

ここでいう「予想値」とは、より一般的には**第一推定値**とよばれ、観測データを取りこむ前に推定されている値という意味である。このようにして観測データを参照して第一推定値を修正し、新たな解析値を得ることを**データ同化**(data assimilation)という。