# 空間的自己相関に関するモランの修正型 / 統計量

A modified version of Moran' I for spatial autocorrelation

## 丸山 祐造 東京大学・空間情報科学研究センター

#### 概要

本論文では、空間的自己相関に関する定量的指標であるモランのI統計量を理論的に考察する.具体的には,I統計量の達成可能な上限下限を,空間重み関数の関数として与える.またその数値例として,上限や下限の絶対値が1を超えたり,0.5を超えない場合を示す.このことは,ピアソンの相関係数とは違い,その値によって,相関の強さが把握出来ないことを意味する.そこでひとつの代替案として,ピアソンの相関係数のようにレンジ[-1,1]をもち,上限1と下限-1が達成可能なモランの修正型I統計量を提案する.

## 1 イントロダクション

ある領域のいくつかの地点において、興味の対象となる変数が観測されているとする.このとき、距離が近い二地点の値の出方は、遠い二地点のそれよりも似ている傾向が見られることが多いであろう.逆に大きな値を取る地点の近くの地点では、小さい値を取る傾向があるかもしれない.両者とも「全てのものは他の全てのものと関連するが、近いものほど強く関連し合う」ことを反映しており、「トブラーの地理学第一法則」として知られている.

空間に関する変数に限らず,一般に二変数 x と y の値の出方に関係があるとき,x と y は相関があるという。x が増加すると y も増加する傾向を正の相関といい,x の増加が y の減少に対応していることを負の相関という。x が増加すると y も増加する傾向を正の相関といい,x の増加が y の減少に対応していることを負の相関という。x 節で定義するピアソンの相関係数は,二変数間の相関の定量的指標である。x の範囲(レンジ)の値を取り,相関の強さが絶対値の大きさで表され,また符号が相関の正負に対応している。本稿で我々が議論しようとしているのは,同一の変数の異なる二地点の値の出方の関係であり,特に空間的自己相関と呼ばれる。その定量的指標として,x 節で定義するモランの x 統計量が知られている。いくつかの文献においては,モランの x 統計量はピアソンの相関係数の空間的自己相関版であるとの説明がされている。しかし,そのレンジについて,誤った記述が散見される。例えば Wikipedia の Moran's x の頃には "Values range from x 1 (indicating perfect dispersion) to x 1 (perfect correlation)." と記されている。本稿では,モランの x 統計量のレンジが x 1 に一致しない数値例を与える\*1

本稿の構成は以下の通りである.2 節で,モランの I 統計量の定義に必要となる空間重み行列を紹介する.3 節で,ピアソンの相関係数やモランの I 統計量のレンジの評価に必要となる数学を整理する.4 節では, $\mathrm{de}$ 

 $<sup>^{*1}</sup>$  これまで , モランの I 統計量のレンジが [-1,1] でないことが指摘されてこなかったわけではない . 著者の知る限り , 少なくとも Cliff and Ord (1981) , Goodchild (1988) , de Jong et al. (1984) , Waller and Gotway (2004) ではレンジが [-1,1] に一致 しないことが指摘されている .

Jong et al. (1984) に基づいて,空間的自己相関に関する定量的指標であるモランの I 統計量を理論的に考察する.具体的には,I 統計量の達成可能な上限下限を,空間重み関数の関数として与える.またその数値例として,絶対値が 1 を超えたり,0.5 を超えない場合を示す.このことは,ピアソンの相関係数とは違い,その値によって,相関の強さが把握出来ないことを意味する.5 節では,3 節と 4 節を踏まえて,ピアソンの相関係数のようにレンジ [-1,1] をもち,上限 1 と下限 -1 が達成可能なモランの修正型 I 統計量を提案する.

### 2 空間重み行列

空間重み行列 W は,n 地点  $s_1,\ldots,s_n$  で観測値が得られているときに地点間の依存関係の有無及び関係の強さを表現する  $n\times n$  正方行列であり,4 節でモランの I 統計量を定義する際に必要となる.W の (i,j) 成分  $w_{ij}$  は全て非負の値を取り,地点  $s_i$  と地点  $s_j$  の間の関係の強さを与える. $w_{ij}=0$  であれば,二地点  $s_i$ ,の間に依存関係がないことを示す.なお,空間重み行列の対角成分  $w_{ii}$  は,ゼロに設定される.

 $s_i$  地点 ,  $s_j$  地点がそれぞれ i 領域と j 領域の代表点である場合 ,

$$w_{ij} = \begin{cases} 1 & i, j \text{ が境界線を共有している} \\ 0 & 共有していない \end{cases}$$
 (1)

が最も単純な重みとして考えられる $^{*2}$  . また  $s_i$  と  $s_j$  の距離  $d_{ij}$  が , 閾値  $\delta$  よりも近い場合だけに着目する

$$w_{ij} = \begin{cases} 1 & d_{ij} < \delta \\ 0 & d_{ij} \ge \delta \end{cases}$$
 (2)

や, $w_{ij}$ が $d_{ij}$ の滑らかな減少関数である

$$w_{ij} = d_{ij}^{-\alpha} \tag{3}$$

(ここで $\alpha$ は正の定数)なども使われる.

ところで式 (1) , (2) , (3) の  $w_{ij}$  を (i,j) 成分とする  $n\times n$  行列 W は , 任意の  $i\neq j$  に対して  $w_{ij}=w_{ji}$  が成り立つので , 対称行列である . 対称ではない空間重み行列の例として , k 近傍行列がある . k 近傍行列の (i,j) 成分は ,  $s_i$  の近傍 k 個を選んだときに  $s_j$  が入っていれば 1 , 入っていなければ 0 である .  $s_i$  の近傍 k 個を選んだときに  $s_j$  が入っていても ,  $s_j$  の近傍 k 個を選んだときに  $s_i$  が入っているとは言えないので , 対称性は必ずしも保証されない . また , (i,j) 成分  $w_{ij}$  を  $w_{ij}/(\sum_{k=1}^n w_{ik})$  で置き換えて , 全ての行の行和を 1 に基準化した空間重み行列が使われることもある . この場合 , もとの W が対称行列であったとしても , 基準化した後の対称性は保証されない . 空間重み行列全般について詳しくは , 瀬谷・堤 (2014) 第 4 章 , 谷村 (2010) 第 3 章を参照されたい .

## 3 内積と二次形式

#### 3.1 内積

二本の n 次元ベクトル  $oldsymbol{u}=(u_1,\ldots,u_n)^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}$  と  $oldsymbol{v}=(v_1,\ldots,v_n)^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}$  に対して,内積は

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} u_{i} v_{i} \tag{4}$$

 $<sup>^{*2}</sup>$  メッシュデータの場合,角に接するメッシュの扱いによって,ルーク型,エッジ型,クイーン型の 3 種が知られている.古谷 (2011) 第 5 章を参照のこと.

で定義される.ベクトルは縦ベクトルであり,ベクトルの右肩の T は転置を表す.内積の定義から,

$$u^{\mathrm{T}}v = v^{\mathrm{T}}u$$
, 実数  $s$  に対し  $\{su\}^{\mathrm{T}}v = su^{\mathrm{T}}v$ ,  $(u+v)^{\mathrm{T}}w = u^{\mathrm{T}}w + v^{\mathrm{T}}w$  (5)

が成り立つ.また u の長さ  $\|u\|$  は,u 同士の内積  $u^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }u$  の平方根で定義される.ところで,u を自身の長さ  $\|u\|$  で割った  $u/\|u\|$  は,長さ 1 の単位ベクトルになる.二本の単位ベクトル u と v 及び実数 s に対して,su+v の長さの二乗は,内積の性質(5)及び  $\|u\|=\|v\|=1$  より,

$$||su + v||^2 = (su + v)^{\mathrm{T}}(su + v) = s^2||u||^2 + 2su^{\mathrm{T}}v + ||v||^2$$
  
=  $(s + u^{\mathrm{T}}v)^2 + 1 - |u^{\mathrm{T}}v|^2$ 

となる. $\|su+v\|^2$  を s の関数としてみると, $s=-u^{\mathrm{T}}v$  のとき最小値  $1-|u^{\mathrm{T}}v|^2$  をとる.最小値も非負であることから,二本の単位ベクトルの内積について以下の定理が成り立つ.

定理 3.1. 二本の単位ベクトル u,v の内積について

$$-1 \le \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} \le 1 \tag{6}$$

が成り立つ.等号成立は

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{u} = \boldsymbol{v} \\ -1 & \boldsymbol{u} = -\boldsymbol{v} \end{cases} \tag{7}$$

で与えられる.

#### 3.2 二次形式

n 次元ベクトル  $m{v}=(v_1,\ldots,v_n)^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }$  と  $n\times n$  正方行列  $m{Q}$  に対して,二次形式は

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v} = \sum_{i,j=1}^{n} q_{ij} v_i v_j \tag{8}$$

で定義される.二次形式 (8) において,任意の v に対して  $v^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }Qv=v^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }\{(Q+Q^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} })/2\}v$  が成り立つことに注意されたい.もし Q が非対称であれば対称行列  $(Q+Q^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} })/2$  を扱っていると読み替えればよいので,一般性を失わず Q は対称行列と仮定する.

一般に  $n\times n$  対称行列は重根を含めて n 個の実数の固有値を持つ.ここでは Q の固有値を  $\lambda_1,\dots,\lambda_n$  , 対応する長さ 1 の固有ベクトルを  $h_1,\dots,h_n$  とする.行列 Q はそのスペクトル分解として

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathbf{h}_i \mathbf{h}_i^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

を満たす.二次形式  $v^{\scriptscriptstyle ext{T}}Qv$  に関する比について ,

$$\min \lambda_i \le \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}} \le \max \lambda_i \tag{10}$$

であること,(10) における最大値及び最小値は,v がそれぞれ  $\max \lambda_i$ , $\min \lambda_i$  に関する固有空間の元であるときに達成されること,はよく知られている.ここではモランの I 統計量で考慮すべき条件を Q に課した下で,二次形式  $v^{\mathrm{T}}Qv$  に関する不等式を導出する.

まず, $n \times n$  対称行列 m Q の n 個の行和が全て 0 であることを仮定する.対称性から列和も全て 0 である.このとき全ての成分が 1 である l 次元ベクトル,全ての成分が 0 である l 次元ベクトルをそれぞれ  $m 1_l, m 0_l$  とすると,

$$\mathbf{Q}\mathbf{1}_n = \mathbf{0}_n = 0\mathbf{1}_n \tag{11}$$

を満たす.(11) は,0 と  $\mathbf{1}_n/\sqrt{n}$  が固有値と固有ベクトルの一組であることを意味し,これを n 番目の組 $\lambda_n, \mathbf{h}_n$  に割り当てる.従って Q のスペクトル分解は, $\mathbf{1}_n$  と直交する固有ベクトル  $\mathbf{h}_1,\dots,\mathbf{h}_{n-1}$  及び対応する固有値  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  により

$$Q = \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i h_i h_i^{\mathrm{T}}$$
(12)

と書ける.(12) において,固有値  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  は降順に並んでいると仮定し $^{*3}$ ,さらに,これから導く不等式の等号条件を簡潔に与えるために, $\lambda_1>\lambda_2$  及び  $\lambda_{n-2}>\lambda_{n-1}$  を仮定する $^{*4}$  .

ところで  $z_i=m{h}_i^{ ext{ iny T}}m{v}(i=1,\ldots,n-1)$  ,  $m{z}=(z_1,\ldots,z_{n-1})^{ ext{ iny T}}$  とすると , 二次形式  $m{v}^{ ext{ iny T}}m{Q}m{v}$  は

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\left(\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_{i} \boldsymbol{h}_{i} \boldsymbol{h}_{i}^{\mathrm{T}}\right) \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_{i} z_{i}^{2} = \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}$$
(13)

と書ける.(13) の最右辺において, $\Lambda$  は  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  を対角成分に並べた  $(n-1)\times(n-1)$  対角行列である.以下では,まず二次形式  $z^{\mathrm{T}}\Lambda z$  に関する不等式及びその等号条件を与え,後でそれらを Q と v による表現に戻し,定理の形にまとめる.

二次形式  $m{z}^{\scriptscriptstyle{\mathrm{T}}} m{\Lambda} m{z} = \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i z_i^2$  において,任意の  $1 \leq i \leq n-1$  に対し  $\lambda_{n-1} \leq \lambda_i \leq \lambda_1$  であり,

$$\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i z_i^2 = \begin{cases} \leq \lambda_1 \sum_{i=1}^{n-1} z_i^2 \\ \geq \lambda_{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} z_i^2 \end{cases}$$

あるいはこれと同等の不等式として

$$\lambda_{n-1} \le \frac{\mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z}}{\mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{z}} \le \lambda_1 \tag{14}$$

を得る .  $i\neq 1$  のとき  $\lambda_1>\lambda_i$  であり ,  $i\neq n-1$  のとき  $\lambda_i>\lambda_{n-1}$  であることに注意すると , (14) における等号成立は , 0 でない任意の実数 c に対して

$$\frac{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}} = \begin{cases} \lambda_{1} & \boldsymbol{z} = (c, \mathbf{0}_{n-2}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\mathcal{E}} \boldsymbol{\mathcal{E}} \\ \lambda_{n-1} & \boldsymbol{z} = (\mathbf{0}_{n-2}^{\mathrm{T}}, c)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\mathcal{E}} \boldsymbol{\mathcal{E}} \end{cases}$$
(15)

で与えられる.

以下では  $\lambda_1,\ldots,\lambda_{n-1}$  のうち,正が p 個,負がm 個と仮定する.つまり

$$\lambda_1 > \lambda_2 \ge \dots \ge \lambda_p > 0 > \lambda_{n-m} \ge \dots \ge \lambda_{n-2} > \lambda_{n-1} \tag{16}$$

であり,0 が固有方程式の重根である場合を考慮すると, $p+m \le n-1$  である.このように正負両方の固有値を併せ持つ行列は不定値(indefinite)行列と呼ばれる $^{*5}$ .

まず, $-|\lambda_i| \leq \lambda_i \leq |\lambda_i|$ より,

$$-\sum\nolimits_{i=1}^{n-1} |\lambda_i| z_i^2 \leq \sum\nolimits_{i=1}^{n-1} \lambda_i z_i^2 \leq \sum\nolimits_{i=1}^{n-1} |\lambda_i| z_i^2$$

 $<sup>^{*3}</sup>$  0 が固有方程式の重根である場合には ,  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  の中に 0 が含まれる .

 $<sup>^{*4}</sup>$  ただし,最大固有値や最小固有値が固有方程式の重根の場合でも,対応する等号条件を与えることは可能である.

 $<sup>^{*5}</sup>$  全ての固有値が正の場合は正定値 (  $positive\ definite$  ), 非負の場合は非負定値 (  $non-negative\ definite$  ) と呼ばれる .

が従う.また  $\Lambda$  の対角成分がその絶対値で置き換えられた対角行列を  $\Lambda_+$  とするとき,上と同等な不等式として

$$-1 \le \frac{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda}_{+} \boldsymbol{z}} \le 1 \tag{17}$$

が得られる.不等式 (17) における等号成立条件を与えるために , 固有値の符号に合わせて n-1 次元ベクトル c を

$$\boldsymbol{c} = (\overbrace{c_1, \dots, c_p}^{c_p}, c_{p+1}, \dots, c_{n-m-1}, \overbrace{c_{n-m}, \dots, c_{n-1}}^{c_m})^{\mathrm{T}}$$

のように分解する .  $c_i=0$  のとき ,  $\lambda_i c_i^2=0$  , また  $c_i \neq 0$  のとき ,

$$-|\lambda_i|c_i^2 < \lambda_i c_i^2 = |\lambda_i|c_i^2 \quad \text{for } i = 1, \dots, p$$
  
$$-|\lambda_i|c_i^2 = \lambda_i c_i^2 < |\lambda_i|c_i^2 \quad \text{for } i = n - m, \dots, n - 1$$

に注意すると, (17) の等号成立は

$$\frac{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda}_{+} \boldsymbol{z}} = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{z} = \boldsymbol{c} & \boldsymbol{c}_{p} \neq \boldsymbol{0}_{p} \, \boldsymbol{h} \supset \boldsymbol{c}_{m} = \boldsymbol{0}_{m} \\ -1 & \boldsymbol{z} = \boldsymbol{c} & \boldsymbol{c}_{p} = \boldsymbol{0}_{p} \, \boldsymbol{h} \supset \boldsymbol{c}_{m} \neq \boldsymbol{0}_{m} \end{cases} \tag{18}$$

で与えられる。

次に,固有値に関する条件 (16) のもとで,不等式 (14) に似た不等式を与える.

$$|\mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z}| = \begin{cases} \mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} = \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i z_i^2 & \mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} > 0 \\ -\mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} = \sum_{i=1}^{n-1} (-\lambda_i) z_i^2 & \mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} < 0 \end{cases}$$
(19)

において

$$\lambda_1 > \lambda_i \ (i = 2, ..., n - 1), \quad |\lambda_{n-1}| = -\lambda_{n-1} > -\lambda_i \ (i = 1, ..., n - 2)$$

に注意すると,

$$|oldsymbol{z}^{ ext{ iny T}} oldsymbol{\Lambda} oldsymbol{z}| \leq egin{cases} \lambda_1 oldsymbol{z}^{ ext{ iny T}} oldsymbol{z} & oldsymbol{z}^{ ext{ iny T}} oldsymbol{\Lambda} oldsymbol{z} > 0 \ |\lambda_{n-1}| oldsymbol{z}^{ ext{ iny T}} oldsymbol{z} & oldsymbol{z}^{ ext{ iny T}} oldsymbol{\Lambda} oldsymbol{z} < 0 \end{cases}$$

が従う . z が集合 A に入れば 1 , そうでなければ 0 を取る指示関数  $I_A(z)$  を用いて

$$|oldsymbol{z}^{ ext{T}}oldsymbol{\Lambda}oldsymbol{z}| \leq \left\{\lambda_{1}I_{[oldsymbol{z}^{ ext{T}}oldsymbol{\Lambda}oldsymbol{z}>0]}(oldsymbol{z}) + |\lambda_{n-1}|I_{[oldsymbol{z}^{ ext{T}}oldsymbol{\Lambda}oldsymbol{z}<0]}(oldsymbol{z})
ight\}oldsymbol{z}^{ ext{T}}oldsymbol{z}$$

あるいはこれと同等の不等式として

$$-1 \le \frac{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}}{\left\{ \lambda_{1} I_{[\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z} \ge 0]}(\boldsymbol{z}) + |\lambda_{n-1}| I_{[\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z} < 0]}(\boldsymbol{z}) \right\} \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}} \le 1$$
(20)

を得る.不等式 (14) の等号条件と同様に ,(20) の等号条件は ,0 でない任意の実数 c に対して

$$\frac{\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z}}{\left\{ \lambda_{1} I_{[\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z} \geq 0]}(\boldsymbol{z}) + |\lambda_{n-1}| I_{[\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{z} < 0]}(\boldsymbol{z}) \right\} \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}} = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{z} = (c, \boldsymbol{0}_{n-2}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} \\ -1 & \boldsymbol{z} = (\boldsymbol{0}_{n-2}^{\mathrm{T}}, c)^{\mathrm{T}} \end{cases}$$
(21)

で与えられる.

以下では,不等式 (14),(17),(20) 及びその等号条件を Q と v による表現に戻し,定理の形にまとめる.なお,長さ 1 の固有ベクトルを横に連ねた  $(h_1,\ldots,h_n)$  は直交行列であり,従って

$$(h_1, \ldots, h_n)^{\mathrm{T}}(h_1, \ldots, h_n) = h_1 h_1^{\mathrm{T}} + \cdots + h_{n-1} h_{n-1}^{\mathrm{T}} + 1_n 1_n^{\mathrm{T}} / n = I_n$$

である.この両辺の  $m{v}=(v_1,\dots,v_n)^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }$  に関する二次形式により, $ar v=\sum_{i=1}^n v_i/n$  に対して

$$\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} + n\bar{v}^{2} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$$

が従うことに注意する.

定理  ${\bf 3.2.}$   $n\times n$  対称行列  ${\bf Q}$  について,n 個の行和が全て 0 であると仮定する.このとき  ${\bf Q}$  のスペクトル分解は, ${\bf 1}_n$  と直交する固有ベクトル  ${\bf h}_1,\dots,{\bf h}_{n-1}$  及び対応する固有値  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  により

$$Q = \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i \mathbf{h}_i \mathbf{h}_i^{\mathrm{T}}$$
 (22)

と書ける.なお,固有値  $\lambda_1,\dots,\lambda_{n-1}$  は降順に並んでいること, $\lambda_1>\lambda_2$  及び  $\lambda_{n-2}>\lambda_{n-1}$  を仮定する.

(A) 任意の n 次元ベクトル v に対して,不等式

$$\lambda_{n-1} \le \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} - n \bar{v}^{2}} \le \lambda_{1}$$
 (23)

が成り立つ.等号成立は,0 でない任意の実数  $c_1, c_{n-1}$  と任意の実数  $c_n$  に対して

$$\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} - n\bar{v}^{2}} = \begin{cases} \lambda_{1} & \boldsymbol{v} = c_{1}\boldsymbol{h}_{1} + c_{n}\boldsymbol{1}_{n} \\ \lambda_{n-1} & \boldsymbol{v} = c_{n-1}\boldsymbol{h}_{n-1} + c_{n}\boldsymbol{1}_{n} \end{cases}$$
(24)

で与えられる.

以下の(B),(C)では,

$$\lambda_1 > \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_p > 0 > \lambda_{n-m} \ge \cdots \ge \lambda_{n-2} > \lambda_{n-1}$$

を仮定する.

(B) 任意の n 次元ベクトル v および n imes n 非負定値対称行列  $m{Q}_+ = \sum_{i=1}^{n-1} |\lambda_i| m{h}_i m{h}_i^{ imes}$  に対して,不等式

$$-1 \le \frac{\mathbf{v}^{\mathsf{T}} \mathbf{Q} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\mathsf{T}} \mathbf{Q}_{+} \mathbf{v}} \le 1 \tag{25}$$

が成り立つ.等号成立は,一つ以上の非ゼロ要素を含む  $c_1,\dots,c_p$ ,また一つ以上の非ゼロ要素を含む  $c_{n-m},\dots,c_{n-1}$  からなる任意の  $c_1,\dots,c_{n-1}$  及び任意の実数  $c_n$  に対して,

$$\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{+}\boldsymbol{v}} = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n-m-1} c_{i}\boldsymbol{h}_{i} + c_{n}\boldsymbol{1}_{n} \\ -1 & \boldsymbol{v} = \sum_{i=p+1}^{n-1} c_{i}\boldsymbol{h}_{i} + c_{n}\boldsymbol{1}_{n} \end{cases}$$
(26)

で与えられる.

(C) 任意の n 次元ベクトル v に対して,不等式

$$-1 \le \frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{v}}{\{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} - n \bar{v}^{2}\} \left\{ \lambda_{1} I_{[\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{v} \ge 0]}(\boldsymbol{v}) + |\lambda_{n-1}| I_{[\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{v} < 0]}(\boldsymbol{v}) \right\}} \le 1$$
(27)

が成り立つ . 等号成立は , 0 でない任意の実数  $c_1, c_{n-1}$  と任意の実数  $c_n$  に対して

$$\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}}{\left\{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}-n\bar{v}^{2}\right\}\left\{\lambda_{1}I_{\left[\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}\geq0\right]}(\boldsymbol{v})+|\lambda_{n-1}|I_{\left[\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}<0\right]}(\boldsymbol{v})\right\}}$$

$$=\begin{cases}
1 & \boldsymbol{v}=c_{1}\boldsymbol{h}_{1}+c_{n}\boldsymbol{1}_{n} \\
-1 & \boldsymbol{v}=c_{n-1}\boldsymbol{h}_{n-1}+c_{n}\boldsymbol{1}_{n}
\end{cases} (28)$$

で与えられる.

## 4 ピアソンの相関係数とモランの / 統計量

ピアソンの相関係数は,二変数の相関の強さを測る指標である.n 組のデータ  $(x_1,y_1),\dots,(x_n,y_n)$  に対して,x と y それぞれの標本平均を  $\bar{x}=\sum_{i=1}^n x_i/n$ , $\bar{y}=\sum_{i=1}^n y_i/n$  としたとき,

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})}}$$
(29)

で定義される.xとyに関する偏差ベクトルを

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = (x_1 - \bar{x}, \dots, x_n - \bar{x})^{\mathrm{T}}, \ \tilde{\boldsymbol{y}} = (y_1 - \bar{y}, \dots, y_n - \bar{y})^{\mathrm{T}}$$
(30)

とするとき, $r_{xy}$  は  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{y}$  に関する二本の単位ベクトル  $\tilde{x}/\|\tilde{x}\|$ , $\tilde{y}/\|\tilde{y}\|$  の内積として表現できる.従って定理 3.1 より  $|r_{xy}| \leq 1$  が従う.相関係数を解釈するとき,(29) の分子が重要である.(x,y) 平面の原点を  $(\bar{x},\bar{y})$  に シフトしたときに, $(x_i,y_i)$  が第一象限と第三象限に値を取れば(すなわち  $x_i$  が小さければ  $y_i$  も小さい, $x_i$  が大きければ  $y_i$  も大きい,という関係にあれば), $(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$  は正の値を取る.逆の関係にあれば,負の値を取る.結果として,相対的に多くの  $(x_i,y_i)$  が第一象限と第三象限にあれば,(29) の分子は正となる.(29) の分母は常に正であるので,相関の正負と相関係数  $r_{xy}$  の符号が対応することが分かる. $r_{xy}=\pm 1$  となるのは, $\tilde{x}/\|\tilde{x}\|=\pm \tilde{y}/\|\tilde{y}\|$  のときであり,第i 成分を取り出すと,

$$y_i - \bar{y} = \pm \{ \|\tilde{y}\| / \|\tilde{x}\| \} (x_i - \bar{x})$$

である.従って,(x,y) 平面において全てのデータが右上がりの直線上にあるとき, $r_{xy}=1$  となり,右下がりの直線上にあるときには  $r_{xy}=-1$  となる.

次に空間的自己相関に関するモランの I 統計量を考える.領域 D の n 地点  $s_1,\dots,s_n$  において興味の対象となる変数 y の観測値が得られており,それらを  $y_1=y(s_1),\dots,y_n=y(s_n)$  と表す.また (i,j) 成分が  $w_{ij}$  である空間重み行列 W が与えられるとする.このとき,モランの I 統計量は

$$I = \frac{n \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij} (y_i - \bar{y}) (y_j - \bar{y})}{\{\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2} = \frac{n}{\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}} \frac{\tilde{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} \tilde{\boldsymbol{y}}}{\|\tilde{\boldsymbol{y}}\|^2}$$
(31)

で定義される.ピアソンの相関係数と同様に,解釈の上では (31) の分子が重要である.各項  $(y_i-\bar{y})(y_j-\bar{y})$  の符号の解釈はピアソンの相関係数と同じであるが,空間重み  $w_{ij}$  係数が係るため,近い二地点,あるいは関係の強い二地点における  $(y_i-\bar{y})(y_j-\bar{y})$  の符号と絶対値の大きさが相対的に効く.これがピアソンの相関係数との違いである.

ここで , モランの I 統計量のレンジを考える . W の最大固有値 , 最小固有値をそれぞれ  $l_1,l_n$  とするとき , 3 節の式 (10) において , Q=W ,  $v=\tilde{y}$  とすることにより , 不等式

$$\frac{nl_n}{\sum_{i,j=1}^n w_{ij}} \le I \le \frac{nl_1}{\sum_{i,j=1}^n w_{ij}}$$
 (32)

が得られる.ところで,式 (10) における最大値・最小値は v が対応する固有ベクトルの定数倍のときに達成される.一方 (31) の分子の二次形式における  $\tilde{y}$  は,その成分の和が必ず 0 である.一般には固有ベクトルの成分の総和は 0 ではないので,(32) の上限下限が達成される保証はない.つまりモランの I 統計量 (31) のレンジは,(32) より真に狭いはずである.

この点を踏まえて,達成可能な上限下限に基づくレンジを,空間重み関数の関数として導出する.(30) で与えられる y の偏差ベクトル  $\tilde{y}$  は  $\tilde{y}=(I_n-\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^{\scriptscriptstyle {\rm T}}/n)y$  と書ける.よって,モランの I 統計量 (31) の分子の二次形式  $\tilde{y}^{\scriptscriptstyle {\rm T}}W\tilde{y}$  は

$$\{(\boldsymbol{I}_{n} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)\boldsymbol{y}\}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\{(\boldsymbol{I}_{n} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)\boldsymbol{y}\} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_{n} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{I}_{n} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)\boldsymbol{y}$$

$$= \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{W}}\boldsymbol{y}$$
(33)

と表現できる. ただし(33)において

$$\tilde{\boldsymbol{W}} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}} / n)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}} / n)$$
(34)

と置いた.以後 ilde W を W に関する空間重み偏差行列と呼ぶことにする.W と  $I_n-1_n1_n^{\mathrm{T}}/n$  の対称性から,ilde W の対称性が従う.ところで, $(I_n-1_n1_n^{\mathrm{T}}/n)1_n$  はゼロベクトルなので  $ilde W1_n$  もゼロベクトルである.つまり,ilde W の行和は全て 0 である.3 節の議論に従うと, $1_n$  に直交する固有ベクトル  $ilde h_i$  (  $i=1,\dots,n-1$ ) 及び対応する固有値  $ilde \lambda_i$  により,ilde W のスペクトル分解は,

$$\tilde{\boldsymbol{W}} = \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\lambda}_i \tilde{\boldsymbol{h}}_i \tilde{\boldsymbol{h}}_i^{\mathrm{T}} \tag{35}$$

と書ける. $\tilde{\lambda}_1,\dots,\tilde{\lambda}_{n-1}$  が降順に並ぶという仮定の下で,定理  $3.2(\mathrm{A})$  より

$$\tilde{\lambda}_{n-1} \le \frac{\tilde{\mathbf{y}}^{\mathrm{T}} \mathbf{W} \tilde{\mathbf{y}}}{\tilde{\mathbf{y}}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{y}}} \le \tilde{\lambda}_{1} \tag{36}$$

を得る.(36) における等号成立は, $\tilde{\lambda}_1>\tilde{\lambda}_2\geq\cdots\geq\tilde{\lambda}_{n-2}>\tilde{\lambda}_{n-1}$  なる仮定のもとで

$$rac{ ilde{oldsymbol{y}}^{ ext{T}}oldsymbol{W} ilde{oldsymbol{y}}}{ ilde{oldsymbol{y}}^{ ext{T}}oldsymbol{ ilde{oldsymbol{y}}}} = egin{cases} ilde{\lambda}_1 & oldsymbol{y} = c_1 ilde{oldsymbol{h}}_1 + c_n \mathbf{1}_n & c_1 ext{td} \ 0 \ ext{T} \ ext{T} \ ilde{oldsymbol{v}} \in \mathcal{S}_n \ ext{td} \ e$$

で与えられる.次の関係

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - n\bar{y}^{2} = \|\boldsymbol{y} - \bar{y}\mathbf{1}_{n}\|^{2} = \|\tilde{\boldsymbol{y}}\|^{2}$$

に注意すると ,(36) とモランの I 統計量の定義より , 次の定理を得る .

定理 4.1. モランの *I* 統計量のレンジは

$$\frac{n\tilde{\lambda}_{n-1}}{\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}} \le I \le \frac{n\tilde{\lambda}_1}{\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}}$$

$$(37)$$

である.等号成立は,0 でない任意の実数  $c_1, c_{n-1}$  及び任意の実数  $c_n$  に対して,

$$I = \begin{cases} n\tilde{\lambda}_1 / \{\sum_{i,j=1}^n w_{ij}\} & \mathbf{y} = c_1 \tilde{\mathbf{h}}_1 + c_n \mathbf{1}_n \\ n\tilde{\lambda}_{n-1} / \{\sum_{i,j=1}^n w_{ij}\} & \mathbf{y} = c_{n-1} \tilde{\mathbf{h}}_{n-1} + c_n \mathbf{1}_n \end{cases}$$
(38)

で与えられる.

Remark~4.1. 定理 4.1~のレンジ (37) は,モランの I 統計量の分子の二次形式  $\tilde{y}^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }W\tilde{y}$  の  $\tilde{W}$  による表現 (33) に基づいており,本質的には de Jong et al. (1984) で与えられた.しかし,(37) における等号条件 (38) が必ずしも明確に与えられなかった.

$n \backslash q$	1		2	2		3	
	下限	上限	下限	上限	下限	上限	
10	-1.066	0.935	-0.541	0.831	-0.482	0.746	
20	-1.041	1.006	-0.526	0.981	-0.457	0.955	
30	-1.029	1.013	-0.519	1.005	-0.449	0.995	
40	-1.023	1.014	-0.514	1.011	-0.444	1.006	
50	-1.018	1.013	-0.512	1.012	-0.441	1.010	

表 1 モランの I 統計量の達成可能な上限と下限

例 4.1. 簡単のため直線上に等間隔に地点  $s_1,\dots,s_n$  が並んでいる状況を想定する.二地点  $s_i,s_j$  間の空間重みが

$$w_{ij} = \begin{cases} 2^{-|i-j|+1} & 1 \le |i-j| \le q \\ 0 & i = j, \ |i-j| > q \end{cases}$$
(39)

で与えられているとする.このとき,n と q のいくつかの組み合わせに対して,定理 4.1 で示されたモランの I 統計量の達成可能な上限下限が表 1 で示される.どの組み合わせに対しても,レンジは [-1,1] に一致せず,絶対値 |I| が 1 を超える場合や絶対値が 0.5 に達しない場合があることが分かる.従って,モランの I 統計量の値をピアソンの相関係数のように解釈することは不可能である.

定理 4.1 においては,空間重み偏差行列  $\tilde{W}$  の n 個の固有値  $\tilde{\lambda}_1,\dots,\tilde{\lambda}_n$  のうち, $\tilde{\lambda}_n=0$  のみを考慮しており,他の n-1 個についてはただ降順に並べているだけであった.表 1 からは, $\tilde{\lambda}_1>0,\tilde{\lambda}_{n-1}<0$ ,つまり  $\tilde{W}$  の不定値性が成り立つことが示唆される.以下では, $\tilde{\lambda}_1,\tilde{\lambda}_{n-1}$  の符号について検討する.

まず固有値とトレースに関する以下の事実に注意する.

- $\bullet$  n 個の固有値の和と n 個の対角成分の和 (トレース) は等しい.
- ullet AB と BA が正方行列ならば, $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$ .
- ullet A と B が正方行列ならば, ${
  m tr}(A-B)={
  m tr}A-{
  m tr}B$ .

これらの事実及び  $(I-1_n1_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}/n)$  のべき等性を用いると, $\hat{W}$  のトレースについて,

$$\operatorname{tr} \tilde{\boldsymbol{W}} = \operatorname{tr}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)\boldsymbol{W}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)$$

$$= \operatorname{tr} \boldsymbol{W}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)$$

$$= \operatorname{tr} \boldsymbol{W}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_{n}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}/n)$$

$$= \operatorname{tr} \boldsymbol{W} - \operatorname{tr}\boldsymbol{1}_{n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{1}_{n}/n$$

$$= \sum_{i=1}^{n} w_{ii} - \sum_{i=i=1}^{n} w_{ij}/n$$

が従う.空間重み行列 W はその対角成分が 0 であり,非対角成分が非負であるような行列なので, $\operatorname{tr} \tilde{W} < 0$  が従う.ここで  $\operatorname{tr} \tilde{W} = \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\lambda}_i$  より, $\tilde{\lambda}_{n-1} < 0$  が導かれる.一方, $\tilde{\lambda}_1 > 0$  は「W の対角成分が 0,非対角成分が非負」という条件からは導けない.実は,非対角成分が全て 1 である空間重み行列  $W = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^{\mathrm{T}} - \mathbf{I}$  について,

$$\tilde{\boldsymbol{W}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}} / n) (\boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}} - \boldsymbol{I}) (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}} / n) = -(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}} / n)$$

となり,  $(I-\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^{\scriptscriptstyle{\mathrm{T}}}/n)$  はランクが n-1 のべき等行列であることから

$$\tilde{\lambda}_1 = \cdots = \tilde{\lambda}_{n-1} = -1$$

が従う.つまり, $ilde{W}$  は非正定値行列であり,どのような y についてもモランの I 統計量は負値を取る.より正確には,どのような y についても

$$I = -1$$

が従う.

非対角成分が全て 1 である空間重み行列  $W=\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^{ \mathrm{\scriptscriptstyle T} }-I$  に対して,空間重み偏差行列  $\tilde W$  が非正定値行列 になるという事実は非対角成分のばらつきの小ささが非正定値性を導くと解釈できる.例えば,0< a< 1 として区間 (1-a,1+a) の一様分布から n(n-1) 個の乱数を発生させる.それを  $w_{ij}$  (  $i\neq j$  ) に割り当てて,対応する  $\tilde W$ 

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}/n) \left\{ (\boldsymbol{W} + \boldsymbol{W}^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}})/2 \right\} (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}/n)$$

の非正定値性,不定値性を調べる.小さい a については非正定値性を保つが,n=25 の場合 0.3,n=50 の場合 0.2,n=75 の場合 0.14,n=25 の場合 0.12 あたりを境として,大きな a については不定値性に移行することが分かる.

ただし,上で見た非対角成分が全て 1 である行列や, $w_{ij}$  のばらつきが小さい行列は,空間重み行列として不自然だと考えられる.実データにおいて距離や隣接関係から構成される空間重み行列で,その空間重み偏差行列が非正定値行列になることは少ないはずである.付録 A 節では,空間重み偏差行列が不定値行列になるための十分条件を与える.非対角要素の中にいくつか 0 があれば,不定値行列になりやすいことが示唆される.また次節では, $\tilde{W}$  が不定値性を持つという仮定の下で,モランの修正型 I 統計量を提案する.

### 5 モランの修正型 / 統計量

3 節および 4 節の議論を踏まえ, $ilde{W}$  の不定値性,より具体的に

$$\tilde{\lambda}_1 > \tilde{\lambda}_2 \ge \dots \ge \tilde{\lambda}_n > 0 > \tilde{\lambda}_{n-m} \ge \dots \ge \tilde{\lambda}_{n-2} > \tilde{\lambda}_{n-1}$$

なる仮定の下でモランの I 統計量の修正版を与える . 4 節で見た通り , 式 (31) で与えられるモランの I 統計量の分子

$$\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} (y_i - \bar{y}) (y_j - \bar{y}) = \tilde{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} \tilde{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \tilde{\boldsymbol{W}} \boldsymbol{y}$$

$$\tag{40}$$

は,ピアソンの相関係数の分子に対応する適切な解釈を持つ.従って,(40) を適切に尺度調整することで [-1,1] の範囲に収め,また下限 -1 と上限 1 が達成可能としたい.そのためには定理 3.2(B) および (C) が有用である.

定理  $3.2(\mathrm{B})$  より,W のスペクトル分解 (35) において全ての固有値をその固有値の絶対値に置き換えた

$$ilde{m{W}}_{+} = \sum
olimits_{i=1}^{n-1} | ilde{\lambda}_i| ilde{m{h}}_i ilde{m{h}}_i^{ ext{ iny T}}$$

と定義する.このとき

$$I_{\text{M1}} = \frac{\boldsymbol{y}^{\text{T}} \tilde{\boldsymbol{W}} \boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^{\text{T}} \tilde{\boldsymbol{W}}_{+} \boldsymbol{y}} \tag{41}$$

をモランの修正型 I 統計量  $\mathrm{type}$ -1 として提案する.定理  $3.2(\mathrm{B})$  より, $I_{\mathrm{M1}}$  はレンジ [-1,1] を持ち,最小値 -1 と最大値 1 は達成可能である.等号  $|I_M|=1$  は一つ以上の非ゼロ要素を含む  $c_1,\dots,c_p$ ,また一つ以上の非ゼロ要素を含む  $c_n,\dots,c_{n-1}$  からなる任意の  $c_1,\dots,c_{n-1}$  及び任意の実数  $c_n$  に対して,

$$I_{\text{M1}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n-m-1} c_i \tilde{\mathbf{h}}_i + c_n \mathbf{1}_n \\ -1 & \mathbf{y} = \sum_{i=p+1}^{n-1} c_i \tilde{\mathbf{h}}_i + c_n \mathbf{1}_n \end{cases}$$
(42)

で与えられる.

モランの修正型 I 統計量  $\mathrm{type} ext{-}2$  は , モランの I 統計量の形を出来るだけ保存したものであり

$$I_{\text{M2}} = \frac{\tilde{\boldsymbol{y}}^{\text{T}} \boldsymbol{W} \tilde{\boldsymbol{y}}}{\tilde{\boldsymbol{y}}^{\text{T}} \tilde{\boldsymbol{y}}} \left\{ (1/\tilde{\lambda}_1) I_{[\tilde{\boldsymbol{y}}^{\text{T}} \boldsymbol{W} \tilde{\boldsymbol{y}} \ge 0]}(\tilde{\boldsymbol{y}}) + (1/|\tilde{\lambda}_{n-1}|) I_{[\tilde{\boldsymbol{y}}^{\text{T}} \boldsymbol{W} \tilde{\boldsymbol{y}} < 0]}(\tilde{\boldsymbol{y}}) \right\}$$
(43)

で与えられる.定理  $3.2({\rm C})$  より, $I_{\rm M2}$  はレンジ [-1,1] を持ち,最小値 -1 と最大値 1 は達成可能である.0 でない任意の実数  $c_1,c_{n-1}$  と任意の実数  $c_n$  に対して

$$I_{M2} = \begin{cases} 1 & \mathbf{y} = c_1 \tilde{\mathbf{h}}_1 + c_n \mathbf{1}_n \\ -1 & \mathbf{y} = c_{n-1} \tilde{\mathbf{h}}_{n-1} + c_n \mathbf{1}_n \end{cases}$$
(44)

のように等号が成立する.

Remark~5.1. モランの修正型 I 統計量  $I_{\rm M1},I_{\rm M2}$  は,オリジナルの I 統計量よりも複雑な形となるため,理論的に  $I_{\rm M1},I_{\rm M2}$  の期待値,分散を導出することは難しい.このため,空間無相関を帰無仮説とする検定において  $z\text{-score}~\{I-E(I)\}/\sqrt{{\rm var}(I)}$  に基づく検定統計量は提案できない.しかし,計算機の発達した現代においては,並び替え検定は n が多少大きい場合であっても実行できる.興味深いことに, $I_{\rm M2}$  は分子の符号で尺度調整の尺度を変えただけであり,n! 通りの並び替えに対するオリジナルの I 統計量による順位を保存する.このため,検定の結果は両者で同じである.

## 付録 A 空間重み偏差行列 $ilde{W}$ が不定値行列であるための十分条件

対称な空間重み行列 W に対して,空間重み偏差行列  $ilde{W}$  は

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}}/n) \boldsymbol{W} (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}}/n) = \boldsymbol{W} - \boldsymbol{1}_n \bar{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{T}} - \bar{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}} + \bar{\bar{\boldsymbol{w}}} \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}}$$

で与えられる.ここで,

$$\bar{\boldsymbol{w}} = \mathbf{1}_n^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} / n = (\bar{w}_{1}, \dots, \bar{w}_{n})^{\mathrm{T}}, \ \bar{w}_{i} = \sum_{j=1}^{n} w_{ij} / n, \ \bar{\bar{w}} = \mathbf{1}_n^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} \mathbf{1}_n / n^2 = \sum_{i,j}^{n} w_{ij} / n^2$$

である.従って,(i,j) 成分は

$$w_{ij} - \bar{w}_{i\cdot} - \bar{w}_{j\cdot} + \bar{\bar{w}}$$

であり,特にi番目の対角成分は

$$-2\bar{w}_{i}$$
.  $+\bar{\bar{w}}$ 

である.以下の定理では,空間重み偏差行列 ilde W が不定値行列であるための十分条件を与える.一番理解しやすい系として, $w_{ij}=0$  で  $\bar w_{i\cdot} \neq \bar w_{j\cdot}$  となる (i,j) の組があれば,ilde W は不定値行列であることが得られる.

定理 付録  ${f A.1.}$  (A)  $ar w_i$  < ar w/2 である i が存在すれば ,  $\hat W$  は不定値行列である .

(B) 全てのi について $\bar{w}_i \geq \bar{w}/2$  を仮定する.このとき,

$$\sqrt{w_{ij}} < \left| \sqrt{\bar{w}_{i\cdot} - \bar{\bar{w}}/2} - \sqrt{\bar{w}_{j\cdot} - \bar{\bar{w}}/2} \right|, \quad \sharp \hbar \text{td} \quad \sqrt{w_{ij}} > \sqrt{\bar{w}_{i\cdot} - \bar{\bar{w}}/2} + \sqrt{\bar{w}_{j\cdot} - \bar{\bar{w}}/2}$$
 (45)

を満たす $w_{ij}$ が存在すれば, $ilde{m{W}}$ は不定値行列である.

証明. ilde W が負の固有値を持つことは保証されているので,ilde W が不定値行列であることを示すためには,ilde W の二次形式が正になるような一つのベクトルを挙げれば良い.まず,i 番目の成分だけが 1 で他は 0 である n 次元ベクトル e に対し,二次形式は

$$\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{W}}\boldsymbol{e} = -2\bar{w}_{i\cdot} + \bar{\bar{w}}$$

で与えられる $.-2\bar{w}_{i\cdot}+\bar{\bar{w}}>0$ ならば, $\tilde{W}$ の不定値性が従う.

次に,i 番目の成分が u,j 番目の成分が 1,他の成分が 0 であるようなベクトル f に対する二次形式を考える. $s_i=\bar{w}_i$ . $-\bar{w}/2$  とおいたとき,(i,i) 成分,(i,j) 成分,(j,j) 成分は,それぞれ  $-2s_i$ , $w_{ij}-s_i-s_j$ , $-2s_j$  で与えられる.仮定より, $s_i>0$ , $s_j>0$  である.従って,二次形式は

$$f^{\mathsf{T}}\tilde{\boldsymbol{W}}f = 2\left\{-s_{i}u^{2} + (w_{ij} - s_{i} - s_{j})u - s_{j}\right\}$$

$$= -2s_{i}\left(u - \frac{w_{ij} - s_{i} - s_{j}}{2s_{i}}\right)^{2} + \frac{(w_{ij} - s_{i} - s_{j})^{2}}{2s_{i}} - 2s_{j}$$

$$= -2s_{i}\left(u - \frac{w_{ij} - s_{i} - s_{j}}{2s_{i}}\right)^{2} + \frac{\{w_{ij} - (\sqrt{s_{i}} - \sqrt{s_{j}})^{2}\}\{w_{ij} - (\sqrt{s_{i}} + \sqrt{s_{j}})^{2}\}}{2s_{i}}$$

であり, $w_{ij}$  が (45) を満たせば, $u=(w_{ij}-s_i-s_j)/s_i$  で与えられる最大値が正となる.  $\hfill\Box$ 

## 参考文献

Cliff, Andrew D. and J. Keith Ord (1981) Spatial processes: models & applications: Pion Ltd., London, pp.vii+266.

古谷知之(2011) 『Rによる空間データの統計分析』,統計科学のプラクティス,朝倉書店.

Goodchild, Michael F. (1988) *Spatial Autocorrelation*, Vol. 47 of Concepts and Techniques in Modern Geography: Norwich, Geobooks.

de Jong, P., C. Sprenger, and F. van Veen (1984) "On Extreme Values of Moran's I and Geary's c," Geographical Analysis, Vol. 16, pp. 17–24.

瀬谷創・堤盛人 (2014) 『空間統計学: 自然科学から人文・社会科学まで』, 統計ライブラリー , 朝倉書店 . 谷村晋 (2010) 『地理空間データ分析』, R で学ぶデータサイエンス , 共立出版 .

Waller, Lance A. and Carol A. Gotway (2004) Applied spatial statistics for public health data, Wiley Series in Probability and Statistics: Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], Hoboken, NJ, pp.xviii+494.