I －429

確率場を規定するパラメータの推定

三井共同建設コンサルタント（株）　　正会員　橋尾　隆徳
鳥取大学工学部　　正会員　野田　　茂

1. まえがき

最近、有限個の観測点におけるサンプル値から、未観測点の物性値などを推定する研究が行われている。その際、その空間分布を表現する確率場の特性、すなわち平均値や共分散をモデル化しなければならない。そこで、本研究では、有限個の観測データを用いて、平均値と共分散を規定するパラメータを合理的に推定することを試みる。ここで使用する手法は、1) シンプレックス法、2) 改訂準ニュートン法と 3) 改訂マルカート法である。条件付シミュレーションを実施した上で、初期値の与え方や最小化法の違いによるパラメータの収束状況がどのようになるのかを分析する。

2. 研究方法

ここで取り扱う確率場 (図－1) は正規確率場と対数正規確率場である。 空間地点 x での平均値は式 (1)、x_i と x_j 地点の共分散は式 (2) のように表せる。

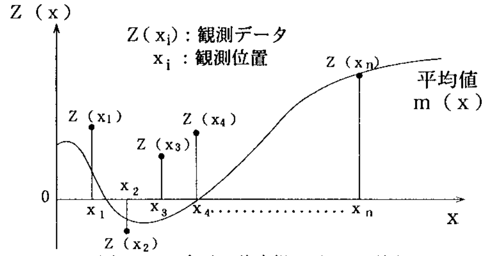

図-１　１次元の確率場のイメージ図

$$平均値 \quad m(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i f_i(x) \qquad \cdots (1)$$

$$共分散 \quad C(x_i, x_j) = b_1 e^{-\frac{\|x_i - x_j\|}{b_2}} \qquad \cdots (2)$$

ただし、$f_i(x)$ は座標関数である。b_1は分散、b_2は相関距離を意味する。

本研究では、式 (1) と式 (2) に現れるパラメータ $[a_i(i = 0 \sim n)$ と $b_j(j = 1, 2)]$ を推定する。このためには、まず、観測データから、次式に示す負の対数尤度関数を最小にするように、共分散を規定するパラメータ b_j を決定しなければならない。

$$(\text{正規確率場}) L(Z|\theta) = \frac{N}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\ln|Q| + \frac{1}{2}(Z-\mu)^T Q^{-1}(Z-\mu) \to Min \qquad \cdots (3)$$

$$(\text{対数正規確率場}) L_e(Z|\theta) = \frac{N}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\ln|Q_e| + \sum_{i=1}^{N}\ln Z(x_i)$$
$$+\frac{1}{2}(Z_e - \mu_e)^T Q_e^{-1}(Z_e - \mu_e) \to Min \qquad \cdots (4)$$

Z : 観測値ベクトル　　θ : パラメータベクトル
$|\;|$: マトリクスのデターミナント　　μ : 平均値ベクトル
Q : 共分散マトリクス
Z_e、μ_e と Q_e : 正規確率場に変換したときの物性値 $[Z_{e_i} = \ln Z(x_i)]$ ベクトル、平均値ベクトルと共分散マトリクス
μ_e と Q_e : 平均値μと共分散マトリクス Q で表せる。

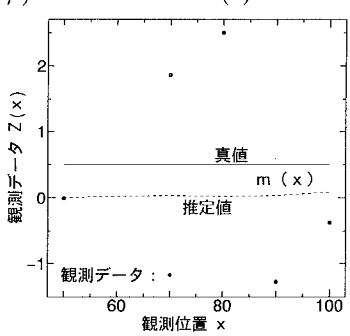

図-2 正規確率場と改訂準ニュートン法による推定値

平均値 $\mu = Xa$ を規定するパラメータ a_iは、観測データ Zと X(座標関数 f_iで表せる) さらには上記の方法で求めた共分散を用いると、重み付き最小２乗解によって、次式のように推定される。

$$S = (Xa - Z)^T Q^{-1}(Xa - Z) \to Min \qquad \cdots (5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 0 \qquad \cdots (6)$$

$$\downarrow$$

$$\hat{a} = (X^T Q^{-1} X)^{-1} X^T Q^{-1} Z \qquad \cdots (7)$$

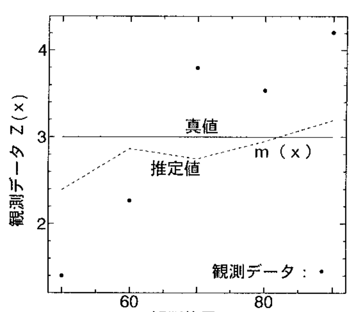

図-3 対数正規確率場と改訂準ニュートン法による推定

ここでは、式 (3) と (4) の解を得るため、３つの方法を採用する。シンプレックス法では、適当なパラメータの値を３点とり、そのうちの最大の評価関数をとる頂点を効率良く折り返して最小点を求める。改訂準ニュートン法では微係数が不要であり、傾斜ベクトルは差分近似によって求められる。ヘシアン行列は、近似行列を設定すると、反復過程で修正される。改訂マルカート法では、微係数が不要であり、ヤコビアン行列を近似式で求める。

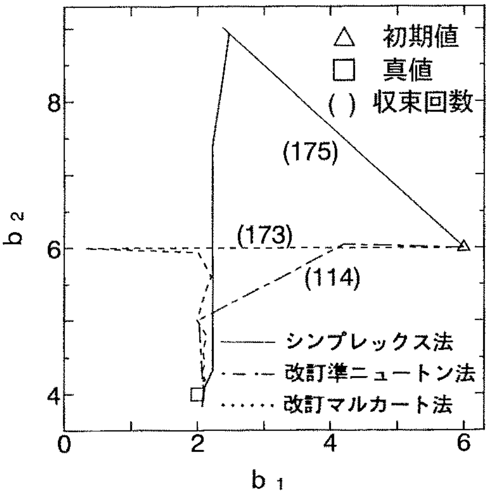

図-4 正規確率場における収束状況

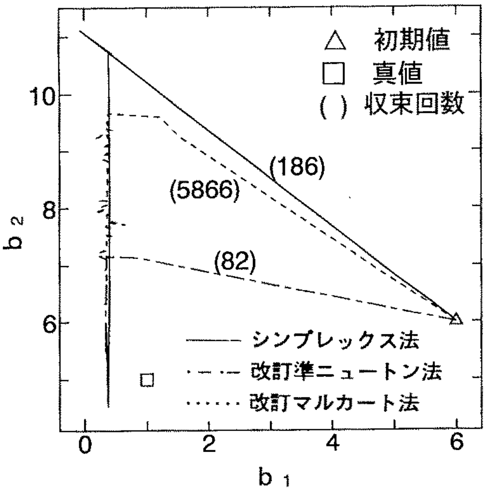

図-5 対数正規確率場における収束状況

3. 数値計算結果および考察

表-1 初期値 (2.0, 2.0) に対する繰り返し回数

	正規確率場	対数正規確率場
シンプレックス法	116	159
改訂準ニュートン法	68	84
改訂マルカート法	229	4665

条件付シミュレーションによって作成したサンプルデータ(図－2と図－3の・印, 5地点) を用いて、平均値と共分散を規定するパラメータの収束状況を確認する。

式(1) の n は4で、座標関数 $f_i(x)$ は $f_m(x_i) = x_i^m (m = 0 \sim 4)$ である。平均値の真値は、正規確率場で0.5、対数正規確率場で3.0である。

図－4と図－5は3つの方法によるパラメータ (b_1とb_2) の収束過程を、図－2と図－3には式(7)によって推定されたパラメータ a から得られた平均値を示す。図－4の初期値 (b_1, b_2) は $(6.0, 6.0)$、真値は $(2.0, 4.0)$ である。図－5の初期値 (b_1, b_2) は $(6.0, 6.0)$、真値は $(1.0, 5.0)$ である。表－1には初期値 $(2.0, 2.0)$ に対応した繰り返し回数を示す。

各図と表からわかるように、3つの方法によって、繰り返し回数や収束状況の違いが見られる。正規確率場の場合、パラメータ b はおおむねよく推定されている。しかし、対数正規確率場の場合、手法により、繰り返し回数にかなりの違いが見られる。特に、改訂マルカート法の収束スピードは極めて遅い。図－5よりわかるように、推定値は真値とややずれている。

これらの数値計算結果により、次のことが明らかになった。

1) 図-2と図-3を見ると、条件付シミュレーションによる観測データは平均値回りに与えられていない。さらに、観測データ数は少なく、5である。これらの理由により、パラメータの中でも a の収束性が悪い。対数正規確率場のサンプルはさらに劣悪のため、正規確率場における推定精度ほど高くない。
2) 収束状況や繰り返し回数を勘案すると、3つの方法のうち、改訂準ニュートン法が最もよいようである。
3) 改訂マルカート法では、初期値の与え方によって、計算の繰り返し回数が極めて多くなることがある。従って、この方法を採用する場合、初期値を別途求めておくなどして、2段階推定法を採用することが望ましい。
4) シンプレックス法によれば、収束完了後も、繰り返し計算を終了しないことがある。これは、共分散を規定するパラメータ (b_1とb_2) が収束しても、計算誤差により、尤度関数の値がほぼ一定にならないためである。このような場合、収束完了条件をあまり厳しくしない方がよいであろう。

4. あとがき

本研究では、オフライン処理である3つの方法を用いて、条件付シミュレーションによって得られた観測データから、確率場の特性値である平均値と共分散を規定するパラメータを推定した。その結果、推定方法による収束状況や初期値の与え方による繰り返し回数の違いが、さらには問題に応じて適切な方法を採用することの重要性が明らかになった。