空間自己回帰モデルの同定可能性

早稲田大学　力丸佑紀

（株）データサイエンスコンソーシアム　柴田里程

空間自己回帰モデル

- 空間自己回帰モデル *(Spatial Autoregressive Model)*
  - $\{X_{\boldsymbol{v}}, \boldsymbol{v} \in Z^d\}$ に対し,

$$P(T_1, T_2, \dots, T_d)X_{\boldsymbol{v}} = \varepsilon_{\boldsymbol{v}}$$

前進シフト作用素 *(forward shift operator)*

$$T_i X_{\boldsymbol{v}} = X_{v_1, v_2, \dots, v_i+1, \dots, v_d},$$

伝達関数 *(transfer function)*

$$P(T_1, T_2, \dots, T_d) = \sum_{\boldsymbol{k} \in K} \beta_{\boldsymbol{k}} T_1^{k_1} T_2^{k_2} \cdots T_d^{k_d}$$

空間自己回帰モデル

- 同時空間自己回帰モデル *(Simultaneous Spatial Autoregressive Model)*
  - ε_v は互いに直交する.
- 条件付き空間自己回帰モデル *(Conditional Spatial Autoregressive Model)*
  - ε_v は$X_{\boldsymbol{u}}$ $(\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{v})$ と直交する.

- 空間ラグモデル

$$\boldsymbol{x} = \rho W\boldsymbol{x} + Y\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

  - $\boldsymbol{x}$ は$N \times 1$の観測値ベクトル, ρ は空間パラメータ, W は$N \times N$の空間重み行列, Y は$N \times p$ の説明変数行列, $\boldsymbol{\beta}$ は $p \times 1$ の回帰係数ベクトル, $\boldsymbol{\varepsilon}$ は$N \times 1$ の独立同分布な誤差ベクトル.
  - 空間自己回帰モデルと呼ばれることもあるが…

弱定常同時空間自己回帰モデル

- 弱定常性

仮定

複素空間上の $|z_1| = \cdots = |z_d| = 1$ 上で $P(z_1, \ldots, z_d) \neq 0.$

ただし，$z_j = e^{i\omega_j}$, $j = 1, \ldots, d.$

- スペクトル密度関数

$$f(\boldsymbol{\omega}) = \frac{\sigma^2}{|P(z_1, z_2, \ldots, z_d)|^2}$$

ただし，$\sigma^2 = \mathrm{Var}(\varepsilon_v).$

同時空間自己回帰モデルの同定可能性

- ２次モーメントからだけではいつでも同定可能ではない.
  - なぜそのようなことが起きるのか？
  - 同定可能でないことはパラメータ推定にどのような影響を与えるのか？
  - 解決策は？

同定可能性

- 多項式 $P(z_1, z_2, \dots, z_d)$ の素因数分解

$$P(z_1, z_2, \dots, z_d) = \prod_{k=1}^{p} h_k(z_1, z_2, \dots, z_d)$$

- 同時空間自己回帰モデルのスペクトル密度関数

$$f(\omega) = \frac{\sigma^2}{\prod_{k=1}^{p} h_k(z_1, \dots, z_d)\overline{h_k(z_1, \dots, z_d)}}$$

に対し，伝達関数は 2^p 種類とれる.

  - 伝達関数の素因数として，$k = 1, \dots, p$ に対して，$h_k(z_1, \dots, z_d)$ か $\overline{h_k(z_1, \dots, z_d)}$ のどちらかを選択するから.

例（１）

- １次元同時空間自己回帰モデル $X_v + \beta_1 x_{v+1} + \beta_{-1} X_{v-1} = \varepsilon_v$ を考える.
  - 伝達関数 $P(z) = 1 + \beta_1 z + \beta_{-1} z^{-1} = -\frac{1}{\alpha_1+\alpha_2} z^{-1}(z-\alpha_1)(z-\alpha_2)$
    - α_1, α_2 は $P(z) = 0$ の根
  - スペクトル密度関数

$$f(\omega) = \frac{\sigma^2}{|P(z)|^2} = \frac{\sigma_0^2}{(z-\alpha_1)(z-\alpha_2)(\overline{z-\alpha_1})(\overline{z-\alpha_2})}$$

$$= \frac{\sigma_0^2}{(z-\alpha_1)(z-\alpha_2)(z^{-1}-\overline{\alpha_1})(z^{-1}-\overline{\alpha_2})}, z = e^{i\omega}$$

に対して，4種類の伝達関数がとれる．ただし，$\sigma_0^2 = \sigma^2(\alpha_1+\alpha_2)(\overline{\alpha_1} + \overline{\alpha_2})$.

例（2）

$$P_1(z) = -\frac{1}{\alpha_1+\alpha_2} z^{-1}(z-\alpha_1)(z-\alpha_2) = 1 - \frac{1}{\alpha_1+\alpha_2} z - \frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2} z^{-1},$$

$$P_2(z) = -\frac{1}{\bar{\alpha}_1+\bar{\alpha}_2} z(z^{-1}-\bar{\alpha}_1)(z^{-1}-\bar{\alpha}_2) = 1 - \frac{\bar{\alpha}_1\bar{\alpha}_2}{\bar{\alpha}_1+\bar{\alpha}_2} z - \frac{1}{\bar{\alpha}_1+\bar{\alpha}_2} z^{-1},$$

$$P_3(z) = \frac{1}{1+\alpha_1\bar{\alpha}_2}(z-\alpha_1)(z^{-1}-\bar{\alpha}_2) = 1 - \frac{\bar{\alpha}_2}{1+\alpha_1\bar{\alpha}_2} z - \frac{\alpha_1}{1+\alpha_1\bar{\alpha}_2} z^{-1}$$

$$P_4(z) = \frac{1}{1+\bar{\alpha}_1\alpha_2}(z^{-1}-\bar{\alpha}_1)(z-\alpha_2) = 1 - \frac{\bar{\alpha}_1}{1+\bar{\alpha}_1\alpha_2} z - \frac{\alpha_2}{1+\bar{\alpha}_1\alpha_2} z^{-1}.$$

複数の最尤推定値

- $X_v + \beta_1 X_{v+1} + \beta_{-1} X_{v-1} = \varepsilon_v$ に対して，伝達関数を $P_1(z)$ と想定し，
  $\beta_1 = 0.1, \beta_{-1} = 0.77775, \sigma = 0.01$ で $N = 1000$ の乱数を生成．
- $\alpha_1 = -0.85, \alpha_2 = -9.15, \sigma_0 = 0.1$
- 正規分布の仮定のもとでの近似対数尤度 L_A (Rikimaru and Shibata,2016) を用いて最尤推定を行った．

	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_{-1}$	$\hat{\sigma}$	$\max L_A$
Estimate1	0.10146	0.77066	0.00973	3124.091
Estimate2	0.77066	0.10146	0.00973	3124.091
Estimate3	1.04858	0.09804	0.01116	3124.091
Estimate4	0.09804	1.04858	0.01116	3124.091

- 適当な推定値をどう選択するか？
  - データの背景などから初期値やパラメータの取り得る範囲がわかっていれば，選択できる．

フィッシャー情報量の非正則性

定理 (Rikimaru and Shibata, 2017)

伝達関数のいくつかが重複するとき，フィッシャー情報量行列 $I(\boldsymbol{\theta})$ は非正則になる．

$$I_{pq}(\theta) = \frac{1}{8\pi^2} \iint \partial_{\theta_p} \log f(\omega)\, \partial_{\theta_q} \log f(\omega)\, \mathrm{d}\omega$$

- $I(\boldsymbol{\theta})$ が非正則になると⋯
  - 推定量の漸近有効性が成立しない．
  - 尤度方程式が減るので，全てのパラメータを推定できない．

フィッシャー情報量の正則性の条件

定理 (Rikimaru and Shibata, 2017)　　　（2015年本学会で発表）

$I(\boldsymbol{\theta})$が正則であることは，次のような行列 Bがフルランクであることと同値である.

行列 B の定義

$$B = (\boldsymbol{\beta}_{\ell_1}\ \ \boldsymbol{\beta}_{\ell_2}\ \ \cdots\ \ \boldsymbol{\beta}_{\ell_L})$$

ただし，$$\beta_{\ell_j} = \begin{pmatrix} \beta_{k_1+\ell_j} + \beta_{k_1-\ell_j} \\ \beta_{k_2+\ell_j} + \beta_{k_2-\ell_j} \\ \vdots \\ \beta_{k_m+\ell_j} + \beta_{k_m-\ell_j} \end{pmatrix}, \quad j = 1, \ldots, L.$$

$\boldsymbol{k}_j, j = 1, \ldots, m$ は $\boldsymbol{k} \in K$ を辞書式に並べたもの.

$\ell_j, j = 1, \ldots L$ は $\ell \in L \cup \{\mathbf{0}\}$ を辞書式に並べたもの．ただし，$L = \{\ell > \mathbf{0} \mid \boldsymbol{k} - \ell$ or $\boldsymbol{k} + \ell \in K$ for a $\boldsymbol{k} \in K\}$.

* $(u_1, u_2) > (v_1, v_2)$： $u_1 > v_1$ または，$u_1 = v_1$ かつ $u_2 > v_2$

特別な同時空間自己回帰モデルの同定可能性

- 一方向同時空間自己回帰モデル *(Unilateral SAR model)*

$$\sum_{\boldsymbol{k}\in K_q\cup\{\boldsymbol{0}\}} \beta_{\boldsymbol{k}} X_{\boldsymbol{v}+\boldsymbol{k}} = \varepsilon_{\boldsymbol{v}}$$

  - $K_q = \{\boldsymbol{k}; \boldsymbol{k} > \boldsymbol{0}\}$
  - $\boldsymbol{u} > \boldsymbol{v}$： すべての $i = 1, \dots, d$ について $u_i \geq v_i$ （ただし $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$ は除く）
- 対称同時空間自己回帰モデル *(Symmetric SAR model)*

$$P(T_1, T_2, \dots, T_d) = P(T_1^{-1}, T_2^{-1}, \dots, T_d^{-1})$$

定理 (Rikimaru and Shibata,2017)

一方向同時空間自己回帰モデル, 対称同時空間自己回帰モデルは常に同定可能であり，フィッシャー情報量行列は常に正則である.

条件付き空間自己回帰モデルや空間ラグモデルについて

- 空間ラグモデル

$$x = \rho W x + Y\beta + \varepsilon$$

  - 空間重み行列 W には対称行列が使われることが多い.
  - W が非対称行列の場合は同定可能性.
- 条件付き空間自己回帰モデル
  - 一般には，対称性が仮定されている.
    - 実は対称性はいらない？？非対称なら同定可能性は？

まとめ

- 同時空間自己回帰モデルは２次モーメントからだけではモデルが１つに定まらない（同定可能ではない）．
- モデルが同定可能でないと，複数の最尤解を生む.
  - 適当な答えを得る方法は？
- 複数の最尤解のうちのいくつかが重複すると，フィッシャー情報量行列が非正則になり，パラメータ推定が不可能になる，または，正しく推定できない.
- 行列 B のランクを調べれば，得られた解がフィッシャー情報量行列が正則な箇所で正しく推定できたかチェックできる.
  - 一般に行列　B が フルランクになる条件を求められれば，パラメータの取り得る範囲が決められる.
- 一方向同時空間自己回帰モデルや対称同時空間自己回帰モデルはいつでも同定可能である.
  - 非対称な空間ラグモデルや条件付き空間自己回帰モデルでも同定可能性の問題は起きる？