BGWRの研究

大下祐樹*
* 岡山大学大学院 環境学研究科

1 GWRに関して

1.1 GWRモデルとは

$$\boldsymbol{W_i y} = \boldsymbol{W_i X \beta_i} + \boldsymbol{\epsilon} \tag{1}$$

パラメータの詳細は

$$\boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \tag{3}$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} h_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & h_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & h_{nn} \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$h_{ij} : \text{カーネル関数} \tag{6}$$

1.2　GWR モデルのパラメータ推定

$$\boldsymbol{W_i y} = \begin{pmatrix} w_{i1}y_1 \\ w_{i2}y_2 \\ \vdots \\ w_{in}y_n \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{W_i X \beta_i} = \begin{pmatrix} w_{i1}\beta_{0i} & w_{i1}\beta_{1i}x_1 \\ w_{i1}\beta_{0i} & w_{i1}\beta_{1i}x_2 \\ \vdots & \vdots \\ w_{i1}\beta_{0i} & w_{i1}\beta_{1i}x_n \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$\varepsilon_j = w_{ij}\{y_j - (\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)\} \tag{9}$$

$$Q = \varepsilon^2{}_j = w_{ij}^2\{y_j - (\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)\}^2 \tag{10}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial \beta_{0i}} & = -2\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2\{y_j - (\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)\} \\ \frac{\partial Q}{\partial \beta_{0i}} & = -2\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2\{y_j - (\beta_{0i} + \beta_{1i}x_j)\}x_j \end{cases} \tag{11}$$

$$\begin{cases} (\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2)\beta_{0i} + (\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j)\beta_{1i} = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 y_j \\ (\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j)\beta_{0i} + (\sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j^2)\beta_{1i} = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j y_j \end{cases} \tag{12}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 & \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j \\ \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j & \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{0i} \\ \beta_{1i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 y_j \\ \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^2 x_j y_j \end{pmatrix} \tag{13}$$

(13) は以下のように書き表せる。

$$\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W_i^2 X \beta_i} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W_i^2 y} \tag{14}$$

従って GWR の推定パラメータは以下のようになる。

$$\boldsymbol{\beta_i} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W_i^2 X}^{-1})\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W_i^2 y} \tag{15}$$

2 BGWR モデルに関して

外れ値に頑強な推定値を求めるために、GWR に**ベイズ的アプローチ**を行う手法がある。そのモデルを BGWR という。

2.1 BGWR モデルとは

$$\boldsymbol{W_i Y} = \boldsymbol{W_i X \beta_i} + \epsilon_i \tag{16}$$

$$\boldsymbol{\beta_i} = (w_{i1} \otimes I_k \dots w_{in} \otimes I_k) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta_1} \\ \boldsymbol{\beta_2} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\beta_n} \end{pmatrix} + u_i \tag{17}$$

$$\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2 \boldsymbol{V_i}) \tag{18}$$

$$\boldsymbol{V_i} = diag(v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{in}) \tag{19}$$

$$u_i \sim N(0, \sigma^2 \delta^2 (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W_i}^{\boldsymbol{2}} \boldsymbol{X})^{-1}) \tag{20}$$

$$w_{ij} = \frac{\exp(-d_{ij}/\theta)}{\sum_{j=1}^{n} \exp(-d_{ij}/\theta)} \tag{21}$$

$$w_{ii} = 0 \tag{22}$$

式 (17) は平滑化パラメータの記述である。隣接する地区との線形結合である。
式 (22) は、正規化した距離に基づく重みである。V_i はそれぞれ独立に $\gamma^2(r)$ に従うと仮定される。
r はハイパーパラメータである。
u_i は平均 0, 分散 **Zellner's q-prior** の正規分布に従う。
これは分散共分散行列に従う。

2.2 BGWR モデルのパラメータ推定

BGWR のパラメータ推定は、パラメータ $\boldsymbol{\beta}_i, \boldsymbol{V_i}, \sigma^2, \delta^2$ は、それぞれの条件付事前確率分布から **Gibbs Sampling** の手法で推定される。**設定期間**、事前確率分布からの無作為抽出を繰り返しその**標本の平均値**が各推定パラメータとなる。

2.2.1 BGWR をコンパクトに書き直し

$$\tilde{y} = \tilde{X}\beta_i + \epsilon_i \tag{23}$$

$$\beta_i = J_i\gamma + u_i \tag{24}$$

$$\tilde{y} = W_i y \tag{25}$$

$$\tilde{X}_i = W_i X \tag{26}$$

$$J_i = (w_{i1} \otimes I_k \dots w_{in} \otimes I_k) \tag{27}$$

$$\gamma = (\beta_1, \dots, \beta_n)^T \tag{28}$$

上の式は、「Theil-Goldberger(1961)」の推定量問題の型で下のように書き換えられる。

$$\begin{pmatrix} \tilde{y} \\ J_i\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{X}_i \\ -I_k \end{pmatrix} \beta_i + \begin{pmatrix} \varepsilon_i \\ u_i \end{pmatrix} \tag{29}$$

$V_i = I_n$ とおくと

$$\hat{\beta}_i = R(\tilde{X}_i^T \tilde{y}_i + \tilde{X}_i^T \tilde{X}_i J_i \gamma / \delta^2) \tag{30}$$

$$R = (\tilde{X}_i^T \tilde{X}_i + \tilde{X}_i^T \tilde{X}_i / \delta^2)^{-1} \tag{31}$$

$\delta \to \infty$ ならば

$$\hat{\beta}_i = (\tilde{X}_i^T \tilde{X}_i)^{-1} (\tilde{X}_i^T \tilde{y}_i) \tag{32}$$

$\delta \to \infty$ のとき式 (15) と等しい、つまり GWR の推定量となった。

2.2.2 BGWR の事前確率分布

β_i の事前確率分布は

$$p(\beta_i|\ldots) \propto N(\hat{\beta}_i, \sigma_i^2 R) \tag{33}$$

$$\hat{\beta}_i = R(\tilde{X}_i^T V_i^{-1} \tilde{y}_i + \tilde{X}_i^T \tilde{X}_i J_i \gamma/\delta^2) \tag{34}$$

$$R = (\tilde{X}_i^T V_i^{-1} \tilde{X}_i + \tilde{X}_i^T \tilde{X}_i/\delta^2)^{-1} \tag{35}$$

σ_i, V_i, δ の事前確率分布は

$$p(\sigma_i|\ldots) \sim \chi^2(m) \tag{36}$$

$$p([(e_i/{\sigma_i}^2) + r]/V_i|\ldots) \sim \chi^2(r+1) \tag{37}$$

$$p(\delta|\ldots) \sim \chi^2(nk) \tag{38}$$

m は無視できない重みの数である。

$$e_i = y_i - X_i \beta_i \tag{39}$$