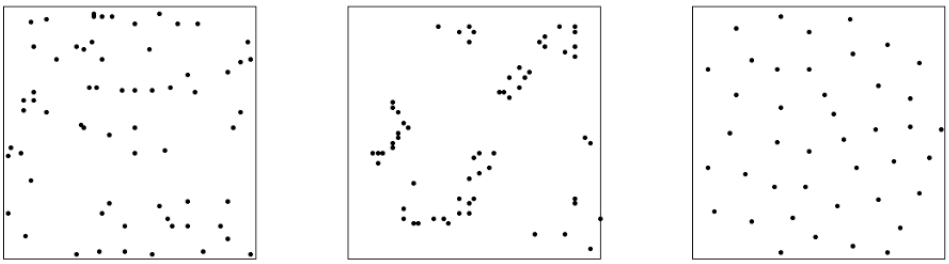
Spatio Temporal Data Analysis

Week 9: Modeling Spatial Patterns

공간 데이터는 세 종류로 나눌 수 있는데, point referenced, areal, spatial point process가 그것들이다. point referenced 데이터는 데이터의 정확한 위치 정보를 가지고 있다. 즉, 데이터가 발생한 위도, 경도 위치 정보를 담고 있다. areal 데이터는 위도, 경도 위치를 담고 있지 않고 '지역' 정보를 담고 있다. 예를 들어, 서울의 각 구별 미세먼지 데이터는 정확한 위도, 경도가 아닌, 서대문구, 영등포구 등 지역별 미세먼지 정보를 담고 있기 때문에 areal 데이터라고 볼 수 있다. 이번에 살펴볼 데이터는 마지막으로 남은 spatial point proess이다. 이는 데이터들의 분포가 spatial dependence을 가지고 있는지에 관심이 있다. 즉, 데이터별로 response variable이 있었던 point referenced, areal 데이터와는 달리, 데이터들이 어떻게 분포되어있는지 자체에 관심이 있다. 물론 이 데이터들이 추가적인 정보를 가지고 있을 수 있다. 예를 들어, 서울 서대문구의 상점들의 위치에 대한 공간 모델링을 하고 싶을 때, 상점들의 위치 뿐만 아니라 매출액 등의 정보도 사용할 수 있다. 이제 spatial point process에 대해 자세히 알아보자.

먼저 spatial point process와 spatial point patterns의 차이를 짚고 넘어가자. spatial point process는 point patterns을 발생시키는, 내재하는 매커니즘이다. 따라서 관측된 것은 point patterns이고 이를 설명하기 위해 spatial point process 모델을 사용한다.
point process에 패턴이 없다면, complete spatial randomness (CSR)이라고 부른다. CSR은 spatial point process의 null model이라고 생각하면 된다. CSR이 아니라면, clustering, regularity와 같은 특징을 가진다.



위 그림은 왼쪽부터 차례대로 CSR, clustering, regulartiy의 특징을 보이는 데이터이다. CSR은 아무런 패턴이 없고 clustering은 점들이 모여있으며 regularity는 점들이 일정한 간격을 띄고 분포되어 있다.

point process model에 대한 추론은 앞서 살펴본 세 종류의 공간 데이터 중, 가장 어려운 문제이다. 전과 마찬가지로 기술적인 측면과 복잡한 모델링, 두 가지가 있는데 우선 기술적인 측면부터 살펴보자.

Homogeneous Poisson Process

- CSR을 만족한다. 따라서 null model에 쓰인다.
- $N(A)$를 지역 A에서 일어나는 사건의 수, $|A|$을 그 지역의 크기라고 하자.
- Homogeneous Poisson Process는 아래와 같이 정의된다.

$$N(A) \sim Poisson(\mu(A))$$

$$where\ \mu(A) = \int_A \lambda dx = \lambda |A|$$

  여기서 λ는 intensity parameter로 이 값이 클수록 $N(A)$의 값이 커지니까 더 많은 데이터가 지역 A에서 생성된다.

- 또는 HPP가 CSR을 만족하므로, 아무 패턴이 없는 데이터라고 볼 수 있다. 즉, uniform 분포를 따르는 n개의 iid 샘플을 지역 A에서 뽑는 것과 동일하다.

Diagnosing CSR

통계량 U의 관측된 값을 u_1이라고하자. 마치 t test에서 하나의 test statistics을 얻은 것과 같은 느낌이다. 그런데 t test에서는 이의 표본 분포를 구하기가 매우 쉬웠지만 여기서는 그러기 어렵다. 따라서 s개의 test statistics의 표본을 귀무가설 하에서 독립적으로 뽑는다. 즉, CSR가정 하에서 s개의 test statistics, $u_1, \cdots, u_s$을 뽑으면,

$$P(u_1\, has\, rank\, j) = 1/s$$

실제 관측된 것은 u_1이고 나머지는 모두 같은 분포에서 뽑았으므로 u_1이 어떠한 rank을 가지든, 그 확률은 모두 동일하다. 이러한 아이디어로 CSR을 테스트하는 것이다. 그렇다면, 검정을 하는데 쓰이는 test statistics의 구체적인 형태를 살펴보자.

test statistics을 도출하기 위해, 사용하는 것 중 하나가 empirical cdf이다. empirical cdf는

$$\widehat{F}(x) = \frac{\sum 1\{X_i \le x\}}{n} = \frac{\#\{X_i \le x\}}{n}$$

이는 population cdf의 불편 추정량이다.

$$F(x) = P(X_i \le x) = \int_{-\infty}^{x} f(y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} 1\{y < x\} f(y)dy$$

또 데이터들 간의 정의된 거리를 이용한다.

- Pairwise distances: $s_{ij} = ||x_i - x_j||,\ i \neq j$

- Nearest neighbor distances: $t_i = min_{j \neq i} s_{ij}$
- Empty space distances: $d(u) = min_i ||u - x_i||,\ i \neq j$. 여기서 u는 관측되지 않은 값, x_i는 관측된 값이다.

먼저 empty space distances와 ECDF을 이용하여 CSR을 확인하는 방법을 알아보자.

Empty Space Distances

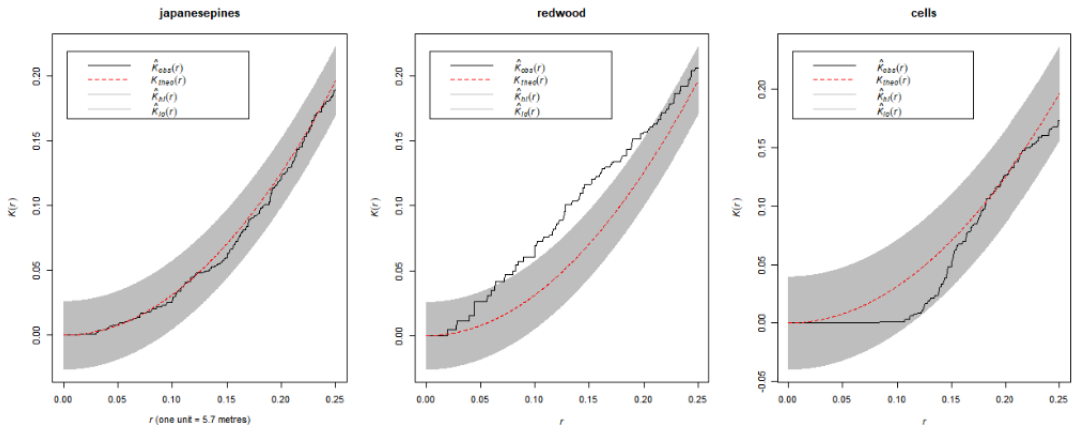
관심있는 공간 전체에서 $d(u)$을 살펴보기 힘드니까, 특정 지역 A에 대해서만 $d(u)$을 살펴보고 $d(u)$와 관련된 process있다고 생각한다. 아래 cdf을 생각해보자.

$$\begin{aligned} F_u(r) &= P(d(u) \leq r) \\ &= P(\text{at least one point within radius r of u}) \\ &= 1 - P(\text{no points within radius r of u}) \end{aligned}$$

즉, 관측되지 않은 어떤 한 점 u을 기준으로 반지름이 r인 원을 만들었을 때, 그 원의 영역에 점이 하나도 떨어지지 않을 확률은 intensity parameter λ와 그 원의 넓이 $|A| = \pi r^2$을 이용하여, $\frac{(\lambda \pi r^2)^0 \, exp\{-\lambda \pi r^2\}}{0!}$로 주어지고, $F(r) = 1 - exp\{-\lambda \pi r^2\}$이다. 이 확률은 u에 의존하지 않는다. 또한 n을 조건으로 하여, λ을 $\widehat{\lambda} = n/|A|$로 추정한다면 비교를 위해 유용한 베이스라인을 얻을 수 있다. 이렇게 true ECDF에 대한 추정값을 얻어서, empty space distances로 구한 ECDF와 비교를 한다. 즉, $u_1, \cdots, u_m$에 대해 $d(u)$에 기반하여

$$\widehat{F}(r) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} 1\{d(u_j) \leq r\}$$

을 구하고 $F(r) = 1 - exp\{-\lambda \pi r^2\}$와 비교한다. 이때 simulation envelopes을 만들기 위해서 Monte Carlo Sampling을 이용한다. 지역 $|A|$에서 n개의 위치 표본을 uniformly 뽑는다. 이 과정을 s번 반복하여 rank 기반 confidence band을 생성한다.



위 그림은 왼쪽부터 차례대로 CSR, clustering, regular 가정을 만족하는 데이터에 ECDF인 $\widehat{F}(r)$과 CSR 가정 하에서의 이론적 cdf인 $F(r)$을 비교한 그림이다. 좌측 데이터가 CSR을 만족하는데, 이론적 cdf와 가장 유사한 형태를 보였다. 가운데 데이터는 clustering을 만족하는데, ECDF가 이론적 cdf보다 큰 값을 가짐을 알 수 있다.

Nearest-neighbor distances

empty space distances와 유사하게 진행하면 된다. $t_i = min_{j \neq i} ||X_i - X_j||$을 이용하여 이론적 cdf인 $G(r) = P(t_i \leq r)$와 ECDF인 $\widehat{G}(r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} 1\{t_i \leq r\}$을 비교한다.

여태까지 살펴본 Homogeneous Poisson Process은 CSR과 동일한 의미로, intensity parameter가 지역에 의존하지 않았다. 즉 지역 A의 poisson 분포 $N(A)$는 평균이 $\mu(A) = \int_A \lambda dx = \lambda |A|$이다. 또한 $N(A) = n$으로 주어질 때, 이 n개의 데이터는 지역 A에서 n개의 표본을 균등하게 생성하는 것과 동일함을 살펴보았다. 이제는 지역에 따라서 intensity parameter가 다른 process을 보자.

Inhomogeneous Poisson Process

IHPP는 spatially varying intensity function, $\lambda(x)$에 따라서 정의된다. 즉, 이전에는 공간에 상관없이 λ라는 intensity parameter을 가졌지만 이제는 x에 dependent하다. IHPP는 margin의 점 분포와 center의 점 분포가 상이하다.

$$N(A) \sim Poisson(\mu(A))$$

$$\mu(A) = \int_A \lambda(x) dx$$

즉, 지역에 따라서 intensity parameter가 다르기 때문에 한 지역에서 균등하게 데이터를 생성하는 것과는 다른 의미를 가진다. 보통 균등하게 데이터를 생성하고, 확률에 따라서 데이터를 지우거나 유지하여 Inhomogeneous Poisson Process의 표본을 만든다.

- $\lambda_{max} = max_{x \in A} \lambda(x)$
- λ_{max}을 intensity parameter로 하여 homogeneous process 표본을 얻는다.
  - $n \sim Poisson(\lambda_{max} |A|)$
  - Draw $X_1, \cdots, X_n \sim Unif(A)$ independently
- $i = 1, \cdots, n$에 대해서 X_i을 확률에 따라서 유지한다. (uniform하게 하는 것이 아니다.)
  - $p(x_i) = \lambda(x_i)/\mu(A),\ \mu(A) = \int_A \lambda(x) dx$

근데 현실에서는 $\lambda(x)$을 모르므로 추정해야한다. 하지만 생각해보면, 우리에게 주어진 point process는 한 세트이고, 여기서 n개의 점이 관측되었다면 이것이 $\lambda(x)$의 observed data이다. 다시 말해서 관측된 데이터가 한 개 뿐이므로 Quadrat counting, kernel density 방법을 사용한다.

그 중 가장 간단하게 사용되는 Quadrat counting을 살펴보자. Quadrat counting은 쉽게 말해서 격자를 그려서 각 격자의 점들을 세는 방법이다. 예를 들어, 우한 바이러스가 발병된 지역에 점이 찍혀있다고 하자. 중국 후베이성 인근에 점이 매우 많을 것이며, 인근 나라들도 점이 많을 것이다. 격자를 그려서 살펴보면 각 격자별로 점의 분포(우한 바이러스의 분포)가 고르지 않을 것으로 예상된다. 따라서 이는 IHPP 가정이 적절함을 알 수 있다.
Quadrat counting이나 kernel density 방법은 HPP인지, IHPP인지 시각적으로 확인하는 EDA 작업이다. 마치 point referenced data에서 variogram이나 areal data에서 Moran's I 같은 역할이다. EDA를 통해서 HPP, 또는 IHPP을 시각적으로 확인했으면 그에 맞는 모델을 세우면 된다. 이제는 intensity function을 모델링하는 방법을 알아보자.

Modeling the Intensity Function

HPP일 때와, IHPP일 때 사용하는 모델이 달랐었다. 따라서 각각의 경우를 살펴본다.

Homogeneous Poisson Process

지역 A에서 HPP $N(A)$는 아래와 같이 정의됨을 이전에 살펴보았다.

$$N(A) \sim Poisson(\mu(A))$$

$$where\ \mu(A) = \int_A \lambda dx = \lambda |A|$$

HPP 모형으로부터 λ에 대한 mle을 찾으면, HPP 모형을 세울 수 있다. 이를 위해 likelihood을 적으면 아래와 같다.

$$L = \frac{(\lambda|A|)^n e^{-\lambda|A|}}{n} \propto e^{-\lambda|A|}\lambda^n$$

위 likelihood을 λ에 대한 $argmax$ 값을 찾으면, closed form인 $\widehat{\lambda} = n/|W|$으로 구할 수 있다. 또한 fisher information에 의해서 mle의 분산은 $\lambda/|W|^2$이다. 하지만 HPP는 CSR의 한 예시였음을 생각해본다면, 이는 우리의 관심사가 아니다. clustering 되어 있거나 regular한 패턴을 보이는 점들에 대한 모델링이 우리의 관심사이다. 따라서 IHPP의 likelihood을 살펴보자.

$$N(A) \sim Poisson\left(\mu(A)\right),\ \mu(A) = \int_A \lambda(x)dx$$

$$L = \frac{\left(\int_A \lambda(x)dx\right)^n e^{-\int_A \lambda(x)dx}}{n} \propto \left(\int_A \lambda(x)dx\right)^n e^{-\int_A \lambda(x)dx}$$

딱 봐도 intractable하고 mle의 closed form을 구할 수 없음을 알 수 있다. $log\,\lambda(x) = \sum_{j=1}^{p} \beta_j z_j(x)$로 둬서 mle가 unique함을 보일 수 있지만, 여전히 적분때문에 mle의 closed form을 구할 수 없다. 대안으로 Ripley's K function을 살펴보자.

Ripley's K function

Ripley's K function은 point process와 모수의 함수이다. 이 함수는 점들간의 상호작용을 설명하는데 도움을 준다. 어떤 stationary process에 대해서, Ripley's K function은 아래와 같이 정의된다.

$$K(r) = \frac{1}{\lambda} E\left[N_0(r)\right]$$

여기서 $N_0(r)$은 거리 r이내에 있는 임의의 사건의 수를 의미한다.
HPP에 대해서 A를 반지름이 r인 원으로 정의한다면 $|A| = \pi r^2$이므로 $K(r) = \frac{1}{\lambda}\lambda\pi r^2 = \pi r^2$이다.
반면에, IHPP라면, $K(r)$은 어떤 특징을 가질까? clustering이라면, 중심에서 거리를 가깝게 잡으나, 멀리 잡으나 그 원 안에 있는 점들의 개수는 크게 차이가 없을 것이다. 왜냐하면 한 점을 중심으로 모여있기 때문이다. 하지만 regular 경우에는, r이 커질수록 그 원 안에 있는 점들의 개수가 많아질 것이다.

K의 여러 estimator가 제시되었는데, 보통 아래의 형태를 가진다.

$$\widehat{K}(r) = \frac{1}{\widehat{\lambda}^2|W|} \sum_{i \neq j} 1\left\{||x_i - x_j|| < r\right\}$$

$\widehat{K}$을 HPP하에서의 theoritical K와 비교함으로써 CSR 가정이나 parametric models을 추정하는 방법을 살펴본다.

Point processes with clustering

이제 클러스터링을 이루는 point processes 중에서 두 종류를 살펴본다.

Poisson cluster processes

- 각 클러스터링에 parent events와 child events가 있다고 생각한다.
- parent events는 intensity λ_c인 poisson process을 따른다. 즉, λ_c는 parent process의 개수를 정한다.
- 각 parent는 M개의 offpsring을 발생시킨다. discrete offspring distribution p_m에 따라서 각 parent에 iid하다.
- parent의 위치에 따른 offspring의 위치는 bivariate pdf을 따른다.
- parent보다는 offspring에 더 관심이 있다.
- point processes with clustering의 두 예시는 아래와 같다.
  - Matern process
  - Thomas process

Cox Processes (Doubly stochastic poisson processes)

- poisson cluster processes에서 intensity는 λ_c, 즉 상수였다. 하지만 cox processes에서는 intensity function 또한 랜덤으로 간주한다. 따라서 총 두 단계의 randomness가 존재한다; i.e., λ에 대한 randomness, Λ가 점을 만들어낼 때의 randomness
- 따라서 $\Lambda(x) = \lambda(x)$로 둔다면, 이는 IHPP와 같다.
- Λ에 따라서 process의 성질이 완전히 달라진다.
- $\Lambda(x)$가 x에 의존하지 않는다면, 이를 mixed poisson process라고 부른다. $\Lambda(x) = exp\{Z(x)\}$이고 Z가 GP라면, log gaussian cox processes라고 부른다.