

II-162 AIC基準を導入した逆問題推定手法について

京都大学	学生員	寺脇 正文
京都大学	正員	井上 順輝
京都大学	正員	古市 徹

1. はじめに. 不均質帶水層における拡散シミュレーションを精確に行うためには、流れ場を支配する帶水層パラメータである透水量係数(Transmissivity;以下T)の空間的分布の推定が不可欠である。すでに筆者らはTを水位の観測データから推定する手法として、いわゆる逆問題として定式化することの必要性およびその有効性について研究してきた。⁽¹⁾ 実際的見地に立つと、対象領域をいくつの区画に分割してTを推定するかという問題は、観測の労力やコストおよびT場の空間構造を知る上で重要である。そこで、本報では、ただ単にTを推定するだけでなく、同時に最適な最小次数のT場の分割数を決定できるように従来の手法を発展させた手法を考えた。これは赤池により導入されたAIC基準を援用するものであり、仮想的な数値計算例によって本手法の有効性が示せたので報告する。

2. 解析手法について. AIC基準とは、Kullbackの情報量比尤度比検定の漸近理論に基づいた統計量であり、(1)式で定義される。

AICはモデルの適切さを評価するための基準であり、AICの小さい方がモデルは適切であると判断される。すなまち、(1)式の右辺第一項の尤度が大きく、第二項のパラメータ次元数の小さいものが良いモデルである。AIC最小によって得られたモデルをMAICE(Minimum AIC Estimate)と呼ぶ。MAICEの考え方はエントロピー最大原理に基づくものであり、統計的検定における通常の経験的判断の本質的なものとよく一致する。AICを用いることにより、尤度比検定における主観的判断から解放され、モデルの適切さを客観的に判断することができる。解析の対象とした仮想帶水層は縦12m×横6m×深さ4mの被覆帶水層で、湧き出し・吸い込み・涵養はない

ものとし、水平二次元定常流れを考えた。地下水は上から下へ流速50cm/dayで流れているものとする。この帶水層の支配方程式は(2)式で表わされる。(2)式はFEMによって離散化する。(3)式で表わされる合成された評価基準Jを最小にするTの最適解を求めるためにFletcher-Reevesの共役勾配法を用いる間接法によって、逆問題を解く。この時支配方程式は各繰り返し計算ごとに解かれる。水位の観測データとしては、理論的に(2)式を解いて得られた解に $\sigma_h^2 = 1.0 \times 10^{-8}$ (m)の分散をもつ正規乱数を印加した模擬データが、格子配置の全FEM節点で得られているとした。

Tはその対数Y = log Tによって提示され、一方向(2次元)(1) $AIC = -2 \log(\text{maximum likelihood}) + 2(\text{parameter dimension})$ 向)にのみ変化するとして同定される。設定したモデルの族は6タイプで、Fig-1 のように等面積分割である。

(2) $\frac{\partial}{\partial x}(T \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(T \frac{\partial h}{\partial y}) = 0$

(3) $J = J_H + \lambda J_Y$

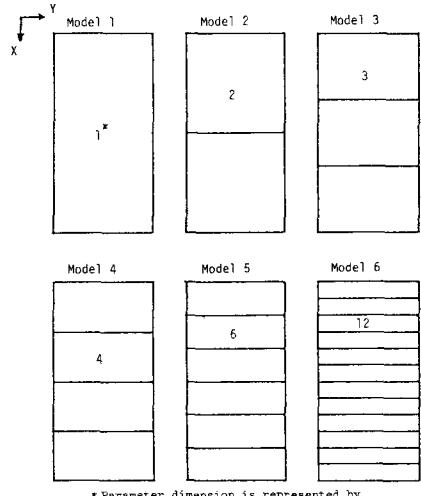
(4) $J_H = (h^* - \hat{h})V_H(h^* - \hat{h})$

(5) $J_Y = (Y^* - \hat{Y})V_Y(Y^* - \hat{Y})$

(6) $\lambda = \sigma_H^2 / \sigma_Y^2$

た。設定した真のT場としては、Fig-2のように二つ

$$(7) AIC = N \log(2\pi J/N) + 2 \times L$$



* Parameter dimension is represented by the number of estimated transmissivities.

Fig 1 Types of Models

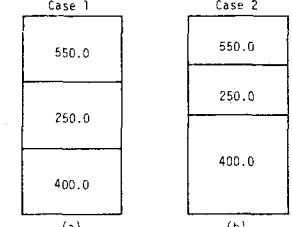


Fig 2 True transmissivity field (m²/day)

NOTATIONS

- T : transmissivity (m²/day)
- h : head (m)
- h* : initial estimate of head (m)
- ĥ : estimated value of head (m)
- Y* : initial estimate of Y
- Ŷ : estimated value of Y
- λ : Lagrange multiplier
- N : number of FEM nodes
- L : number of divided blocks

の場合を考えた。Case 1 は均等三分割, Case 2 は不均等三分割である。本手法のポイントである AIC の考え方を導入するために、水位の推定誤差を正規分布と仮定すれば、最尤推定法により、(3)式の合成した基準 J を近似的に各モデルの最大尤度とする。AIC の計算は(7)式となる。

3. 計算結果 Case 1 の計算結果を Table-1 に示す。また T の推定値を Fig-3 に示す。AIC が最小なのは Model. 3 でこれが最も適切なモデルと判断できる。実際、真の T 場の設定値および分割パターンとよく一致していることがわかる。次に適切と判断されるモデルは、AIC のあまり違わない Model. 5, Model. 6 で、これは領域分割パターンが両モデルとも真の T 場と相似になっているからと考えられる。すなわちこれは Fig-3 の両モデルの T の推定値を検討すれば、Model. 5 で二段ずつ、Model. 6 では四段ずつの上・中・下段の区画ごとに T の推定値がほぼ等しい値となっていることからもわかる。したがってパラメータ次元数が小さい Model. 3 の方がより適切なモデルであるといえる。このことから遂に、もし始めに Model. 3 をモデルの族に設定していなくとも、各モデルの AIC を計算して MAICE を求めた時点で、T の推定値を検討することによりさらに適切なモデルを設定できることを示している。一方、Model. 1, 2, 4 は、AIC から不適切と判断され、T の推定値も真の T 場とは全く異なるものとなっている。

Case 2 の計算結果は Table-2 に示しており、最も適切なモデルは MAICE から、Model. 4 と判断される。このモデルでの T の推定値を Fig-4 に示す。

Fig-4 をみれば、下半分の二段の区画の T の推定値がほぼ同じであるから、これらをひとつ区画とする Fig-5 のような Model. 7 のように分割パターンを決めて同定してみると、AIC がさらに小さくなり、より適切なモデルであることが示される。このようにすると均等分割によって不均等分割パターン不均等な T の空間構造をも同定できることがわかる。

4. 考察 Table 1, 2 で、AIC と J とは大きさの順が一致している。J は Fletcher-Reeves 法を用い繰り返し計算によって逆問題を解く時の最適解を求めるための評価基準であり、(4) 式で表されるモデル適合化基準 J_H と、(5) 式のパラメータの合理性を保ち平滑化の効果を与える J_T とのトレードオフを決定する。

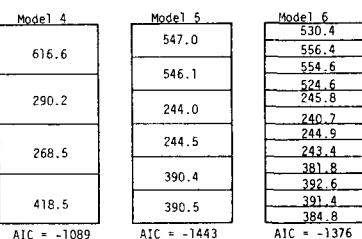
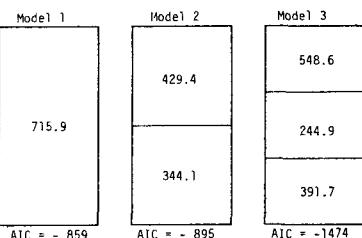
一方、AIC を導入することの意味は、最大尤度すなわち J が同程度としても、できるだけ少ないパラメータで表示されるモデルがよいというケチの原理(principle of parsimony)に従ってモデルの適切さを判断するためであり、AIC は T 場の分割パターン(パラメータ次元)を決定するための評価基準となる。したがって常にそれらの大きさの順が一致するわけではない。本手法による最適なモデル—Case 1 の Model. 3, Case 2 の Model. 7—はそれぞれの場合の T 場の空間構造をよく反映していることがわかる。以上のことから、Fig-6 のアルゴリズムにより T 場の空間構造(分割パターン)を決定できる。最後に今後の課題としては真の T 場の空間構造が X 方向と Y 方向の二次元的に変化する場合へ発展させるつもりである。

Table 1 Results of Case 1

Model	Parameter Dimension(P.D.)	J × 10 ⁵	AIC
Model 1	1	112.7	- 859
Model 2	2	74.14	- 895
Model 3	3	0.1267	- 1474
Model 4	4	8.418	- 1089
Model 5	5	0.1639	- 1443
Model 6	12	0.3025	- 1376

Table 2 Results of Case 2

Model	Parameter Dimension(P.D.)	J × 10 ⁵	AIC
Model 1	1	48.26	- 936
Model 2	2	48.26	- 934
Model 3	3	18.59	- 1019
Model 4	4	0.1372	- 1464
Model 5	6	2.575	- 1193
Model 6	12	0.2992	- 1377
Model 7	3	0.1323	- 1469



AIC = - 1464

Fig 3 Estimated values of transmissivity Case 1 (m²/day)

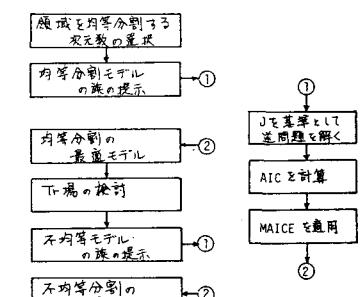
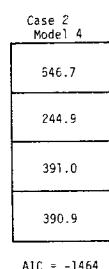
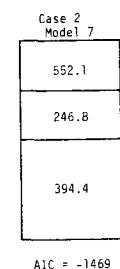


Fig 6 最適モデルを導く手順



AIC = -1464

Fig 4 Estimated transmissivity field (m²/day)



AIC = -1469

Fig 5 Estimated transmissivity field (m²/day)

[参考文献]
(1) 古市・井上・寺脇; 第18回衛生工学研究討論会講演論文集, pp.141-151(1981)
(2) 末地; 情報収集基準 AIC と何か, 数理科学 No.153 pp.5-11(1976)