II－75　　透水量係数場の母数推定におけるベイズ推定の応用

京都大学工学部　正員　米田　稔
京都大学工学部　正員　井上　頼輝
豊田織機　　　　　　　太田　祐史

１．本研究の目的

透水量係数場の空間分布を確率論的手法を用いて推定しようとする場合、その統計的構造を表す平均値や分散、相関係数などの母数を推定することが必要となる。このような場合、最尤推定法などによって推定された母数が真の値であると仮定して、krigingなどが用いられることが多い。しかし本来、統計的構造を表す母数の推定値にも不確定性が存在するため、この不確定性が推定結果に及ぼす影響を評価するためには感度解析などを行なう必要が生じる。一方、Kitanidis[1]によって示されたベイズ推定法では、母数を確率変数と考えて推定を行なうという特徴があり、母数の推定結果は母数の確率密度関数として与えられる。このときこの母数を用いて行なった透水量係数場の推定では、既に母数の不確定性が考慮された推定結果が得られており、感度解析などを行なう必要が無い。またベイズ推定には主観的情報も簡単に推定プロセスに組み込むことができるという特徴もある。本研究は透水量係数場の推定において、母数の推定にベイズ推定を用いる方法を簡単なケースについて示すとともに、母数推定に最尤法を用いた場合とベイズ推定を用いた場合の、透水量係数場などの推定結果の違いを明らかにし、ベイズ推定による母数推定の有効性について検討する。

２．透水量係数場の推定方法

透水量係数場の推定方法としては、kriging[2]や多変量正規分布の条件付き密度関数を求める方法（多変量正規分布法[3]）がある。Kitanidis　はこれらの推定法を全てベイズ推定法の特別な場合として説明している。本研究では多変量正規分布法を用いてトレンドが無い場合の透水量係数場の推定を行なう。透水量係数が対数正規分布することはよく知られているので、透水量係数の対数値Yの値を並べたベクトル$\vec{Y}$は多変量正規分布する。このとき$\vec{Y}$の成分を$\vec{Y_1}$と$\vec{Y_2}$に分け、$\vec{Y_1}$を既知としたときの$\vec{Y_2}$の条件付き分布を求めるのが多変量正規分布法であり、未知の透水量係数ベクトルの期待値のみでなく、その条件付き確率密度関数が推定結果として与えられる。

３．最尤推定とベイズ推定

$\vec{Y}$の確率密度関数はn次のとき、次式で与えられる。

$$f(\vec{Y}|\theta)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\vec{Y}-\vec{\mu_y}\right)^t\Sigma^{-1}\left(\vec{Y}-\vec{\mu_y}\right)\right\} \qquad (1)$$

ここでθは(1)式を決定するパラメータベクトル、$\vec{\mu_y}$は$\vec{Y}$の期待値ベクトル、Σは$\vec{Y}$の共分散行列であり、Yに統計的定常性の仮定をおくと、$\vec{\mu_y}$の要素は全て同じ値μ_yとなる。さらに$\vec{Y}$の相関係数として指数関数型を仮定したときΣの第ij要素は次式で与えられる。

$$S_{ij}=\sigma_y^2\exp\left(-\frac{R_{ij}}{\lambda_y}\right) \qquad (2)$$

ここでσ_yはYの標準偏差、R_{ij}はij地点間の距離、λ_yは積分スケールと呼ばれる相関の強さを示す定数である。今、Yの確率密度関数(1)式はμ_y, σ_y, λ_yの３つのパラメータで完全に決定されるから、これがθの要素となる。

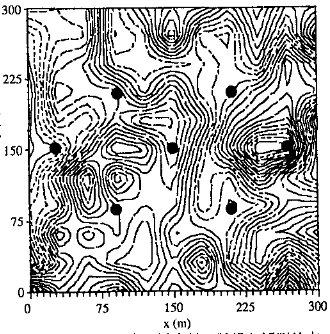

図１　仮定した真の透水量係数場と観測地点

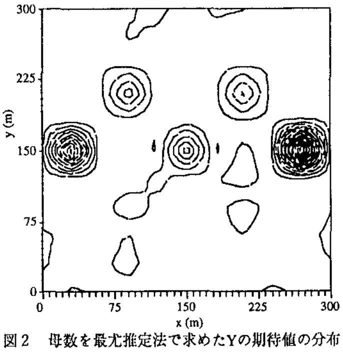

図２　母数を最尤推定法で求めたYの期待値の分布

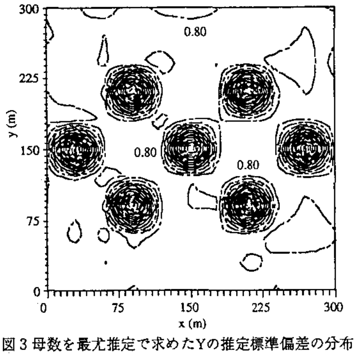

図３母数を最尤推定で求めたYの推定標準偏差の分布

最尤推定法では(1)式の$\bar{Y}$にYの観測データを代入し、(1)式をパラメータベクトルθの関数と考え、この関数（尤度関数）の値を最大にするθの値をパラメータの推定値とする。

ベイズ推定では推定する母数θに関する事前の情報量を反映するθの密度関数$P(\theta)$（事前分布）から、観測データ$\bar{Y}$が与えられた後でのθの条件付き密度関数$P(\theta|\bar{Y})$（事後分布）が次式で求められる。

$$P(\theta|\bar{Y})=\alpha L(\theta|\bar{Y})P(\theta) \qquad (3)$$

ここで$L(\theta|\bar{Y})$は尤度関数、αは右辺の全積分値を1に正規化する定数である。θの事前分布$P(\theta)$の決定方法にはθに関する経験的情報を生かした主観確率を採用する方法や、無情報事前分布としての一様分布を採用する方法がある。θの下でのYに関する統計量（例えばYの条件付き期待値など）を$S_y(\theta)$で表すと、ベイズ推定でのS_yの最終的推定値は、$S_y(\theta)$のθの事後分布に関する期待値として求められる。

4．模擬データへの適用例

任意の統計構造を持つ正規乱数を発生させる方法[4)]で図1に示す模擬Y場を発生した。この模擬Y場を発生するのに用いたパラメータの値は$\mu_y=2, \sigma_y=1, \lambda_y=150$mである。図1中の黒丸で示す7点から観測データが得られたとして、この7つのデータを用いて最尤推定法とベイズ推定法で母数あるいは母数の事後分布を推定し、観測データが与えられた時のYの条件付き期待値と推定標準偏差の分布を求めた結果を、最尤推定法について図2と3、ベイズ推定法について図4と5に示す。最尤推定法で求められたYのパラメータの値は$\mu_y=2.56, \sigma_y=0.687, \lambda_y=3.5$mであり、この$\lambda_y$の推定値はYの観測地点間隔を考慮すると、Yの各観測データは無相関であると推定されたに等しい。ベイズ推定で用いる各パラメータの事前分布としては、μ_y、σ_yの対数値、λ_yの対数値がそれぞれ一様分布するとした。$\mu_y, \sigma_y, \lambda_y$の変動域には十分な幅を考えて、それぞれ[-1,4],[0.01,3],[10,600]とした。図6にμ_yの事前分布と事後周辺分布を示す。ベイズ推定では各パラメータの推定結果がこのような密度関数の形で与えられる。なおベイズ推定で必要となる密度関数に関する積分計算は数値積分によった。

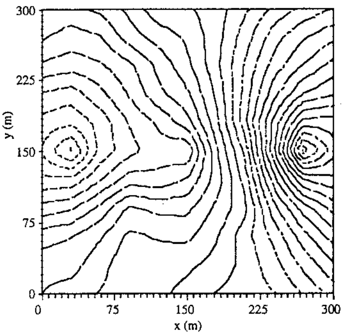

図4　母数をベイズ推定で求めたYの期待値の分布

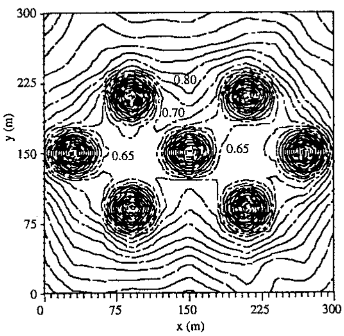

図5 母数をベイズ推定で求めたYの推定標準偏差の分布

図2と図4を比較すると、母数推定に最尤推定法を用いた図2ではλ_yの値が非常に小さく推定されたため、コンターが観測地点近傍にのみ集中した不自然なものになっているが、図4ではコンターが全領域に分布した比較的自然なものとなっている。また図3と図5を比較すると、共に標準偏差が0となる観測地点近傍にコンターが集中しているが、観測地点の間の標準偏差の値はベイズ推定の方が小さくなっている。このことは母数の推定値の持つ不確定性を無視した最尤推定法より、母数の推定値の持つ不確定性を考慮したベイズ推定の方が、推定誤差が小さく推定される場合があることを示しており興味深い。

5．結論

今回、透水量係数対数値Yの模擬データについて母数の推定を最尤推定法とベイズ推定法について行ない、観測データが与えられたときのYの条件付き期待値と推定標準偏差の分布に及ぼす影響を見た。その結果、ベイズ推定を用いた方が今回の例ではYの自然な分布が得られ、また観測地点間の推定標準偏差も小さくなった。実際に存在する母数の推定結果の持つ不確定性を無視する最尤推定法などの方法より、母数の持つ不確定性を考慮するベイズ推定を用いる方が望ましいと考えられる。

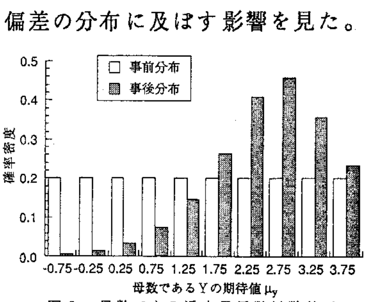

図6　母数である透水量係数対数値Yの期待値μ_yの事前分布と事後分布

参考文献

1) Kitanidis P.K., Water Resour. Resear., 22(4), 499-507, 1986.
2) Delhomme J.P., Advan. Water Res., 1(5),251-266,1978.
3) 米田, 井上, 40回土木学会年講, II, 155-156, 1985.
4) 米田, 古市, 井上, 衛生工学研究論文集,19, 50-59, 1983.