地统计系列

地理加权回归模型
-1-
理论推导

UP：小勇啊哈

2023年7月23日

提纲

一、多元线性回归推导

二、为什么会有地理加权回归？

三、地理加权回归推导

多元线性回归推导

一、多元线性回归推导

多元线性回归（Multiple Linear Regression）：用于描述一个连续因变量和多个自变量之间的线性依存关系的方法。

数据定义

- 观测（测量）数据集

$\mathbf{D} = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$

— n 为样本总数

— $\boldsymbol{x}_i$为第i个样本的自变量向量，自变量有K个，$\boldsymbol{x}_i = [1, x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{iK}]^T$，其中1对应着常数项（非随机部分）$(K+1)\times 1$

— y_i为第i个样本的因变量值

- 待估计数据集

$\boldsymbol{D}' = \{\boldsymbol{x}_0{}', \boldsymbol{x}_1{}', \ldots, \boldsymbol{x}_m{}'\}$

问题定义

基于观测数据集，构建线性回归方程 $f(\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{x}_i{}^T\boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i$，对带估计数据集$\boldsymbol{D}'$的 y 进行估计

$\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_K x_K + \varepsilon_i$

— $\boldsymbol{\beta}$为待估计参数，

$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \beta_1, \beta_2 \ldots, \beta_K]^T$ $(K+1)\times 1$

非随机部分　已知信息　随机部分

— ε_i为随机误差，服从正态分布

$\varepsilon_i \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$， σ^2为方差

一、多元线性回归推导

最小二乘法

最优化问题：

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \min_{\boldsymbol{\beta}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \boldsymbol{x}_i{}^T \boldsymbol{\beta})^2$$

使拟合出的曲线与观测值的**平方差最小**
即随机误差为0的情况下，让$f(x_i)$尽可能接近y_i

$$= \min_{\boldsymbol{\beta}} (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X\beta})^T (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X\beta})$$

矩阵形式表达

$$= \min_{\boldsymbol{\beta}} (\boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{X\beta} - \boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X\beta})$$

其中：

$\boldsymbol{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$ $n\times 1$

$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_n]^T$ $n\times(K+1)$

参数估计：

求偏导 $\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}}$

$$-2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} + 2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$$

矩阵求导公式参考：

$$\frac{\partial x^T a}{x} = \frac{\partial a^T x}{x} = a$$

$$\frac{\partial x^T x}{x} = 2x \qquad \frac{\partial x^T A x}{x} = Ax + A^T x$$

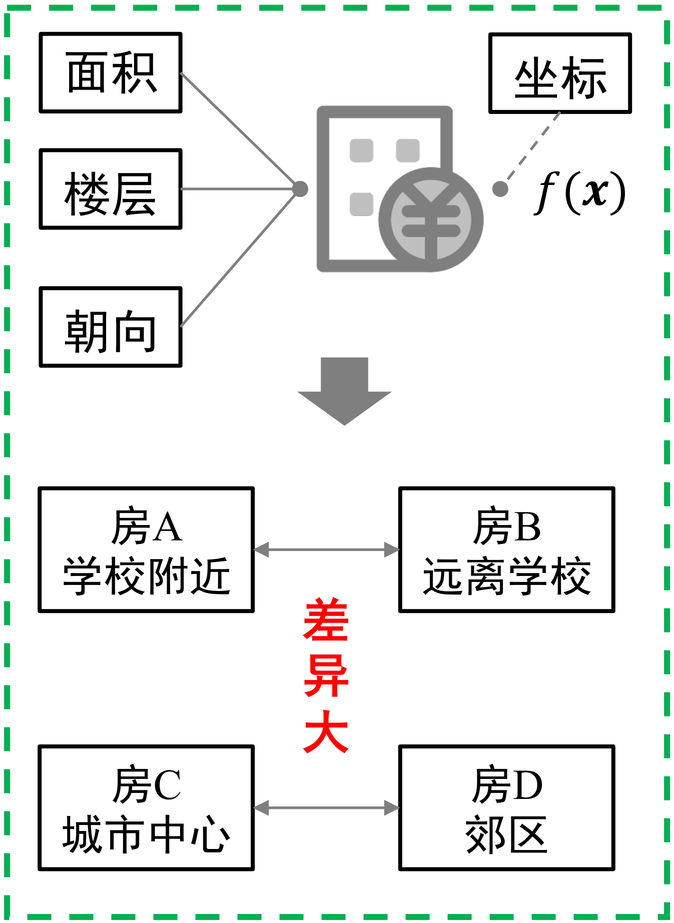
回归求解：

$$y_0' = x_0{}'^T \hat{\boldsymbol{\beta}} = x_0{}'^T (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$$

为什么会有
地理加权回归？

二、为什么会有地理加权回归？

以**多元线性回归**得到的全局回归方程，在涉及与**空间位置相关**的回归问题时，常难以表达X与Y之间的关系（即存在较大误差，随机误差ε影响过大）。

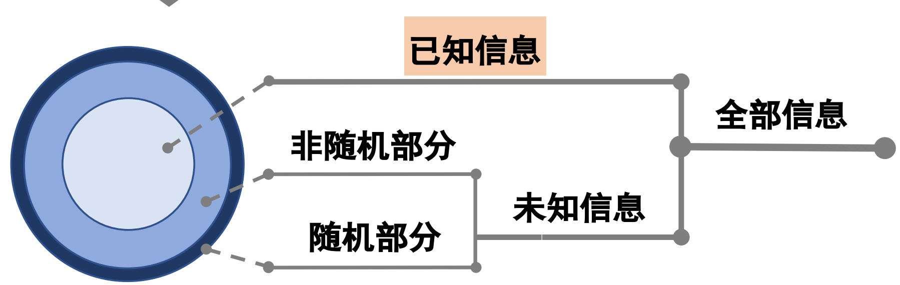


把这些很可能有较大影响的因素**都找出来**建立回归方程就好了～

- 专家知识的**完备性**；
- 影响因素的**可量化性**；
- 样本数据的**可获取性**；

机理过程难以重现！

如何充分利用已知信息？



上图详解见【科普篇 –“回归”的阐述】

二、为什么会有地理加权回归？

较为完备的机理重建往往“**此路不通**”，地理学家通过分析地理现象在空间上的复杂规律，提出**地理学第一定律**和**地理学第二定律**，为回归问题从**空间视角**认知带来了新的机遇，地理加权回归应运而生。

地理学第一定律

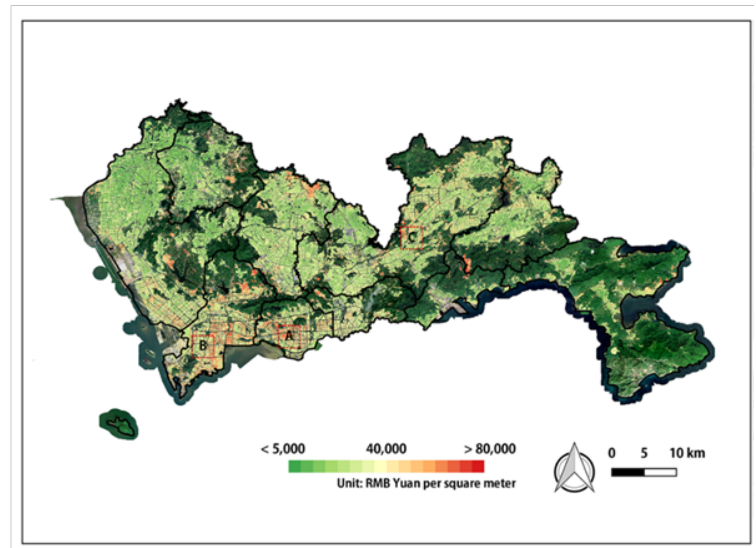
任何事物都与其他事物相关，但是近处的事物比远处的事物更相关。

——Waldo R. Tobler

地理学第二定律

地理现象的空间变化以及变化的差异性,即不可控的空间变化规律。

——Michael F. Goodchild



深圳市房价空间分布（姚尧等，2018）

- ✓ 房价分布呈现空间邻近相似；
- ✓ 房价分布难以用全局回归方程概括；

地理加权回归推导

三、地理加权回归推导

英国Fotheringham教授在1996年便提出**地理加权回归模型**(Geographical Weighted Regression , GWR)，GWR旨在区域每一处生成**局部**关系的回归模型。

数据定义

- 观测（测量）数据集

$\mathbf{D} = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \dots , (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$

样本$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$对应的样本空间位置为(u_i, v_i)

— n 为样本总数

— $\boldsymbol{x}_i$为第i个样本的自变量向量 $(K+1)\times 1$

— y_i为第i个样本的因变量值

- 待估计数据集

$\boldsymbol{D}' = \{\boldsymbol{x}_0{}', \boldsymbol{x}_1{}', \dots , \boldsymbol{x}_m{}'\}$

样本$\boldsymbol{x}_i{}'$对应的样本空间位置为$(u_i{}', v_i{}')$

问题定义

基于观测数据集，构建线性回归方程 $f(\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{x}_i{}^T\boldsymbol{\beta}(u_i{}', v_i{}') + \varepsilon_i$ ，对带估计数据集$\boldsymbol{D}'$中$\boldsymbol{x}_i{}'$对应的$\boldsymbol{y}_i{}'$进行估计

为每一个待估计样本计算一组回归参数，即地理学第二定律的体现

— $\boldsymbol{\beta}(u_i{}', v_i{}')$为样本$\boldsymbol{x}_i{}'$的待估计参数，

$\boldsymbol{\beta}(u_i', v_i') = [\beta_0(u_i{}', v_i{}'), \beta_1(u_i{}', v_i{}'), \beta_2(u_i{}', v_i{}') \dots , \beta_K(u_i{}', v_i{}')]^T$

$(K+1)\times 1$

— ε_i为随机误差，服从正态分布

$\varepsilon_i \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$， σ^2为方差

三、地理加权回归推导

最小二乘法

最优化问题：【$\boldsymbol{\beta}(u_0', v_0')$简化为$\boldsymbol{\beta}_0$表示】

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}_0} = \min_{\boldsymbol{\beta}} \sum_{i=1}^{n} [w_{i0}(y_i - \boldsymbol{x}_i{}^T \boldsymbol{\beta}_0)]^2$$

$$= \min_{\boldsymbol{\beta}_0} (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}_0)^T \boldsymbol{W}_0 (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}_0)$$

$$= \min_{\boldsymbol{\beta}_0} (\boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}_0 - \boldsymbol{\beta}_0{}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{\beta}_0{}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}_0)$$

引入空间权重w_{i0} ,代表第i个观测样本对第0个待估计样本的影响程度，即地理学第一定律体现

矩阵形式表达

其中：

$$\boldsymbol{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T_{n\times 1}$$

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_n]^T_{n\times(K+1)}$$

$$\boldsymbol{W}_0 = \begin{bmatrix} w_{10} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & w_{n0} \end{bmatrix}_{n\times n}$$

$\boldsymbol{W}_0$为对角矩阵，每个元素的取值范围均为[0,1]

参数估计：

求偏导 $\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}_0}$

$$-2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{Y} + 2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = 0$$

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}_0} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{X})^{-1}\,\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{Y}$$

回归求解：

$$y_0' = \boldsymbol{x}_0{}'^T\widehat{\boldsymbol{\beta}_0} = \boldsymbol{x}_0{}'^T(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{X})^{-1}\,\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{W}_0\boldsymbol{Y}$$

Thanks

空间权重的讲解敬请期待下一个视频......