

ブートストラップ法によるトモグラフィー I (方法) —EIC (Extended Information Criterion)を用いた インバージョンアルゴリズム—

西澤 修* 野呂春文** 増田幸治†

NISHIZAWA Osamu, NORO Harufumi and MASUDA Koji (1994) A new method of tomography by means of bootstrap statistics I (method) — Algorithm based on EIC (Extended Information Criterion) —. *Bull. Geol. Surv. Japan*, vol. 45(1), p. 1-14, 7figs.

Abstract: We have developed a new method applicable to inverse problems appearing in geophysics and geophysical explorations. This method is based on a new information criterion called Extended Information Criterion (EIC) which employs bootstrap statistics in the calculation. EIC measures the goodness-of-fit between two distributions: the true distribution generating the observed data and the predictive distribution obtained from the estimated model. On the basis of the theory of information and statistics, the goodness-of-fit is calculated from the expected log likelihood, which is an essential part of the Kullback-Leibler Information Number, the cross entropy of two distributions. Since it is usually impossible to calculate the expected log likelihood, the information criterion is calculated from the log likelihood, which is obtained from the residuals distribution, by correcting the bias between the log likelihood and the expected log likelihood. In AIC (Akaike's Information Criterion), the bias is estimated from the number of parameter of the reconstructed model, provided that the maximum likelihood estimation is attained, whereas in EIC the bias is estimated from the bootstrap statistics and the value of the information criterion is acquired through the numerical simulation. EIC gives benefits for the case free from the maximum likelihood estimation, or the number of parameter is not so large as to justify the bias correction by the number of model parameters. EIC also gives an alternative to ABIC (Akaike's Bayesian Information Criterion). The reconstruction of the P-wave velocity structure in a weak anisotropy is also described in this report.

要 旨

地球物理や物理探査で現れるトモグラフィーなど逆問題の解法に有効な新手法を開発した。この手法は新しい情報量規準, Extended Information Criterion (EIC), にもとづいており, 統計学におけるブートストラップ法を用いている。EICは情報量統計学から導かれており, モデルのあてはまりの良さ(goodness-of-fit)をデータの真の分布と, 得られたデータから推定されたモデルから

予測されるデータ分布との間の一致の度合いで測っている。あてはまりの良さは平均対数尤度から計算されるが, これはふたつの分布の相対エントロピーを表す Kullback-Leibler 情報量の大きさを決める項である。通常は真の分布がわからないので, 平均対数尤度を実際に求めることはできない。そこで, 推定されたモデルから作られるデータの分布をガウス分布として, 残差の2乗和によって計算される対数尤度をもとに, 対数尤度と平均対数尤度との間の差(バイアス)を補正することによ

* 地殻熱部

** 地質情報センター

† 環境地質部

Keywords: inverse problems, tomography, information criterion, EIC, anisotropy

って情報量規準を計算する。AIC (Akaike's Information Criterion) では、バイアス推定にモデルのパラメータ数を利用するが、このとき各パラメータは最尤推定で得られていなければならない。いっぽう EIC はバイアスがブートストラップ法にもとづき数値シミュレーションで得られるので、最尤推定でパラメータが得られない場合や、データ数がモデルパラメータの数に対して十分大きくないためバイアス補正にモデルパラメータ数が使えないときに有効である。インバージョン問題では、モデルの複雑さを増すことによってモデルからの予測値と観測データとの一致の度合いを高めることと推定モデルの不確かさが増すこととは互いに矛盾した要求となっているが、情報量規準を用いてこれらを合理的に妥協させることができる。EIC では上のふたつの矛盾を妥協させた解が自然に得られる。ここではさらに、弱い異方性の場における P 波速度トモグラフィーのための簡便な手法もあわせて示した。

1. はじめに

地球物理学や物理探査で扱われるインバージョン問題ではモデルを逐次修正して解を求めることが多い。この方法は非線形問題で多く用いられるが、線形問題でも直接法では数値的に安定な解が求めにくい場合にも用いられる。解の判定には残差の 2 乗和が用いられ、これが収束するまでモデルの修正が繰り返される。しかし、モデルの修正回数が増えると求められたモデルパラメータが物理的実態からかけ離れたものとなることがある(例えば Ivansson, 1983)。このため、モデルパラメータにある種の制約を課し、この制約のもとで残差の 2 乗和を小さくする方法、あるいは別のペナルティ項を加えた値を最小化する方法、などが用いられる。

Backus and Gilbert (1970) によれば、残差の 2 乗和を小さくすることとモデルのパラメータの不確かさを小さくすることとは両立しえない。このため両者を適当なところで妥協させる必要がある。Backus and Gilbert (1970) は上記のふたつの項の線形和によって妥協点を求めることを提案しているが、結合係数(トレードオフパラメータ)の決定法に客観性がなく、きわめて経験的である(松浦, 1991)。この問題を解決するための実用的手法として ABIC を適用することが提案されている。ABIC を用いることにより、情報理論から導かれた統計的根拠にもとづいて両者を妥協させる最適トレードオフパラメータを客観的に決めることができる。この手法は、重力データから地形効果の補正を行いながら最適な表層密度とブーゲー異常値の決定(村田, 1990; Murata, 1993; 村田・

野呂, 1993)、地下の比抵抗構造の決定などに成果を上げつつある(内田, 1993)。

いっぽう、Tarantola and Vallette (1982) や Jackson and Mats'ura (1985) はデータとパラメータからなる多変数の確率密度関数を考え先験情報を考慮してベイズの規則を適用し、最大確率を与える解を求める方法を提案している。ABIC では、モデルからの予測値とデータとの一致と、パラメータの確からしさの両方を同時に満足せねばならないという矛盾に対する妥協点を探すためにハイパーパラメータを用いるのに対し、彼らの方法では定式化にこだわらず、データとパラメータの持つ先験的情報をすべて利用すべきであるとする。この手法は実用的であり、実際の用途も広いが、すべての人々が客観的に正しいと認めうる先験的情報が常に得られるわけではない。また、先験的情報に反する結果が得られた場合でもこれを避けるのではなく、その物理的、数学的意味を考え、モデルやアルゴリズムの中に問題点を探すことも必要であろう。そのためには、なるべくデータだけに依拠した解析手法が必要となる。

ここでは、上でのべたような残差 2 乗和とモデルパラメータ間での背反性に対する合理的妥協点の決定と、モデルあるいはアルゴリズムの優劣を把握するのに有効な手法として、ブートストラップ法を用いた評価法についてその原理を述べる。この手法はまた ABIC を用いた手法に対する相補的手段として用いることができる。ブートストラップ法による方法では、ABIC で行われる最適化のための数学的手続きに現れるハイパーパラメータなどを意識することなく、モデルの評価を単純な数値シミュレーションで代行する。さらには ABIC で対象となる評価関数そのものを EIC で比較することも可能である。

EIC では複雑な数学的取扱いを避けることができるが計算量が膨大なものとなる。しかし、近年のコンピュータ技術の進歩によって、実用的手法としての期待が高まってきた。さらに引き続き報告(西澤ほか, 1993)では、この方法の適用例として、Masuda *et al.* (1990) で得られた実験データを再解析し、最適モデルを求めるプロセスの詳細を紹介するとともに、新手法のさまざまな側面をあきらかにする。この手法では最適モデルの客観的探索とパラメータの誤差評価を同時に行うことができる。

2. 逆問題の構造と情報量規準

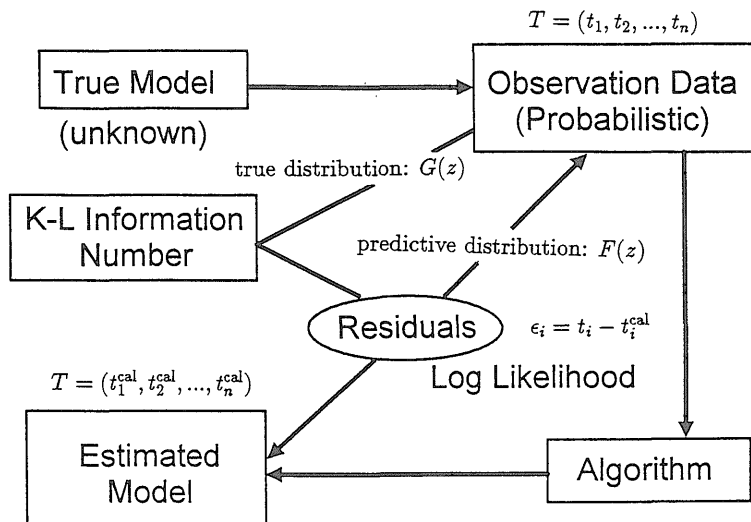
弾性波トモグラフィーなど逆問題の一般的構造

トモグラフィーでは通常物性値の空間分布を求める。

モデルの構造はボックス型のセル内の数値や関数によって表すことができる。数式の場合は有限個の関数の組み合わせによって物性値の空間分布を表現することもできる。モデルパラメタ(セルの物性値や数式中のパラメタ)の数や値の範囲は理論によって制限されている場合もあるが、制限のない場合もある。一般には空間を分割するセルの大きさや個数には制限がなく、また数式で展開した場合の展開項の数や次数にも制限がないことが多い。いっぽう、疑う余地のない物理法則を表す数式など、あらかじめモデルを表す数式が一意的に決められ、この条件でパラメタを推定する場合があるが、このときはモデルから予測されるデータ値が観測データと最もよく一致

するようパラメタを決めればよい。

トモグラフィでは後者の場合はまれで、いくつかの数式あるいは数値の分布で示されたモデルに対してパラメタを推定し、複数のモデルから最適モデルを選ばなければならない。昨今さかんに用いられているAICでは、後に述べるように、数式表現の違ういくつかのモデルで最尤法によるパラメタ推定を行い、次に最尤法で求めた各モデルを相互に比較して、最適モデルの選定が行われる。ただし、問題の本質はパラメタ推定であっても、最尤法の適用が困難な場合にモデルパラメタの逐次修正によって最適な解を探す場合もあるが、このときには一般的に最尤解が得られないのでAICが適用できない。パ



第1図 トモグラフィなど逆問題におけるモデル推定のプロセス。通常われわれが知るこのできない真のモデルによって観測データが生み出されるが、これは確率的なものであり、未知の分布によって支配されている。観測データから適当なアルゴリズムによってモデルを推定する。推定されたモデルから期待される観測値と実際の観測値の差が残差で、この分布は推定モデルによるデータの確率的実現値の予測に使用することができる。したがって、残差は尤度(あるいは対数尤度)の計算に使われるが、予測に使われる分布がガウス分布であれば、残差の2乗和が意味を持つ。Kullback-Leibler 情報量は真の分布と推定モデルから予測された分布の一致の度合いを調べるものである。

Fig. 1 The process for obtaining reconstructed models in tomography and other geophysical inverse problems. The observed data are produced from the true model, which we never know. Employing a certain algorithm, we obtain an estimated model from the observed data. We also obtain residuals between the observed data and the data calculated from the estimated model. The likelihood is obtained from the sum of the squares of the residuals, provided that the error distribution is Gaussian, and has been used to evaluate the goodness-of-fit of the estimated models. The likelihood is merely the probability of the data produced by the estimated model and having no association with the true model, whereas the Kullback-Leibler (K-L) Information Number measures the goodness-of-fit between two distributions: the true (unknown) distribution and the predictive distribution which is expressed by the residuals. Since the true distribution and the residual distribution respectively indicate the probabilities of the data generated from the true model and those by the estimated model, the K-L Information Number measures the goodness-of-fit between those two data distributions.

ラメタの一部がほかのパラメタを決めるためのアルゴリズムとは独立に決められる場合も、最尤法によるパラメタ推定ができないので、AICは使えない。トモグラフィーでの最適モデルの決定は多くの場合このような条件で行われる。

地球物理や物理探査で一般に逆問題と呼ばれているものは第1図のような構成である。まず、データを生み出すモデルがなかに存在するわけであるが、通常我々はこれを知ることができない。ここではこれを真のモデルあるいは未知のモデルと呼ぶ。真(未知)のモデルはパラメタ(一般に複数個)で表現されていると考える。しかし、我々はこのパラメタ値はおろか、パラメタの個数あるいは、パラメタを含む関数の形あるいはパラメタの空間分布の様式などについて何も知らない。我々が得ることのできるのは観測値のみである。観測値は複数の数値からなり、これらの数値の組み合わせが現れるのはまったく確率的な現象であるとみなす。つまり、データ $T=(t_1, t_2, \dots, t_n)$ は n 個の変数から構成された確率変数 $Z=(z_1, z_2, \dots, z_n)$ の実現値である。 z_i が互いに独立であれば、各 z_i の分布を表す確率密度関数 $g_i(\cdot)$ によってデータ T の出現確率を表すことができる。各 t_i がモデルパラメタで規定される値の周辺に確率的に分布すれば、データ $T=(t_1, t_2, \dots, t_n)$ の出現確率はモデルパラメタに依存する関数であると考えることができ、データ t_i の期待値を生じるモデルのパラメタ(表現関数のパラメタ、物性値の空間分布など)と分布を表す関数 $g_i(\cdot)$ のパラメタの双方を含むパラメタの組 $\theta=(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$ を以下ではモデルパラメタと呼ぶ。そこで、 $g_i(\cdot)$ はこれらのパラメタに依存する関数であることを陽に表現して、 $g_i(\cdot|\theta)$ と表す。ここで各変数 z_i の分布密度関数 $g_i(\cdot)$ がすべて同じ関数 $g(z|\theta_0)$ であるとする、データ T の出現確率は $\prod_{i=1}^n g(t_i|\theta_0)$ となる。ここで θ_0 は真(未知)のモデルのパラメタである。注意しなければならないのは、真(未知)のモデルのパラメタから推定されるデータの期待値からのずれ ε_i がガウス分布とはかぎらないことである。データ分布として多くの場合にガウス分布が仮定されるのは、以下に述べるように推定されたモデルパラメタからのデータの出現確率の予測に都合がよいという理由による。データが得られると、ある適当なアルゴリズムによって観測値からモデルを推定するわけであるが、このときモデルから期待される観測値と実際の観測値との差、残差、も同時に得られる。

これまで多くの場合、モデルの評価には残差の2乗和が用いられ、残差の2乗和を最小とするモデルパラメタを計算で求めるか、またはこれが小さくなるように

モデルが逐次修正されてきた。残差の2乗和は、推定されたモデルから期待される観測値と実際の観測値との距離の意味を持ち、これを小さくすることは両者の一致の度合い大きくすることである。もうひとつの意味は、推定されたモデルパラメタから計算される観測値の実現確率に関係している。推定された分布がガウス分布であれば、残差の2乗和はデータの出現確率の計算に使用され、残差の2乗和の小さいものほどデータの出現確率が大きくなる。推定モデルと残差から得られた観測値の実現確率は尤度と呼ばれ、尤度の対数は残差の2乗和で簡単に書き表すことができる。パラメタ推定において対数尤度が最大となるのは残差の2乗和が最小となる場合であり、このときのパラメタが最尤推定値となる。しかし、残差の2乗和の比較だけで最適モデルの選定はできない。たとえば、モデルにより細かい構造を加えたり、数式の項数や次数を増せば残差の2乗和はいくらでも小さくすることができる。つまり、もともと推定されたモデルパラメタに依存する量である残差の2乗和を、パラメタ数が異なるなど表現法の違うモデル間での比較に用いることはできない。

最適モデルを推定するためには、データの真の分布と推定されたモデルから得られるデータ分布とがどれだけ似ているかを見る(坂元・石黒・北川, 1983; 石黒, 1988; 赤池, 1989; 北川, 1993)。この方法では表現法の異なるモデル間で相互の比較が可能である。情報量統計学によれば、この原理のもとづくモデルの規準はKullback-Leibler情報量(K-L情報量)で、相対エントロピーとも呼ばれているものである。この場合、モデルのあてはまりの良さは情報量規準と呼ばれる値によって調べる。情報量規準については次節で詳しく述べるが、その本質は平均対数尤度の推定値のもとづく量である。通常対数尤度が観測データとそれのもとづいた推定モデルのパラメタだけから決められるのに対し、平均対数尤度はデータの真の出現確率を考慮したものとなっており、K-L情報量の大小を比較するための本質的な値である。推定された分布がガウス分布であれば、対数尤度は残差の2乗和のもとづいて計算され、情報量規準は対数尤度に補正をほどこすことによって得られる。

情報量規準によるモデル推定

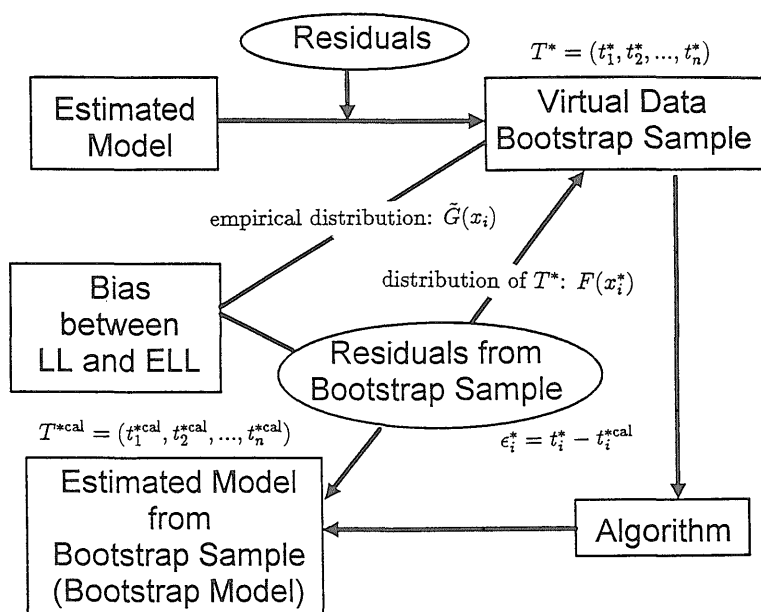
推定されるモデルパラメタの数に比べデータ数が大きい場合は、漸近正規性と呼ばれる統計的性質によって、対数尤度の値と、平均対数尤度にデータ数をかけた値との差(バイアス)を推定することができる。この補正をほどこして平均対数尤度の推定値と同等の値を得て、これを情報量規準とすることができる。AICは、この原理

にもとづく情報量規準のひとつである(坂元・石黒・北川, 1983; 赤池, 1989など)。

AICによる方法では, まず表現形式が同じモデルの中で最尤法によってモデルパラメタを求める。次に表現形式が異なるモデルで得られた各々の最尤モデルについて, パラメタ数によるバイアス補正から情報量規準AICの値をそれぞれについて求め, AICを比較して最適モデルを判定する。データ数がパラメタ数に比べて十分に大きくなければ, AICでは正しい結果が得られない。これはAIC適用の根拠が漸近正規性にあり, データ数の大きい場合しか有効でないためである。このようにAICは, 1.最尤法の適用が可能なこと, 2.データ数

がパラメタ数に比べて十分大きいこと, のふたつが前提となっているので, この条件が満たされない場合には用いることができない。しかし, 最尤法の適用できない場合や, データ数が少なくパラメタによるバイアス補正ができない場合でも, 対象となるいくつかのモデルを比較して最も良いモデルを決定したい場合もある。このとき各モデルに対応したバイアスを推定することができれば, 各モデルに対する情報量規準を求めることができ, よりよいモデルを決めることができる。

最近, 上記のような場合のバイアス推定についての新しい方法が提案された。それは, 統計データから求められた推定値のずれや誤差の評価に利用されているブート

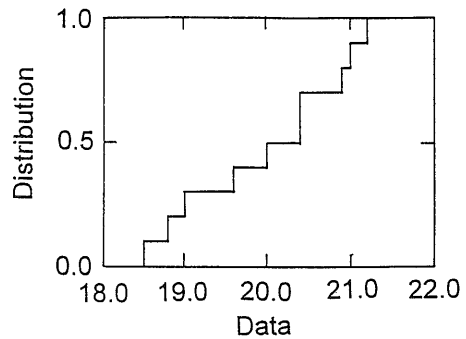


第2図 ブートストラップ法によるバイアス推定. 第1図で示されたモデル推定のプロセスを保存したまま, 真の分布と予測される分布との関係を第3図のように置き換えることにより, 情報量規準を求めるのに必要なバイアスを得る。真の分布の代わりに経験分布を用い, 観測データの代わりにブートストラップサンプルが使われる。第1図の対数尤度に対応するものをブートストラップサンプルから計算される対数尤度で置き換える。真の分布が既知の残差分布(この場合の経験分布)で置き換えられているので, これに対応する平均対数尤度を計算によって求めることができる。このようにして, 両者の差をバイアスの推定値とする。

Fig. 2 The method of estimating the bias between the log likelihood and the expected log likelihood. We use the bootstrap sample as virtual observation data, and then obtain an estimated model and residuals associated with bootstrap sample. We also replace the log likelihood with another log likelihood which is calculated from the residual distribution corresponding to the bootstrap sample: the residuals between the bootstrap sample and the calculated data from the reconstructed model which is estimated from the bootstrap sample (bootstrap model). The process of the model estimation shown in Fig. 1 is unchanged, but the models and the distributions are changed. Thus, we can calculate the value corresponding to the expected log likelihood in the Fig. 1. From the bias between the log likelihood associated with the bootstrap model and the expected log likelihood from the residual distributions, we estimate the bias between the log likelihood and the expected log likelihood.

ストラップ法を情報量規準の推定に応用するものである。ブートストラップ法では第 2 図のようにわれわれの知り得ない真の分布を、推定モデルから得られた分布(経験分布)に置き換え、バイアス推定に用いられる計算プロセスを経験分布にもとづく数値シミュレーションで代行する(Efron, 1983; Wong, 1983; 石黒, 1990; Ishiguro and Sakamoto, 1991)。このとき、第 1 図における実際の観測量に対応するものはブートストラップサンプルとなり、これを仮想的なデータとする。ブートストラップサンプルは具体的には第 3 図に示したように、得られたデータの分布から重複を許してランダムにデータを抽出し、これをもとに新しい仮想データを作成して目標とする統計量を計算するものである。トモグラフィーの場合のブートストラップサンプルの作り方の詳しい説明は次節で行う。この方法は、多数のデータの中から少数のデータを抜き取って得た平均値や分散についての信頼性を調べたいとき、真の分布型を仮定せず、かつ新しいデータを得ることなく、すでに得たデータの分布からランダムサンプリングによってデータを作りだし、平均値や分散など統計的諸量の分散などを求めることができる(小西, 1988; 小西, 1992; Efron, 1983; Diaconis and Efron, 1983; Tauxe *et al.*, 1991)。ブートストラップサンプルをもとに推定されたモデルと残差分布が第 1 図の推定モデルと残差分布に対応する。第 2 図のふたつの残差分布から得られたバイアスの期待値をもとに観測データから得られる対数尤度に補正を行い情報量規準を求める。この方法では、バイアスの推定はモデルや残差についての関係を入れ換えることで計算されている。計算は統計的な値が安定するまで繰り返し行われ、バイアスの値は統計的期待値となる。

ここでは、単純なトモグラフィーのアルゴリズムを例として、上で述べた手法に基づくモデル推定の手法を述べる。弾性波トモグラフィーにおけるモデルの逐次修正法として簡便なものに ART (Algebraic Reconstruction Technique) や SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Technique) があり、これらは各種の問題に柔軟に対応できる利点を持つ(Dines and Lytle, 1979)。ART と SIRT によるトモグラフィーの解法では、1. 解の収束についての判定規準が客観的でない。2. モデルパラメタの不確かさについての判断ができない、などが未解決の問題であった。1. については、非線形問題を線形化して逐次修正で解をもとめる場合にも同じ問題がある。さらにペナルティ項付きの逐次修正法でも、判定の規準となる式のペナルティ項にかかる係数について任意性が残り、係数は経験的に選ばれている。また、2. につ



第 3 図 ブートストラップサンプルの作り方。経験的に得られた分布からランダムにデータを取り出して新しいデータの組を作り、これをもとに各種の統計的数値の推定を行う。

Fig. 3 Generation of bootstrap sample. A new data set is obtained from the empirical distribution. The new data set is called bootstrap sample and this data set is used for estimating statistical parameters.

いては最近 Trampert and Leveque (1990)によってダンピング係数付きの SIRT について解決されたが、一般的で簡便な手法は開発されていない。ブートストラップ法を応用した新しいモデル推定法により、逐次修正によるトモグラフィーのモデル推定を客観的に行うことができるだけでなく、モデルパラメタの不確かさの推定と偽像の判定を客観的に行うことができる。

次節では、まずブートストラップ法を用いたバイアス計算法の原理を述べ、新しい情報量規準 EIC (Extended Information Criterion) を SIRT に適用するための根拠と手法を具体的に述べる。また、単純な異方性速度場での SIRT による弾性波速度再構成のための計算法を導く。

3. 情報量統計学にもとづく EIC の導きかた

平均対数尤度

すでに述べたように、われわれはデータを生み出す真(未知)の分布を推定することによってデータに最もよく合うモデルを推定する。このためには分布関数間でのあてはまりの良さを測る規準が必要であり、これが Kullback-Leibler (K-L) 情報量であり、ふたつの分布が一致する確率の大きさを示すものであった。つまり、推定されたパラメタから予測されるデータ分布が、真(未知)のデータ分布と一致する確率を K-L 情報量を用いて調べ、一致する確率の高いモデルが良いモデルである。

以下では、データは連続な真の分布関数 $G(z|\theta_0)$ から作られるものとし、 $G(z|\theta_0)$ に対応する確率密度関数

を $g(z|\theta_0)$ で表す ($dG(z|\theta_0) = g(z|\theta_0) dz$, $\int g(z|\theta_0) dz = 1$). データ $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ から推定されるパラメタの組を $\hat{\theta} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_m)$ で表す. このパラメタによる予測分布の確率密度関数を $f(z|\hat{\theta})$ ($\int f(z|\hat{\theta}) dz = 1$) とすると, K-L 情報量 $I(g:f)$ は次式で与えられる (坂元・石黒・北川, 1983).

$$I(g:f) = \int \log \left[\frac{g(z|\theta_0)}{f(z|\hat{\theta})} \right] dG(z|\theta_0) \\ = \int \log \left[\frac{g(z|\theta_0)}{f(z|\hat{\theta})} \right] g(z|\theta_0) dz \quad (1)$$

$g(z|\theta_0)$ と $f(z|\hat{\theta})$ が一致すれば, この値はゼロとなる. すなわち, $I(g:f)$ が小さいほどふたつのモデルは互いに近いことを示している.

$$I(g:f) = \int [\log g(z|\theta_0)] g(z|\theta_0) dz \\ - \int [\log f(z|\hat{\theta})] g(z|\theta_0) dz \quad (2)$$

となり, 右辺第1項は真の分布によって決まるので, 予測分布の良さの判定に関係するのは第2項のみで積分の値は平均対数尤度と呼ばれる. 平均対数尤度が大きくなれば, $I(g:f)$ は小さくなり, $f(z|\hat{\theta})$ は真のモデルにより近いことを意味する. したがって,

$$l_E = \int [\log f(z|\hat{\theta})] g(z|\theta_0) dz \quad (3)$$

を計算すればよい. 我々の観測するデータは, 実際には n 個の有限な離散データ $(x_1, x_2, \dots, x_n) = X$ から構成される. この場合平均対数尤度の式(3)に対応するものは,

$$l_E = E_G \{ \log f(x_i|\hat{\theta}) \} \quad (4)$$

となる. ここで, $E_G\{\cdot\}$ は分布関数 $G(z|\theta_0)$ に関する期待値を意味する. $g(z|\theta_0)$ は未知であるから, 実際には式(4)の値を求めることはできない. そこで,

$$l = \sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}) \quad (5)$$

を計算する. 式(5)の値の $1/n$ は, すべての x_i に対する実現確率を $1/n$ としたときの $\log f(x_i|\hat{\theta})$ の期待値とみなすことができる. したがって, 式(5)の $1/n$ は真の分布 $G(z|\theta_0)$ に関する期待値である式(4)とは等しくない. しかし, n の値が大きくなれば, 期待値 l/n は式(4)のよりよい推定値となる.

われわれの目標は次のふたつの式,

$$l_E(\hat{\theta}) = E_G \{ \log f(x_i|\hat{\theta}) \} \quad (6)$$

$$\frac{1}{n} l(\hat{\theta}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}) \quad (7)$$

において, 式(7)から式(6)の値を推定することである. AICは最尤推定によって得たパラメタ $\hat{\theta}$ について l と $n \times l_E$ との差をパラメタ数を用いて求め, 表現法の異なるモデルについて $l_E(\hat{\theta})$ の大小を比較するものである. これが可能なのは, データ数がパラメタ数に対して十分大きい場合であり, $\hat{\theta}$ が最尤推定値 $\hat{\theta}$ でない場合や, データ数が十分でないときは, $l_E(\hat{\theta})$ の値を推定することができない. このような場合に, ブートストラップ法を利用して $l(\hat{\theta})$ と $l_E(\hat{\theta})$ との差を推定する.

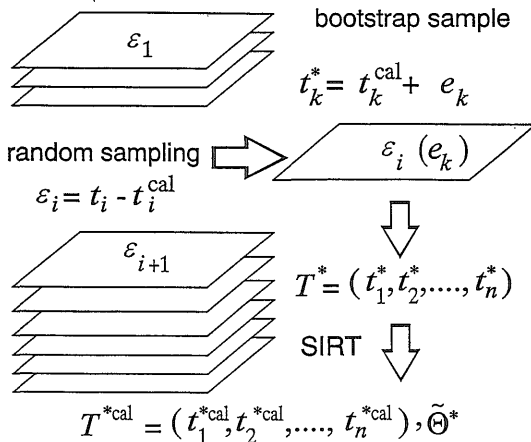
ブートストラップ法

式(7)と(6)との差の期待値 $b(G)$ を求めることができれば, すべてのモデルに対して平均対数尤度の値を推定することができる.

$$b(G) = E_G \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}) - E_G \{ \log f(y_i|\hat{\theta}) \} \right] \quad (8)$$

ここで $E_G \{ \log f(y_i|\hat{\theta}) \}$ は, この期待値が (x_1, x_2, \dots, x_n) とは独立な $G(z|\theta_0)$ からの変数の組 (y_1, y_2, \dots, y_n) に関するものであることを意味する. 真の分布 $G(z|\theta_0)$ から発生したデータはただ一組 X だけであるので, 実際には $b(G)$ を統計的に推定することはできない. そこで次に示すようなブートストラップ法を用い, 式(8)の計算プロセスのシミュレーションを行い, $b(G)$ の推定値を得る.

第4図はブートストラップサンプルの生成法を示す. 観測値を $T = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ とし, この観測値から推定モデルのパラメタを決めることができる. 推定モデルから計算による観測値 $T = (t_1^{\text{cal}}, t_2^{\text{cal}}, \dots, t_n^{\text{cal}})$ が得られ, $t_i - t_i^{\text{cal}} = \varepsilon_i$ からすべての残差 $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ が決まるが, これをもとに推定モデルからのデータ T の出現確率が得られるので, データの経験分布 $\bar{G}(x_i)$ が求められる. ここで, $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ からランダムに残差ひとつを選び e_k とする. 推定モデルから計算される k 番目の観測値に e_k を加え, $t_k^* = t_k^{\text{cal}} + e_k$ として仮想的な観測データを作る. こうして分布 $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ から重複を許して次々に残差を取り出すことにより, ブートストラップサンプル $T^* = (t_1^*, t_2^*, \dots, t_n^*)$ を得ることができる. 仮想データ T^* を生み出すのは経験分布 $\bar{G}(x_i)$ である. ブートストラップサンプルをデータとして, モデルを求めたアルゴリズムに新たに入力することにより, ブートストラップサンプルに対応したモデルパラメタ $\hat{\theta}^*$ が得られる. またブートストラップサンプルから求めたモデルに対応した計算の観測値 $t_i^{\text{cal}*}$ からブートストラップサンプルに対応した残差 $(\varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*, \dots, \varepsilon_n^*)$ を得ることができ, $\hat{\theta}^*$ に対応したデータ x_i^* の予測分布 $f(x_i^*|\hat{\theta}^*)$ を得る.



第 4 図 ブートストラップサンプルの生成. 残差分布から重複を許してランダムに残差をひとつ取りだし, これを実際の観測値に加えてブートストラップサンプルをつくる. ブートストラップサンプル $T^* = (t_1^*, t_2^*, \dots, t_n^*)$ を仮想的なデータとして SIRT によってモデルパラメタ $\tilde{\Theta}^*$ を求め, ブートストラップサンプルに対応する予測データ $T^* = (t_1^{*\text{cal}}, t_2^{*\text{cal}}, \dots, t_n^{*\text{cal}})$ を得る. ブートストラップサンプルとこれにより決められたモデルパラメタ $\tilde{\Theta}^*$ による残差 $e_i^* = t_i^* - t_i^{\text{cal}}$ から経験分布 $\tilde{G}(x_i)$ の予測分布が得られる.

Fig. 4 Generation of bootstrap sample. Employing a random resampling technique, we choose an error e_k from the residual distribution and add e_k to the observed value, t_k . Repeating this process, we produce the bootstrap sample $T^* = (t_1^*, t_2^*, \dots, t_n^*)$ where $t_k^* = t_k^{\text{cal}} + e_k$. Putting the virtual data into SIRT, we obtain the model parameter associated with $\tilde{\Theta}^*$. We also obtain the calculated data value associated with bootstrap sample $T^* = (t_1^{*\text{cal}}, t_2^{*\text{cal}}, \dots, t_n^{*\text{cal}})$. The residuals $e_i^* = t_i^* - t_i^{\text{cal}}$ gives the predictive distribution of the bootstrap model parameter $\tilde{\Theta}^*$.

そして, ブートストラップサンプルに対応した対数尤度

$$l(\tilde{\Theta}^*) = \sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}^*) \quad (9)$$

を得る. いっぽう, 平均対数尤度に対応する $l_b(\tilde{\Theta}^*)$ については独立に生成されるブートストラップサンプル y_i^* が $\tilde{G}(x_i)$ から発生することがすでにわかっており, $\tilde{G}(x_i)$ からの x_i の出現確率が一樣に $1/n$ であるので期待値を計算することができ,

$$E_G\{\log f(y_i^* | \tilde{\Theta}^*)\} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \tilde{\Theta}^*) \quad (10)$$

となる.

式(8)の値を推定するためには次の対応によって分布とパラメタを置き換える.

$$\begin{aligned} G(z) &\longrightarrow \tilde{G}(x_i) \\ \tilde{\Theta} &\longrightarrow \tilde{\Theta}^* \end{aligned} \quad (11)$$

この置き換えによって, 式(8)は次のようになる.

$$\begin{aligned} b(\tilde{G}) = E_G \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}^*) \right. \\ \left. - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \tilde{\Theta}^*) \right] \end{aligned} \quad (12)$$

$b(\tilde{G})$ をバイアス $b(G)$ の推定値とみなせば, 平均対数尤度をこの値にもとづいて推定することができる. AIC でバイアス補正項として用いられるパラメタ数との対応をとるため, 次の値を情報量規準を定義するための補正項とする.

$$C^* = E_G \left[\sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}^*) - \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \tilde{\Theta}^*) \right] \quad (13)$$

AIC の定義

$$\text{AIC} = -2l(\tilde{\Theta}) + 2 \times \text{パラメタ数}$$

と同様に EIC (Extended Information Criterion) と呼ばれる新しい情報量規準を次式で定義する.

$$\text{EIC} = -2l(\tilde{\Theta}) + 2C^* \quad (14)$$

EIC を用いることにより, 情報量統計学にもとづいたモデルの推定が可能となる.

北川(1991)はデータ数が多いとき式(14)から計算される値は誤差が大きくなるとして次に示すような手法による式(8)の補正法を提案した. Θ_0 を真のパラメタとして, 式(8)の[]の中を次のように分解する.

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \tilde{\Theta}) - E_G\{\log f(y_i | \tilde{\Theta})\} \\ = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \tilde{\Theta}) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \Theta_0) \\ + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i | \Theta_0) - E_G\{\log f(y_i | \Theta_0)\} \\ + E_G\{\log f(y_i | \Theta_0)\} - E_G\{\log f(y_i | \tilde{\Theta})\} \end{aligned} \quad (15)$$

(11)の対応と, 次の対応

$$\Theta_0 \longrightarrow \tilde{\Theta} \quad (16)$$

によって分布とパラメタを入れ替え

$$\begin{aligned} b(\tilde{G}) = E_G \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}^*) \right. \\ \left. - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}) \right] \\ + E_G \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log f(x_i^* | \tilde{\Theta}) \right. \\ \left. - E_G\{\log f(y_i^* | \tilde{\Theta})\} \right] \\ + E_G\{E_G\{\log f(y_i^* | \tilde{\Theta})\}\} \end{aligned}$$

$$-E_G\{\log f(y_i^*|\hat{\theta}^*)\} \quad (17)$$

を得る。ここで、 y_i^* は x_i^* とは独立なブートストラップサンプルであることを意味する。ブートストラップサンプルがサンプリングの順序に無関係であれば、2重ブートストラップサンプルの生成 $E_G[E_G\{\cdot\}]$ は一度のブートストラップサンプルの生成で十分であるので式(17)の右辺の2番目の $E_G[\cdot]$ はゼロとなる。しかし、実際にこの項をサンプリングで求めれば、データの個数 n に関係した変動による不確かさが存在する。たとえば、最尤値付近 $\hat{\theta} \approx \hat{\theta}^*$ で第2項を評価すれば、漸近正規性により $\sum_{i=1}^n \log f(x_i^*|\hat{\theta})$ は $E_G\{\log f(x_i^*|\hat{\theta})\}$ の周辺で \sqrt{n} の分散を持ってばらつく(北川ほか, 1993; 坂元・石黒・北川, 1983)ので、右辺2番目の $E_G[\cdot]$ の中の値には $1/\sqrt{n}$ の不確かさが見積られる。したがって、補正值 C^* では \sqrt{n} で変動する不確かさとなる。この変動分が式(13)の C^* に含まれていることになり、変動を抑えるためにはブートストラップサンプルの数を n に比べて十分に大きくとる必要がある。そこでこの項をあらかじめゼロとおいてバイアスの補正を行うのがよい。式(13)(14)に対応するバイアスと情報量規準の式はそれぞれ、

$$C^{**} = E_G \left[\sum_{i=1}^n \log f(x_i^*|\hat{\theta}^*) - \sum_{i=1}^n \log f(x_i^*|\hat{\theta}) \right] + E_G \left[\sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}) - \sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}^*) \right] \quad (18)$$

$$EIC = -2l(\hat{\theta}) + 2C^{**} \quad (19)$$

となる。データ数の多い場合に(19)を使用すれば、少ないブートストラップサンプル数で効果的にEIC値を推定することができる。

以上のような新しい情報量規準EICによって、最尤推定値が得られない場合でも分布のあてはまりの良さを評価することができ、より良いモデルを推定することができる。

弾性波速度トモグラフィにおけるEICの計算式

弾性波速度トモグラフィでは走時を観測し、モデルから計算される走時との間の残差の分布にもとづいて最適モデルを選定する。走時 $(t_1, t_2, \dots, t_n) = T$ から推定されたモデルパラメタ $(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_m) = \hat{\theta}$ にもとづく計算走時、 $(t_1^{\text{cal}}, t_2^{\text{cal}}, \dots, t_n^{\text{cal}}) = T^{\text{cal}}$ が得られる。観測値を予測する分布として走時残差の分散 σ^2 で表現される次の正規分布がデータの実現確率を表す。

$$f(x_i|\hat{\theta}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(t_i - t_i^{\text{cal}})^2}{2\sigma^2} \right] \quad (20)$$

対数尤度は

$$l(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{n}{2} \quad (21)$$

となる。同様にしてバイアス計算に必要な次の値を計算することができる。

$$\sum_{i=1}^n \log f(x_i|\hat{\theta}^*) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma^{*2} - \frac{1}{2\sigma^{*2}} \sum_{i=1}^n (t_k - t_k^{\text{cal}*})^2 \quad (22)$$

$$\sum_{i=1}^n \log f(x_i^*|\hat{\theta}) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (t_k^* - t_k^{\text{cal}})^2 \quad (23)$$

$$\sum_{i=1}^n \log f(x_i^*|\hat{\theta}^*) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log \sigma^{*2} - \frac{n}{2} \quad (24)$$

したがって

$$C^* = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left[-\frac{n}{2} + \frac{1}{2\sigma^{*2}} \sum_{k=1}^n (t_k - t_{k,m}^{\text{cal}*})^2 \right] \quad (25)$$

$$C^{**} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left[-n + \frac{1}{2\sigma^{*2}} \sum_{k=1}^n (t_k - t_{k,m}^{\text{cal}*})^2 + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{k=1}^n (t_{k,m}^* - t_k^{\text{cal}})^2 \right] \quad (26)$$

が得られる。

ここで、 $t_{k,m}^*$, $t_{k,m}^{\text{cal}*}$ での下付き文字 m は対応するブートストラップサンプルの番号を表し、式(25), (26)ではブートストラップサンプル M 個について $[\cdot]$ 内の式で示された値の平均をとることを意味している。われわれは、異方性をもった岩石における弾性波速度トモグラフィを扱うが、この問題では次節に述べるSIRTのアルゴリズムを用いて上式のそれぞれの値を計算することができる。

4. 異方性岩石でのSIRT

水平等方性媒質におけるSIRT

ここで利用する観測値は、差応力によってマイクロクラックが発生してダイラタンシー状態となり、速度異方性が現われた乾燥岩石試料に水を注入した場合の速度変化で、すでにMasuda *et al.* (1990)によって報告済みのものである。今回同じデータを、EICを適用したSIRTによって再解析する。

第5図にMasuda *et al.* (1990)による実験試料と波線

の配置を示す。試料は稲田花崗岩、形状は径50 mm 長さ100 mm の円柱である。互いに向かい合う側面に発振用と受振用の圧電素子が6枚ずつ取り付けられており、各波線でパルス透過法によって弾性波速度が計測される。実験の詳細は次報に述べるが、この岩石は応力によって生じたマイクロクラックに起因する弾性波速度異方性を有している。第6図に示したように、マイクロクラックはそのクラック面が最大主応力方向に平行なものが多数発生する。このクラック配置のため最大主応力方向(図のたて方向)の弾性波速度は最小主応力方向(図の横方向)よりも大きい。本報告で述べる SIRT のアルゴリズムは、こうした異方性を考慮したものである。

以下では速度、スローネスはすべて P 波に関するものである。岩石の受ける応力は最大主応力について対称であるので、弾性波速度の異方性は最大主応力軸を回転軸とした水平等方性とする。最大圧縮軸と k 番目の波線のなす角度を γ_k とすると、座標 (i, j) のピクセルにおけるこの波線のスローネス $S_{ij}(\gamma_k)$ は、最大圧縮軸を回転軸とした回転楕円体で表される。長軸、短軸の長さはそれぞれ、最大、最小主応力方向のスローネスの値に対応する。

$$S_{ij}(\gamma_k) = [S_{ij}^2(0) \cos^2 \gamma_k + S_{ij}^2(\pi/2) \sin^2 \gamma_k]^{1/2} = \frac{\tau_{ij,k}}{l_{ij,k}} \quad (27)$$

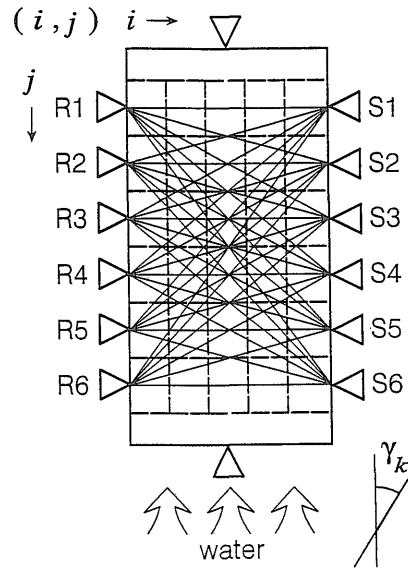
$S_{ij}(0)$, $S_{ij}(\pi/2)$ はそれぞれ、ピクセル (i, j) での最大主応力、最小主応力方向のスローネスである。 $\tau_{ij,k}$, $l_{ij,k}$ はそれぞれ、 k 番目のパスの (i, j) ピクセルにおける走時とパスの長さである。最大主応力方向のスローネス S_{ij} は、これまでの実験結果をもとに適当な値を与え、これを変化させながら最適の値を探すことができる。最小主応力方向のスローネス $S_{ij}(\pi/2)$ は試料に加わる差応力と水の浸透に最も影響される弾性波速度であり、式(27)から、

$$S_{ij,k}^2(\pi/2) = \left(\frac{1}{\sin^2 \gamma_k} \right) \left[\left(\frac{\tau_{ij,k}}{l_{ij,k}} \right)^2 - S_{ij,k}^2(0) \cos^2 \gamma_k \right] \quad (28)$$

となる。ここで $S_{ij,k}(\pi/2)$, $S_{ij,k}(0)$ は k 番目の波線から求められるスローネスという意味で添字、 k を付した。 k 番目の波線の (i, j) ピクセルにおける走時 $\tau_{ij,k}$ を k 番目の波線の走時とパスの長さ、 t_k, L_k から次式で求める。

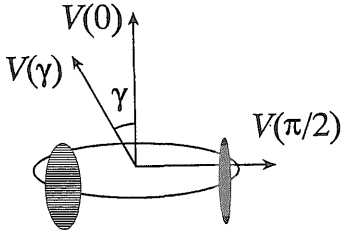
$$\tau_{ij,k} = t_k (l_{ij,k} / L_k) \quad (29)$$

$S_{ij}(0)$ が既知とすると、この値と式(29)から求めた $\tau_{ij,k}$ を(28)に代入して、各波線についての $S_{ij,k}(\pi/2)$ を得、これらを平均して (i, j) ピクセルの最小主応力方向のス



第5図 P波トモグラフィーに用いられた波線。円柱状の花崗岩試料の側面の互いに向かい合った位置6点にP波トランスデューサを等間隔にとりつけてP波速度を測定し、30個のピクセルに対する弾性波速度を求める。岩石は差応力を受けて第5図に示すようなクラックが卓越するため、図のたて方向と横方向とで弾性波速度が異なる(水平等方性)。クラックによって横方向の速度が最小となり、水がクラックを満たせばこの方向の弾性波速度の変化が最も大きくなる。トモグラフィーでは図のたて方向の速度は全ピクセルで一定と仮定してこの速度を独立に変化させ、SIRTによって図の横方向の弾性波速度を求める。

Fig. 5 The ray paths used for P wave velocity tomography. The equally-spaced 6 transducers were mounted on each surface of the diametrical positions of the cylindrical specimen. The 36 ray paths, which were constructed by the arrays, were used for reconstructing velocity structure of 30 pixels. The rock specimen was subjected to the differential stress under confining pressure, and high pressure water was infiltrated from the bottom end. The rock specimen showed a weak anisotropy (transversely isotropy) due to the preferred orientation of cracks shown in Fig. 5. The velocity in the horizontal direction was strongly affected when water was infiltrated into the rock sample due to water saturation in cracks. Assuming that the velocity in the vertical direction (the maximum velocity V_{max}) is constant over all pixels and independent of the horizontal velocities of pixels, we reconstructed the velocity of the horizontal direction in each pixel. The optimum velocity structure is a combination of a set of the horizontal velocities of 30 pixels and an optimum V_{max} .



第6図 差応力を受けた岩石中に存在するクラック。クラック面が最大主応力軸(図のたて方向)に平行なクラックが卓越する。クラック面の法線は横方向の面にランダムに配列する。このため、P波の速度は最大主応力方向で最大となり、最大主応力に直行するすべての方向で最小となる。他の方向の速度は最大主応力方向を主軸とする回転楕円体で与える。

Fig. 6 Stress induced cracks. When the rock is subjected to the differential stress, a preferred orientation of cracks appears. The normal of the crack tends to align in the plane perpendicular to the maximum stress axis. Thus the most of the crack surfaces are parallel to the maximum stress direction. This type of preferred orientation of cracks produces velocity anisotropy of which maximum velocity is in the direction of the maximum stress and the minimum velocity lies in the plane perpendicular to the maximum stress (the transversely isotropy). The velocity in other directions are given by a spheroid of which symmetric axis is parallel to the maximum stress axis.

ローネスを求める。このとき、各波線が持つ $S_{ij,k}(\pi/2)$ についての情報に差があると考え、 $S_{ij,k}(\pi/2)$ に重み w_k をかけて平均 $\bar{S}_{ij}(\pi/2)$ を計算する。

$$\bar{S}_{ij}(\pi/2) = \sum_{(k:ij)} w_k S_{ij,k}(\pi/2) \quad (30)$$

ここで $(k:ij)$ は波線 k がピクセル (i, j) を通過することを示し、和はこの条件のもとで計算する。重み w_k は波線の $\gamma_k = \pi/2$ 方向へ投影した長さの全体に対する割合

$$w_k = \frac{l_{ij,k} \sin \gamma_k}{\sum_{(m:ij)} l_{ij,m} \sin \gamma_m} \quad (31)$$

を用いる。

こうして、ピクセル (i, j) での $S_{ij}(\pi/2)$ が得られる。これを初期モデルとし、以後は以下に示すアルゴリズムにしたがって $S_{ij}(\pi/2)$ の値を補正する。ここで得られた速度構造モデルによるパス k での計算走時 t_k^{cal} は、

$$t_k^{\text{cal}} = \sum_{(k:ij)} \tau_{ij,k} = \sum_{(k:ij)} \tau_{ij,k} = \sum_{(k:ij)} l_{ij,k} S_{ij}(\gamma_k) \quad (32)$$

となる。観測値と計算値の走時残差、

$$\Delta t_k = t_k - t_k^{\text{cal}} \quad (33)$$

を各ピクセルを通過するパスの長さに応じて配分し、 k 番目の波線の (i, j) ピクセルにおける走時残差としてわりあてる。

$$\Delta \tau_{ij,k} = \frac{l_{ij,k}}{L_k} \Delta t_k \quad (34)$$

これをもとに、各ピクセルのスローネスを補正する。(28)より $S_{ij,k}(\pi/2)$ の変化分 $\Delta S_{ij,k}(\pi/2)$ は $\tau_{ij,k}$ の変化分 $\Delta \tau_{ij,k}$ と次の関係にある。

$$\Delta S_{ij,k}(\pi/2) = \left[\frac{1}{S_{ij}(\pi/2) \sin^2 \gamma_k} \right] \left(\frac{\tau_{ij,k}}{l_{ij,k}^2} \right) \Delta \tau_{ij,k} \quad (35)$$

となる。こうして k 番目の波線から計算される補正值 $\Delta S_{ij,k}(\pi/2)$ を得るが、(30)と同様の平均操作を行い、 (i, j) ピクセルについての補正值

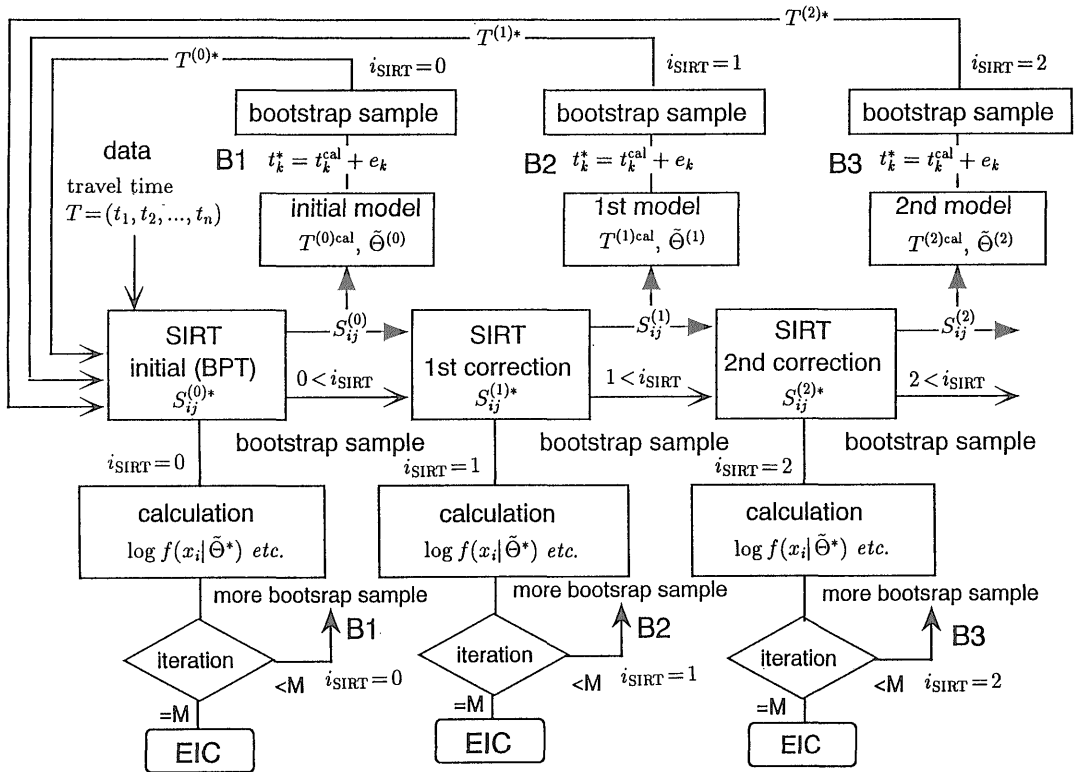
$$\Delta \bar{S}_{ij}(\pi/2) = \sum_{(k:ij)} w_k \Delta S_{ij,k}(\pi/2) \quad (36)$$

が求められる。この補正を繰返し残差の2乗和を小さくする。

5. EIC を SIRT へ適用した場合のアルゴリズム

第7図にブートストラップ法によるSIRTのアルゴリズムを示す。計算アルゴリズムにはふたつの流れがある。ひとつは観測データからモデルを計算し、これに繰返し補正を加える通常のSIRTで、走時データ $T = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ から初期モデルを求め、式(34), (35), (36)によって残差の2乗和を小さくするように各ブロックのスローネスの補正をすることである。もうひとつは、SIRTにおいてBPT (Back Projection Technique) によって求められた初期モデルおよび補正計算の各ステップでブートストラップサンプルを生成し、これを仮想的な観測値として、モデルを求めたと同様のアルゴリズムでブートストラップサンプルに対応したモデルパラメータを決定することである。ブートストラップサンプルの走時データはすべてモデルを求めたと同じSIRTアルゴリズムにかけられ、対応する残差分布が得られる。仮想データつまりブートストラップサンプルは、観測値からモデルを決定したと同様のアルゴリズムの初期値として使われる。ここでは、比較対象となるモデルはSIRTの各ステップで行われた補正によって求められたパラメータ値に対応するので、SIRTの各ステップで推定されたモデルから予測される観測値がブートストラップサンプルの生成に使用される。

各ステップごとにもとのデータとブートストラップサンプルをデータとするふたつのSIRTが行われ、ブートストラップサンプルをデータとするSIRTはEIC値



第 7 図 SIRT の各修正ステップで得られたモデルに対応する EIC の計算のためフローチャート。

SIRT の各ステップで求められたモデルについてブートストラップサンプルを作成し、これを仮想データとして、同じ回数モデル修正を行ってブートストラップサンプルに対応したモデルと残差を求める。これらの値をもとにバイアス補正値を計算する。ブートストラップサンプルによる計算は M 回繰り返されてバイアス補正の期待値が得られ、SIRT におけるパラメタ補正の各ステップに対応する EIC 値が得られる。

Fig. 7 The flow chart for calculating the EIC value which corresponds to each iteration of the SIRT. On the basis of the estimated model and the residual distribution, the bootstrap sample is generated in each iteration of the SIRT. The bootstrap sample is used as virtual data, and a new model is calculated by the SIRT through modifications of the model up to the same iteration number. The model parameter and the residual distribution, both associated with the bootstrap sample, are obtained and the bias is calculated from these values. This process is repeated up to M times (the number of bootstrap sample), and then EIC value is calculated by the log likelihood and the expected value of the bias.

の統計的ばらつきが十分小さくなるのに必要な数だけ繰り返す。したがって SIRT の修正回数が大きくなれば、計算量も増加する。第 7 図に示されたフローチャートでは、中央に通常の SIRT の流れが示されており、これはもとの観測値をデータとする。上部には SIRT の各修正のステップにおけるブートストラップサンプルの生成が示されている。ブートストラップサンプルは SIRT の初期データとして入力され、必要な回数の修正が行われる。ブートストラップサンプルをもとにして得られた分布関数にもとづいて EIC 値が計算され、その

出力が下側に示されている。十分な数に達するまでブートストラップサンプルが繰り返し生成され、ブートストラップサンプルの数だけパラメタ計算が行われた後、SIRT の各ステップにおける EIC が求められる。ステップごとの EIC の変化を見て、最小の値を与えるモデルを採用する。

以上に述べた手法から求めた EIC 値およびモデルパラメタの詳細については、次報に述べる。

謝辞：本報告作成にあたっては、地殻物理部村上 裕技
官より細部にわたる貴重なコメントをいただいた。

文 献

- 赤池弘次(1989) 知識の科学としての統計学, 科学 vol. 59, p. 446-454.
- Backus, G. & Gilbert, F. (1970) Uniqueness in the inversion of inaccurate gross earth data. *Phil. Trans. Roy. Soc. London.* vol. A266, p. 123-192.
- Diaconis, P. & Efron, B. (1983) Computer-intensive methods in statistics, *Scientific American* vol. 248, p. 96-108.
- Dines, K. and Lytle R. J., (1979) Computerized Geophysical Tomography, *Proc. IEEE* vol. 67, p. 1065-1073.
- Efron, F. (1983) Estimating the error rate of a prediction rule: improvement on cross-validation, *J. Am. Stat. Assoc.* vol. 78, p. 316-331.
- Ishiguro, M. & Sakamoto, Y. (1991) WIC: An estimator-free information criterion, *Research Memorandum, the Institute of Statistical Mathematics*, No. 410, p. 1-22.
- 石黒真木夫(1988) 統計的モデル構成と AIC, 時系列論(尾崎 統編), 日本放送出版協会, p. 82-90.
- (1990) 電波望遠鏡データ解析, 統計数理, vol. 38, p. 281-290.
- Ivansson, S., (1983) Remark on an earlier proposed iterative tomographic algorithm, *Geophys. J. R. astr. Soc.*, vol. 75, p. 855-860.
- Jackson, D. & Matsu'ura, M. (1985) A Bayesian approach to nonlinear inversion, *J. Geophys. Res.* vol. 90, p. 581-591.
- 北川源四郎(1991) 対数尤度のブートストラップについて, 統計数理研究所共同研究リポート No. 31, 「時系列に関する推測の理論と応用」, p. 175-179.
- (1993) FORTRAN77時系列解析プログラミング, 岩波コンピュータサイエンス, 岩波書店 pp. 390.
- ・石黒真木夫・坂元慶行(1992) 情報量規準 AIC と EIC 信学技報, vol. 133, p. 49-62
- 小西貞則(1988) ブートストラップ法による推定量の誤差評価, パソコンによるデータ解析, p. 123-142, 朝倉書店
- (1992) ブートストラップ法と予測誤差推定, 東京大学統計学論講資料, 1992年10月20日 pp. 24.
- Masuda, K., Nishizawa, O., Kusunose, K., Satoh, T., Takahashi, M. & Kranz, R., (1990) Positive feedback fracture process induced by nonuniform high-pressure water flow in dilatant granite, *J. Geophys. Res.* vol. 95, p. 21583-21592.
- 松浦充宏(1991) 地球物理学におけるインバージョン理論の発展, 地震 vol. 44, 特集号, p. 53-62.
- 村田泰章(1990) ABIC 最小化法によるプーゲー密度の推定 地震 vol. 43, p. 327-339.
- ・野呂春文(1993) ABIC 最小化推定法による地殻表層密度の計算手法の最適化, 物理探査 vol. 46, p. 120-127.
- Murata, Y. (1993) Estimation of optimum average surficial density from gravity data: An objective approach, *Jour. Geophys. Res.*, vol. 98, p. 12097-12109.
- 西澤 修・野呂春文・増田幸治(1994) ブートストラップ法によるトモグラフィー II, 地調月報, vol. 45, p. 15-38.
- 坂元慶行・石黒真木夫・北川源四郎(1983) 情報量統計学, 共立出版 pp. 236.
- Tarantola, A. & Valette, B. (1982) Generalized nonlinear inverse problems solved using the least squares criterion, *Rev. Geophys. Space Phys.* vol. 20, p. 219-232.
- Tauxe, L., Kylstra, N. & Constable, C., (1991) Bootstrap statistics for paleomagnetic data, *J. Geophys. Res.* vol. 96, p. 11723-11740.
- Trampert, J. and Leveque, J. (1990) Simultaneous iterative reconstruction technique: Physical interpretation based on the generalized least squares solution, *J. Geophys. Res.*, vol. 95, p. 12533-12559.
- 内田 利弘(1993) ABIC 最小化法による最適平滑化拘束の比抵抗法 2 次元インバージョン,

物理探査, vol. 46, p. 105-119.

Assoc. vol. 78, p. 461-463.

Wong, H. W. (1983) A note on the modified likelihood for density estimation, *J. Am. Stat.*

(受付: 1993年6月25日; 受理: 1993年10月20日)