

Monte-Carlo-Simulation für Regularisierungsparameter

Karl-Rudolf Koch

Zusammenfassung

Zur Regularisierung inverser Probleme wird die Bestimmung des Regularisierungsparameters aus Varianzkomponenten mit der Bestimmung aus der Kreuzvalidierung mit Hilfe der Konfidenzintervalle verglichen. Das Konfidenzintervall für den Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten ergibt sich mit seiner Posteriori-Verteilung der Bayes-Statistik. Für die Kreuzvalidierung wird das Konfidenzintervall durch eine Monte-Carlo-Simulation abgeleitet. Bei einem einfachen Beispiel der Fortsetzung der Schwere nach unten ergaben sich keine signifikanten Unterschiede zwischen den Regularisierungsparametern aus beiden Methoden.

Summary

In order to regularize inverse problems, the determination of the regularization parameter from variance components is compared with the determination from the cross-validation by means of confidence intervals. The confidence interval for the regularization parameter from variance components follows by its posterior distribution of Bayesian statistics. The confidence interval for the cross-validation is derived from a Monte-Carlo simulation. No significant differences between the regularization parameters from both methods were obtained from a simple example of the downward continuation of gravity.

1 Einleitung

Die Bayes-Statistik besitzt gegenüber der traditionellen Statistik den Vorzug, dass ausgehend vom Bayes-Theorem die Posteriori-Verteilung für die unbekannten Parameter erhalten wird, mit der man die Parameter schätzen, Konfidenzregionen für die unbekannten Parameter festlegen und auch Hypothesen für die Parameter prüfen kann. So lassen sich zum Beispiel Konfidenzbereiche für Parameter aus robusten Schätzungen angeben (Koch 2000b). Für das lineare Modell, das überwiegend in der Analyse geodätisch relevanter Daten angewendet wird, sind die Ergebnisse der Bayes-Statistik und der traditionellen Statistik identisch, siehe zum Beispiel Koch (2000a, S. 85). Für die Anwendung der Bayes-Statistik benötigt man die funktionale Beziehung zwischen den unbekannten Parametern und den Beobachtungen, um nach Anwendung des Bayes-Theorems die Posteriori-Dichte für die unbekannten Parameter zu erhalten. Diese funktionale Beziehung ist aber nicht immer angebbbar, wie im Folgenden ausgeführt wird.

Die Satellitenmission CHAMP (GFZ 2000) mit ihren GPS-Messungen und GRACE (JPL 1999) mit ihren Satellit-zu-Satellit-Beobachtungen sowie die zukünftige Mission GOCE (ESA 1999) mit ihren Gradiometer-Messungen werden die Kenntnis über das Schwerfeld der Erde erheblich verbessern. Eine große Anzahl unbekann-

ter Parameter für das Schwerfeld, zum Beispiel die Koeffizienten einer Entwicklung in Kugelfunktionen, sind zu bestimmen. Da das Geopotential aus Messungen in Höhe der Satelliten ermittelt wird, liegt ein Inversionsproblem vor, das regularisiert werden muss, denn die Normalgleichungssysteme für die Lösungen sind schlecht konditioniert.

In der Geophysik hat man während der vergangenen Jahre häufig mit der Kreuzvalidierung (im Englischen cross-validation) von Wahba (1977) regularisiert, siehe auch Craven und Wahba (1979) und Golub et al. (1979). Diese Methode wurde auch von Kusche und Klees (2001) zur Regularisierung der Schwerfeldbestimmung aus simulierten Gradiometerbeobachtungen für GOCE benutzt. Da bei Schwerfeldbestimmungen aus Satellit-zu-Satellit-Beobachtungen von GRACE, aus Gradiometermessungen von GOCE und GPS-Beobachtungen von CHAMP die Gewichtsverhältnisse der verschiedenen Messungen festgelegt werden müssen, wurde von Koch und Kusche (2002) die Bestimmung des Regularisierungsparameters und der Gewichtsverhältnisse verschiedener Beobachtungstypen aus Varianzkomponenten vorgeschlagen. Mit Hilfe der Bayes-Statistik konnte die Verteilung des Regularisierungsparameters und der Gewichtsverhältnisse abgeleitet werden, so dass diese unbekannten Größen nicht nur geschätzt werden können, sondern sich auch Konfidenzintervalle angeben lassen oder Hypothesentests durchführbar sind.

Um sich für ein Regularisierungsverfahren zu entscheiden, muss nicht nur der Schätzwert des Regularisierungsparameters aus Varianzkomponenten mit dem aus der Kreuzvalidierung verglichen werden, auch die Vertrauensintervalle für die Regularisierungsparameter sollten zum Vergleich herangezogen werden. Bei der Kreuzvalidierung sucht man das Minimum einer Funktion des Regularisierungsparameters, in die die quadratische Form der Residuen der Beobachtungen und die Spur der inversen Normalgleichungsmatrix eingehen. Eine explizite funktionale Beziehung, die dieses Minimum ausdrückt, konnte nicht angegeben werden, so dass mit der Bayes-Statistik das Konfidenzintervall für den Regularisierungsparameter aus der Kreuzvalidierung nicht abzuleiten ist. Im Folgenden soll daher die Monte-Carlo-Simulation zur Bestimmung des Konfidenzintervalls angewendet werden. Sie ist gebräuchlich bei der Simulation allgemeiner Systeme, insbesondere physikalischer Systeme, aber auch stochastischer Systeme, siehe zum Beispiel Frühwirth und Regler (1983), Bauwens und Rasquero (1993) und MacKeown (1997). Hier wird zusätzlich die Bayes-Statistik genutzt, um Hinweise zu erhalten, wie eine Monte-Carlo-Simulation eines stochastischen Modells anzusetzen ist.

Im folgenden Abschnitt wird auf eine solche Simulation eingegangen. Im dritten Abschnitt werden die Formeln

zusammengestellt, mit denen Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten und aus der Kreuzvalidierung geschätzt werden. Im vierten Abschnitt befindet sich ein einfaches Beispiel für die Fortsetzung der Schwere nach unten. Der letzte Abschnitt enthält die Schlussbemerkung.

2 Monte-Carlo-Simulation eines stochastischen Modells

Zur Ableitung einer Monte-Carlo-Simulation wird von dem linearen Modell

$$X\beta = E(y|\beta) \quad \text{mit} \quad D(y) = \sigma^2 P^{-1} \quad (2.1)$$

ausgegangen, das, falls erforderlich, durch Linearisierung aus einem nicht linearen Modell erhalten wird. In ihm bedeuten entsprechend der Definition der Bayes-Statistik β ein $u \times 1$ Zufallsvektor unbekannter Parameter, y ein $n \times 1$ Zufallsvektor von Beobachtungen, X eine $n \times u$ Matrix gegebener Koeffizienten, $D(y) = \sigma^2 P^{-1}$ die $n \times n$ Kovarianzmatrix der Beobachtungen, σ^2 der Varianzfaktor oder die Varianz der Gewichtseinheit und P die bekannte, positiv definite Gewichtsmatrix der Beobachtungen. Der Varianzfaktor σ^2 wird als bekannt vorausgesetzt, wie im Folgenden noch erläutert wird. Zur Vereinfachung der Ableitungen soll die Koeffizientenmatrix X vollen Spaltenrang $\text{rg} X = u$ besitzen.

Aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes lassen sich die Beobachtungen als normalverteilt annehmen, so dass man wegen (2.1) erhält,

$$y|\beta \sim N(X\beta, \sigma^2 P^{-1}). \quad (2.2)$$

Besitzt man keine Vorinformation über die unbekannten Parameter β , führt man also eine nichtinformative Priori-Dichte ein, dann ergibt sich die Posteriori-Dichte für den Vektor β der unbekannten Parameter als Normalverteilung zu, siehe zum Beispiel Koch (2000a, S. 90),

$$\beta|y \sim N\left((X'PX)^{-1}X'Py, \sigma^2(X'PX)^{-1}\right), \quad (2.3)$$

in der y jetzt den gegebenen Vektor der Messungen bedeutet. Mit dieser Posteriori-Dichte für β erhält man die Bayes-Schätzung $\hat{\beta}_B$ als Erwartungswert von β aus

$$\hat{\beta}_B = (X'PX)^{-1}X'Py. \quad (2.4)$$

Sie ist identisch mit der Schätzung nach der Methode der kleinsten Quadrate. Mit der Posteriori-Dichte (2.3) für β folgen auch die Konfidenzregion und die Hypothesentests für β .

Es kann nun der Fall auftreten, und ein solcher wird im folgenden Abschnitt behandelt, dass man eine Vorschrift besitzt, die die Beobachtungen y mit

$$y \rightarrow \hat{\beta}, \quad (2.5)$$

in die Schätzung $\hat{\beta}$ der unbekannten Parameter β überführt, aus der man aber eine funktionale Beziehung zwischen y und β auf einfache Weise nicht angeben kann. Die Verteilung der Beobachtungen y entsprechend (2.2) lässt sich dann nicht definieren und das Bayes-Theorem

nicht anwenden, so dass keine Posteriori-Verteilung vorliegt, die auf die Schätzung führt. Ausgehend von den Messungen lassen sich jedoch Beobachtungen generieren, die nach (2.5) Zufallswerte für die unbekannten Parameter ergeben, aus denen die Verteilung der Parameter gewonnen wird. Dies entspricht einer Monte-Carlo-Simulation des zugrunde liegenden stochastischen Systems, was zunächst am linearen Modell gezeigt wird.

Wie bereits im Zusammenhang mit (2.2) erwähnt, seien die Beobachtungen normalverteilt. Mit dem gegebenen Vektor y der Messungen und der Kovarianzmatrix $\sigma^2 P^{-1}$ lassen sich dann Beobachtungen y_g generieren aus

$$y_g \sim N(y, \sigma^2 P^{-1}). \quad (2.6)$$

Die Zufallswerte β_g für β werden aus y_g entsprechend (2.4) und (2.5) aus der linearen Transformation erhalten

$$\beta_g = (X'PX)^{-1}X'Py_g. \quad (2.7)$$

Für die Verteilung von β_g erhält man dann aufgrund des Satzes über die Verteilung linear transformierter und normalverteilter Zufallsvariablen, siehe zum Beispiel Koch (2000a, S. 54)

$$\beta_g \sim N\left((X'PX)^{-1}X'Py, \sigma^2(X'PX)^{-1}\right). \quad (2.8)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit der Verteilung (2.3) überein, die im linearen Modell aufgrund des Bayes-Theorems erhalten wird. Zufallswerte für β brauchen also nicht aus (2.3) generiert zu werden, sondern können mit den Zufallswerten y_g aus (2.6) über (2.7) erhalten werden.

Beispiel: Durch n voneinander unabhängige Beobachtungen y_i mit $i \in \{1, \dots, n\}$, die identische Varianzen σ^2 besitzen, sei eine Größe s bestimmt. Die Beobachtungsgleichungen lauten daher, falls e_i die Fehler der Beobachtungen y_i bedeuten,

$$\begin{aligned} s &= y_1 + e_1 \quad \text{mit} \quad V(y_1) = \sigma^2 \\ s &= y_2 + e_2 \quad \text{mit} \quad V(y_2) = \sigma^2 \\ &\dots\dots\dots \\ s &= y_n + e_n \quad \text{mit} \quad V(y_n) = \sigma^2 \end{aligned} \quad (2.9)$$

Der Schätzwert $\hat{s}$ von s folgt mit

$$\hat{s} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (2.10)$$

Das Konfidenzintervall für s zum Konfidenzniveau $1 - \alpha$ ergibt sich zu, siehe zum Beispiel Koch (2000a, S. 93),

$$\begin{aligned} P\left(\hat{s} - \frac{\sigma}{\sqrt{n}}(\chi_{1-\alpha;1}^2)^{1/2} < s < \hat{s} + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}(\chi_{1-\alpha;1}^2)^{1/2}\right) \\ = 1 - \alpha, \end{aligned} \quad (2.11)$$

worin $\chi_{1-\alpha;1}^2$ das $1 - \alpha$ -Fraktile der χ^2 -Verteilung mit dem Freiheitsgrad 1 bedeutet.

Für ein Beispiel von sechs Beobachtungen und $\hat{s} = 10,00$ sowie $\sigma^2 = 0,36$ ergibt sich mit Hilfe des Fraktilwerts der χ^2 -Verteilung für ein Konfidenzniveau von $1 - \alpha = 0,95$ das Konfidenzintervall für s zu

$$P(9,520 < s < 10,480) = 0,95. \quad (2.12)$$

Mit (2.6) werden nun 1000mal sechs voneinander unabhängige Beobachtungen generiert und mit (2.10) dann 1000 Zufallswerte für s . Die Verteilung für s wird durch Zählen der Häufigkeiten in 1000 Intervallen innerhalb des Intervalls $[9,00; 11,00]$ bestimmt. Daraus folgt das Konfidenzintervall für s in guter Übereinstimmung mit (2.12) zu

$$P(9,518 < s < 10,500) = 0,95. \quad (2.13)$$

Verallgemeinert man diese Vorgehensweise im linearen Modell auf ein beliebiges stochastisches System, dann werden mit Hilfe der Messungen $\mathbf{y}$ Zufallswerte $\mathbf{y}_g$ für die Beobachtungen mit (2.6) generiert. Zufallswerte β_g für die unbekannten Parameter β erhält man entsprechend (2.5) aus der Vorschrift

$$\mathbf{y}_g \rightarrow \beta_g. \quad (2.14)$$

Aus ihnen ergibt sich dann die Verteilung für β , siehe zum Beispiel Koch (2000b), aus der die Schätzwerte der unbekannten Parameter, Konfidenzregionen oder Hypothesentests abgeleitet werden können. Die Streuung der nach (2.6) generierten Beobachtungen $\mathbf{y}_g$ überträgt sich nach (2.14) auf die Zufallswerte β_g für die unbekannten Parameter, aus denen dann die Verteilung der Parameter folgt. In (2.6) muss daher neben der Gewichtsmatrix $\mathbf{P}$ der Varianzfaktor σ^2 gegeben sein, da sonst eine Generierung nicht möglich ist. Im Gegensatz zu den linearen Modellen kann man nicht davon ausgehen, dass diese Vorgehensweise zu Verteilungen führt, die mit den Posteriori-Verteilungen für die unbekannten Parameter aus dem Bayes-Theorem identisch sind. Bei der Ableitung der Posteriori-Dichten für Varianzkomponenten zum Beispiel sind die Priori-Dichten keine Konstanten (Koch 1987). Die Ergebnisse können daher nur genähert übereinstimmen.

3 Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten und Kreuzvalidierung

Die bekannte Tychonow-Regularisierung lässt sich als Bayes-Schätzung unter Vorinformation interpretieren. Führt man außerdem das lineare Modell mit unbekannten Varianzkomponenten ein, lässt sich der Regularisierungsparameter als Verhältnis zweier Varianzkomponenten darstellen (Koch and Kusche 2002). Im Folgenden wird nur ein Typ von Messungen $\mathbf{y}_1$ mit der zugehörigen Koeffizientenmatrix $\mathbf{X}_1$ und der Varianzkomponente σ_1^2 sowie die Vorinformation μ mit der Varianzkomponente σ_μ^2 benötigt. Das lineare Modell mit den beiden unbekannten Varianzkomponenten ergibt sich dann zu

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \beta = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 + \mathbf{e}_1 \\ \mu + \mathbf{e}_\mu \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad D\left(\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mu \end{bmatrix}\right) = \sigma_1^2 \mathbf{V}_1 + \sigma_\mu^2 \mathbf{V}_\mu \quad (3.1)$$

und

$$\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_1^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_\mu = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_\mu^{-1} \end{bmatrix}.$$

Das zugehörige Normalgleichungssystem lautet

$$\left(\frac{1}{\sigma_1^2} \mathbf{X}_1' \mathbf{P}_1 \mathbf{X}_1 + \frac{1}{\sigma_\mu^2} \mathbf{P}_\mu \right) \hat{\beta} = \frac{1}{\sigma_1^2} \mathbf{X}_1' \mathbf{P}_1 \mathbf{y}_1 + \frac{1}{\sigma_\mu^2} \mathbf{P}_\mu \mu. \quad (3.2)$$

Führt man den Regularisierungsparameter λ mit

$$\lambda = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_\mu^2} \quad (3.3)$$

ein und setzt $\mu = \mathbf{0}$, erhält man die Tychonow-Regularisierung

$$(\mathbf{X}_1' \mathbf{P}_1 \mathbf{X}_1 + \lambda \mathbf{P}_\mu) \hat{\beta} = \mathbf{X}_1' \mathbf{P}_1 \mathbf{y}_1. \quad (3.4)$$

Zur Vereinfachung des folgenden Beispiels wird noch $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_\mu = \mathbf{I}$ gesetzt, und man erhält

$$(\mathbf{X}_1' \mathbf{X}_1 + \lambda \mathbf{I}) \hat{\beta} = \mathbf{X}_1' \mathbf{y}_1. \quad (3.5)$$

Der Schätzwert $\hat{\lambda}$ des Regularisierungsparameters λ folgt mit den Schätzwerten $\hat{\sigma}_1^2$ und $\hat{\sigma}_\mu^2$ der Varianzkomponenten σ_1^2 und σ_μ^2 nach (3.3) aus (Koch and Kusche 2002)

$$\hat{\lambda} = \frac{\hat{\sigma}_1^2}{\hat{\sigma}_\mu^2} \quad (3.6)$$

mit

$$\hat{\sigma}_1^2 = (\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1)' (\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1) / r_1, \quad \hat{\sigma}_\mu^2 = \hat{\beta}' \hat{\beta} / r_\mu \quad (3.7)$$

und

$$\begin{aligned} r_1 &= n - u + \text{sp}(\hat{\lambda}(\mathbf{X}_1' \mathbf{X}_1 + \hat{\lambda} \mathbf{I})^{-1}), \\ r_\mu &= u - \text{sp}(\hat{\lambda}(\mathbf{X}_1' \mathbf{X}_1 + \hat{\lambda} \mathbf{I})^{-1}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die Varianzkomponentenschätzung erfolgt iterativ. Die Posteriori-Dichte für den Regularisierungsparameter λ ergibt sich aus

$$\begin{aligned} p(\lambda | \mathbf{y}_1, \mu) &\propto \left(\frac{1}{\lambda} \right)^{\frac{r_1}{2} + 1} \\ &\quad \left(\frac{1}{2\lambda} (\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1)' (\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1) + \frac{1}{2} \hat{\beta}' \hat{\beta} \right)^{-\frac{r_1 + r_\mu}{2}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

In einer Kreuz-Validierung wird der Regularisierungsparameter λ derart bestimmt, dass die Funktion $V(\lambda)$ mit

$$V(\lambda) = \frac{n(\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1)' (\mathbf{X}_1 \hat{\beta} - \mathbf{y}_1)}{[n - u + \text{sp}(\lambda(\mathbf{X}_1' \mathbf{X}_1 + \lambda \mathbf{I})^{-1})]} \quad (3.10)$$

minimal wird (Wahba 1977). Entsprechend (2.5) ergibt sich also eine Schätzung für λ aus $\mathbf{y}_1$, eine funktionale Beziehung zwischen λ und $\mathbf{y}_1$ lässt sich aber auf einfache Weise nicht angeben. Zur Ableitung des Konfidenzintervalls für den Regularisierungsparameter λ aus der Kreuzvalidierung wird daher die im vorangegangenen Abschnitt erläuterte Monte-Carlo-Simulation angewendet.

4 Fortsetzung der Schwere nach unten

Die Fortsetzung der Schwere nach unten ist ein inverses Problem und führt auf schlecht konditionierte Normalgleichungssysteme, die regularisiert werden müssen. Für ein einfaches Beispiel soll der Regularisierungsparameter einmal nach (3.6) aus Varianzkomponenten und zum anderen nach (3.10) aus der Kreuzvalidierung bestimmt werden. Mit Hilfe seiner Vertrauensintervalle ist außerdem festzustellen, ob signifikante Unterschiede in den Ergebnissen bestehen.

Es sei Δg eine Schwereanomalie in einem Punkt mit den Koordinaten x, y in einer Ebene E . Die Schwereanomalie Δg_h in einem Punkt mit Koordinaten x_h, y_h und der Höhe h über der Ebene E ergibt sich aus dem Poisson-Integral für die Ebene mit

$$\Delta g_h = \frac{h}{2\pi} \int \int_E \frac{\Delta g \, dx \, dy}{((x - x_h)^2 + (y - y_h)^2 + h^2)^{3/2}}. \quad (4.1)$$

Die Schwereanomalien Δg_{ij} seien nun konstant in Oberflächenelementen ΔO der Ebene und x_i und y_j die Koordinaten der Mittelpunkte von ΔO . Entsprechendes gelte für Δg_{hkl} mit den Koordinaten x_k und y_l . Näherungsweise gilt dann anstelle von (4.1)

$$\Delta g_{hkl} = \sum_i \sum_j a_{ij} \Delta g_{ij} \quad (4.2)$$

mit

$$a_{ij} = \frac{h \Delta O}{2\pi((x_i - x_k)^2 + (y_j - y_l)^2 + h^2)^{3/2}}.$$

Bei der Fortsetzung der Schwere nach unten ergeben sich die Schwereanomalien Δg_{ij} in der Ebene aus den in der Höhe h gemessenen Schwereanomalien Δg_{hkl} aus dem linearen Gleichungssystem

$$\sum_i \sum_j a_{ij} \Delta g_{ij} = \Delta g_{hkl} \quad (4.3)$$

oder bei einem überbestimmten Problem aus den Beobachtungsgleichungen

$$\sum_i \sum_j a_{ij} \Delta g_{ij} = \Delta g_{hkl} + e_{kl}, \quad (4.4)$$

in denen e_{kl} die Fehler der Messungen Δg_{hkl} bedeuten.

In einem einfachen Beispiel wurden aus 81 gemessenen Schwereanomalien Δg_{hkl} in einer Höhe von $h = 50$ in der Dimension $100m$ über einer Ebene 25 Schwereanomalien Δg_{ij} in der Ebene bestimmt, wobei die Oberflächenelemente $\Delta O = 10^2$ in der Dimension $(100m)^2$ betragen. Die Zentren der Oberflächenelemente für die gemessenen Schwereanomalien Δg_{hkl} liegen über den Zentren für die Schwereanomalien Δg_{ij} .

Aus der Substitution der Beobachtungsgleichung (3.1) in (2.1) ist ersichtlich, dass nach (2.6) Zufallswerte auch für die Vorinformation μ zu generieren sind. Hierzu müsste σ_μ^2 bekannt sein. Dann könnte aber der Regularisierungsparameter λ nach (3.3) bestimmt werden. Nur für

die Beobachtungen y_1 beziehungsweise Δg_{hkl} wurden daher Zufallswerte generiert. Bei der Schätzung von β beziehungsweise Δg_{ij} führt dies auf Verzerrungen, da nicht (2.4) sondern (3.5) angewendet wird. Die Verzerrung wirkt sich allerdings nur geringfügig auf die Variation des unbekannten Regularisierungsparameters λ aus, die für die Länge seines Konfidenzintervalls entscheidend ist. Kontrollrechnungen haben dies gezeigt.

Die Messungen Δg_{hkl} sollen voneinander unabhängig sein und eine Varianz von $\sigma^2 = 1$ besitzen. Sie wurden dadurch erhalten, dass zur konstanten Schwereanomalie 0,6 in der Dimension $mGal$ voneinander unabhängige Zufallswerte mit der Normalverteilung $N(0, 1)$ addiert wurden. Zu den so erhaltenen Schwereanomalien wurden dann noch einmal voneinander unabhängige Zufallswerte mit der Normalverteilung $N(0, 1)$ hinzugefügt, um Messungen Δg_{hkl} zu erhalten, die bezüglich ihrer Variation den für die Monte-Carlo-Simulation zu generierenden Beobachtungen entsprechen.

Als Schätzwert für den Regularisierungsparameter λ_v aus Varianzkomponenten, was durch den Index v angedeutet wird, ergab sich nach (3.6)

$$\hat{\lambda}_v = 2,6 \times 10^{-3}. \quad (4.5)$$

Zufallswerte für den Regularisierungsparameter mit der Dichte (3.9) wurden durch Generierungen der Gammaverteilung gewonnen (Koch and Kusche 2002). Die Anzahl der Generierungen wurde wie auch in den folgenden Berechnungen auf 1000 beschränkt, da sich die Konfidenzintervalle auch bei mehr Generierungen kaum ändern. Dichtewerte folgten aus einer Bestimmung der Häufigkeiten der Zufallswerte in 1000 kleinen Intervallen. Sie wurden durch logarithmische Skalierung bestimmt, da sich die Konfidenzintervalle über mehrere Zehnerpotenzen erstrecken. Das 95 % Konfidenzintervall für den Regularisierungsparameter λ_v aus Varianzkomponenten ergab sich zu

$$P(4 \times 10^{-5} < \lambda_v < 5 \times 10^{-2}) = 0,95. \quad (4.6)$$

Der Regularisierungsparameter λ_c aus der Kreuzvalidierung, was durch den Index c ausgedrückt wird, wurde mit den in der Höhe h gemessenen Schwereanomalien Δg_{hkl} nach (3.10) geschätzt, indem das Minimum von $V(\lambda)$ an 1000 Stellen in logarithmischer Skalierung gesucht wurde. Es ergab sich

$$\hat{\lambda}_c = 4,9 \times 10^{-3}. \quad (4.7)$$

Um das Vertrauensintervall für λ zu gewinnen, wurde die Monte-Carlo-Simulation angewendet. Nach (2.6) wurden daher Beobachtungen generiert, indem zu den Messungen Δg_{hkl} voneinander unabhängige Zufallswerte mit der Normalverteilung $N(0, 1)$ addiert wurden, da die Varianzen der Messungen, wie oben erwähnt, $\sigma^2 = 1$ betragen. Zufallswerte für λ_c ergaben sich entsprechend (2.14) aus dem Minimum von (3.10), wobei die Anzahl der Generierungen wieder auf 1000 beschränkt wurde. Durch Bestimmen der Häufigkeiten in 1000 logarithmisch skalierten Intervallen ergab sich das 95 % Konfidenzintervall

für den Regularisierungsparameter λ_c aus der Kreuzvalidierung zu

$$P(2 \times 10^{-6} < \lambda_c < 1 \times 10^{-2}) = 0,95. \quad (4.8)$$

Im Vergleich zu (4.6) ist dieses Konfidenzintervall etwas in Richtung kleinerer Werte für den Regularisierungsparameter verschoben. Bildet man das Mittel der 1000 Zufallswerte für λ_c , wendet man also den Erwartungswertschätzer $\hat{\lambda}_{cE}$ für λ_c an, ergibt sich

$$\hat{\lambda}_{cE} = 4,5 \times 10^{-3} \quad (4.9)$$

in guter Übereinstimmung mit (4.7).

Um zu entscheiden, ob die beiden Schätzungen (4.5) und (4.7) für den Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten und aus der Kreuzvalidierung sich signifikant unterscheiden, werden die beiden Hypothesen

$$H_0 : \lambda_v = 4,9 \times 10^{-3} \quad \text{gegen} \quad H_1 : \lambda_v \neq 4,9 \times 10^{-3} \quad (4.10)$$

und

$$H_0 : \lambda_c = 2,6 \times 10^{-3} \quad \text{gegen} \quad H_1 : \lambda_c \neq 2,6 \times 10^{-3} \quad (4.11)$$

mit Hilfe der Konfidenzintervalle für λ_v und λ_c getestet, siehe zum Beispiel Koch (2000a, S. 83). Da der Wert für λ_v aus (4.10) innerhalb des Konfidenzintervalls (4.6) liegt und der Wert für λ_c aus (4.11) innerhalb des Konfidenzintervalls (4.8), unterscheiden sich die beiden Regularisierungsparameter nicht signifikant. Für das gewählte Beispiel kann also der Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten oder aus einer Kreuzvalidierung bestimmt werden.

Um die Monte-Carlo-Simulation eines stochastischen Modells zu überprüfen, wurde sie für das Modell (3.1) mit unbekannten Varianzkomponenten angewendet, aus dem der Regularisierungsparameter λ nach (3.6) durch iterative, nicht lineare Schätzungen der Varianzkomponenten und seine Posteriori-Dichte (3.9) mit Hilfe der Bayes-Statistik folgt. Zu den 81 gemessenen Schwereanomalien Δg_{hkl} wurden also voneinander unabhängige Zufallswerte mit der Normalverteilung $N(0,1)$ addiert und diese Generierung 1000mal wiederholt. Die 1000 Zufallswerte für λ_v ergaben sich dann entsprechend (2.14) aus (3.6). Der Erwartungswertschätzer folgte als Mittel der Zufallswerte aus

$$\hat{\lambda}_{vE} = 4,0 \times 10^{-3}. \quad (4.12)$$

Diese Schätzung unterscheidet sich geringfügig von $\hat{\lambda}_v$ aus (4.5) und liegt innerhalb des Konfidenzintervalls (4.6). Das Konfidenzintervall für λ_v , das wie bei der Monte-Carlo-Simulation der Kreuzvalidierung bestimmt wurde, ergab sich zu

$$P = (1,7 \times 10^{-3} < \lambda_v < 8,6 \times 10^{-3}) = 0,95. \quad (4.13)$$

Es ist kürzer als das Intervall (4.6), so dass die Monte-Carlo-Simulation für den Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten eine genauere Bestimmung als die mit der Bayes-Statistik vorgibt. Der Schätzwert (4.5) liegt aber innerhalb des Konfidenzintervalls (4.13).

5 Schlussfolgerungen

Für das gewählte Beispiel der Fortsetzung der Schwere nach unten mit Hilfe des Poisson-Integrals wurde gezeigt, dass über die Varianzkomponenten oder über die Kreuzvalidierung der Regularisierungsparameter bestimmt werden kann. Da die Posteriori-Verteilung für den Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten mit (3.9) vorliegt, sind mit ihr Konfidenzintervalle und Hypothesentests sehr viel einfacher als mit der Monte-Carlo-Simulation für die Kreuzvalidierung zu gewinnen. Für Anwendungen dem gewählten Beispiel entsprechend wird man also den Regularisierungsparameter aus Varianzkomponenten berechnen.

Literatur

- Bauwens, L. and Rasquero, A.: Approximate HPD regions for testing residual autocorrelation using augmented regressions. In: Härdle, W. and Simar, L. (Eds.), *Computer Intensive Methods in Statistics*. Physica-Verlag, Heidelberg, S. 47–61, 1993.
- Craven, P. and Wahba, G.: Smoothing noisy data with spline functions. *Numer. Math.*, 31, S. 377–403, 1979.
- ESA: Gravity Field and Steady-State Ocean Circulation Mission. ESA Publications Division, Reports for Mission Selection, ESA SP-1233 (1), ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 1999.
- Frühwirth, R. and Regler, M.: *Monte-Carlo-Methoden*. B.I. Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1983.
- GFZ: CHAMP – Der Blick in das Innere der Erde. GeoForschungs Zentrum, Potsdam, 2000.
- Golub, G.H., Heath, M. and Wahba, G.: Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter. *Technometrics*, 21, S. 215–223, 1979.
- JPL: GRACE Science and Mission Requirements Document. Jet Propulsion Laboratory, 327–200, Rev. B, Pasadena, Cal., 1999.
- Koch, K.R.: Bayesian inference for variance components. *Manuscripta geodaeica*, 12, S. 309–313, 1987.
- Koch, K.R.: Einführung in die Bayes-Statistik. Springer, Berlin, 2000a.
- Koch, K.R.: Numerische Verfahren in der Bayes-Statistik. *zfv*, 125, S. 408–414, 2000b.
- Koch, K.R. und Kusche, J.: Regularization of geopotential determination from satellite data by variance components. *J. Geodesy*, 76, S. 259–268, 2002.
- Kusche, J. and Klees, R.: On the regularization problem in gradiometric data analysis from GOCE. In: *International GOCE User Workshop*. ESA Publications Division, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, S. 75–80, 2001.
- MacKeown, P.K.: *Stochastic Simulation in Physics*. Springer, Singapore, 1997.
- Wahba, G.: Practical approximate solutions to linear operator equations when the data are noisy. *SIAM J. Numer. Anal.*, 14, S. 651–667, 1977.

Anschrift des Autors

Prof. Dr.-Ing., Dr.-Ing. E.h. mult. Karl-Rudolf Koch (em.)
Institut für Theoretische Geodäsie
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Nussallee 17
53115 Bonn