DK 528.11

Ein Verfahren zur Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten

Von Dr.-Ing. W. FÖRSTNER, Stuttgart

1. Einführung

In jüngster Zeit hat man sich im Bereich der Ausgleichsrechnung intensiv mit der Bestimmung der Gewichte von Beobachtungen befaßt. Die Wahl der Gewichte beeinflußt in starkem Maß die Beurteilung des Erlebnisses von Ausgleichungen mit Hilfe statistischer Tests. Um möglichst viele Fehlereinflüsse erfassen zu können, wird die Genauigkeit der Beobachtungen bei all diesen Verfahren aus den Beobachtungsverbesserungen nach der Ausgleichung abgeleitet. Sie sind so gegenüber einfacheren Verfahren (Schätzung aus Meßreihen) aussagekräftiger, dafür aber aufwendiger. Obwohl schon HELMERT (1924) Methoden angegeben hat, wie man die für die Ausgleichung notwendigen Annahmen über die Genauigkeit der Beobachtungen prüfen und verbessern kann, sind die Verfahren erst mit den erweiterten Möglichkeiten der Rechentechnik für die Praxis anwendbar geworden.

Während HELMERT sein Verfahren heuristisch begründet, sind die jüngeren nach statistischen Kriterien konstruiert. Wohl als erster griff KUBIK (1967) das Problem im Bereich der Geodäsie auf und leitete einen Schätzer für Varianzen einzelner Beobachtungsgruppen mit Hilfe der Methode der maximalen Mutmaßlichkeit ab und erhielt ein Iterationsverfahren, das, im Gegensatz zu den meisten anderen, eine Konvergenzgeschwindigkeit zweiter Ordnung aufweist. Die Schätzer, die GRAFAREND und D'HONE (1978) und KOCH (1978) angeben, erhält man durch Minimieren der Varianz der quadratischen Form $\mathbf{v}'\Sigma^{-1}\mathbf{v}$. Sie bauen u. a. auf den Arbeiten von KLEFFE, PINCUS (1974, 1975) und RAO (1971) auf. KELM zeigte (1978), daß sich das Verfahren von HELMERT hier unmittelbar einordnen läßt.

Begrifflich werden dabei nicht die mittleren Fehler oder Gewichte von Beobachtungsgruppen geschätzt. Vielmehr denkt man sich die Varianz-Kovarianzmatrix $\Sigma = Q\sigma_0^2$ der Beobachtungen in additive Komponenten $\Sigma_j = Q_j\sigma_j$ zerlegt[1], die bis auf einen zu schätzenden Faktor σ_j von der Struktur her bekannt seien. Die Vorstellung entspricht ganz der bei der Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen, wenn man statt der Darstellung $E(\mathbf{l}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ nun $E(\mathbf{l}) = \sum_i \mathbf{a}_i x_i$ wählt, d. h. man sich die Beobachtungswerte (bzw. deren Erwartungswerte) aus Komponenten $\mathbf{a}_i x_i$ zusammengesetzt denkt, die bis auf den jeweils unbekannten Faktor x_i der Struktur her bekannt seien.

[1] Die Faktoren σ_j bezeichnen gemeinsam die Varianzfaktoren $\sigma_{0,k}^2$ als auch die Kovarianzfaktoren $\sigma_{0,kl}$. Der Übersichtlichkeit halber wurde auf das Quadrat 2 und den Index 0 verzichtet.

Mit dieser begrifflichen Erweiterung, die auch HELMERT für die Schätzung aus wahren Fehlern nutzte, ist man über die Schätzung der Gewichte von Beobachtungsgruppen hinaus in der Lage, Parameter von Fehlerfunktionen zu schätzen, etwa den konstanten und linearen Anteil bei einem streckenabhängigen Streckenfehler (vgl. KOCH (1978)), aber auch Anteile der Kovarianzmatrix, die durch systematische Fehler hervorgerufen werden. Mit den Verfahren der Varianzkomponentenschätzung lassen sich so auch Kovarianzmatrizen, die nicht Diagonalgestalt haben, und damit Kovarianzen schätzen.

Eine Ausdehnung der Methode auf die Schätzung von Varianz- *und* Kovarianzkomponenten (GRAFAREND, SCHAFFRIN (1979)) scheint von daher nicht notwendig, bietet aber u. U. rechnentechnische Vorteile. Statt der Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}$ wird dazu ihre Inverse $\mathbf{\Sigma}^{-1} = \mathbf{P}\sigma_0^{-2}$ in Komponenten $(\mathbf{\Sigma}^{-1})_j = \mathbf{P}_j \sigma_j^{-1}$ zerlegt[1] und vereinfacht die Berechnung der quadratischen Formen $\mathbf{v}'(\mathbf{\Sigma}^{-1})_j \mathbf{v}$.

Die Theorie, die diesen Verfahren zugrunde liegt, ist, soweit es die Punktschätzung angeht, vorhanden. Die Analogie der Modelle erlaubt es, die theoretischen Ergebnisse der Parameterschätzung in linearen Modellen auf die Varianzkomponentenschätzung zu übertragen (vgl. PUKELSHEIM (1977)). Man erhält so die Varianzen der Schätzwerte, so daß eine Beurteilung der Schätzung möglich ist. Die Theorie macht aber nur Aussagen über das Ergebnis der 1. Iteration. Dies ist für die Beurteilung von Schätzern, die aus einem Iterationsprozeß entstehen, unschädlich, da sich die meisten statistischen Eigenschaften auf den Konvergenzpunkt übertragen. Für den Vergleich verschiedener Schätzverfahren reicht dies aber nicht aus. So lassen sich z. B. keine Aussagen über die numerischen Eigenschaften machen, wie Konvergenzgeschwindigkeit oder Konvergenzradius, auch wenn die Verfahren zum selben Punkt konvergieren. Insofern können statistische Optimalitätseigenschaften, wie etwa minimale Varianz des Schätzers, eine untergeordnete Rolle spielen. Dann rücken aber suboptimale Verfahren ins Blickfeld, wenn sie andere Vorteile – z. B. numerische – bieten. Dazu gehören die Verfahren von EBNER (1972) und FÖRSTNER (1979a), die bei unkorrelierten Beobachtungen nur einen Bruchteil an Programmier- und Rechenaufwand benötigen.

Diese Arbeit soll nun zeigen, daß sich die Verfahren aus einer Grundformel nach demselben Prinzip entwickeln lassen und man damit das vom Verfasser angegebene Verfahren auf die Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten erweitern und an die bestehende Theorie anbinden kann.

2. Das Modell

Gegeben sei das lineare Modell

$$E(\mathbf{y}) = \sum_{i}^{u} \mathbf{a}_i x_i = \mathbf{A}\mathbf{x} \tag{1a}$$

bzw.

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{1b}$$

in Form von Standardproblem II (nach TIENSTRA). $\mathbf{y}$ sei der Vektor der n Beobachtungen, $\mathbf{A}$ die Design- oder Fehlergleichungsmatrix mit den u Spaltenvektoren $\mathbf{a}_i$ und $\mathbf{x} = (x_i)'$ der Vektor der u unbekannten Konstanten. Der Rang der Matrix $\mathbf{A}$ sei $rg(\mathbf{A}) = q \leq u$. Das Modell Gl. (1a) paßt i. allg. nicht zu den tatsächlichen Beobachtungswerten $\mathbf{y}$, der Vektor $\boldsymbol{\varepsilon}$ enthalte die Modellfehler.

Analog zum Funktionalmodell Gl. (1), das die Annahmen über den Erwartungswert $E(\mathbf{y})$ der Beobachtungen, also deren 1. Momente, beschreibt, sei das stochastische Modell formuliert:

$$\mathbf{\Sigma} = D(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{\Sigma}_j = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{Q}_j \sigma_j = \mathbf{Q}\sigma_0^2. \tag{2a}$$

Es enthält die Annahmen über die Dispersion $D(\mathbf{y})$ oder das zentrale 2. Moment der Beobachtungen. Die p Komponenten $\mathbf{\Sigma}_j = \mathbf{Q}_j \sigma_j$ seien bis auf die unbekannten Faktoren σ_j bekannt. Die $n \times n$ Matrizen $\mathbf{Q}_j$ legen die Struktur der Matrix $\mathbf{\Sigma}$ fest.

Beispielsweise würde man bei der Schätzung der Komponenten a^2 und $b^2 s_i^2$ der streckenabhängigen Varianz $\sigma_i^2 = a^2 + b^2 s_i^2$ von Strecken s_i zwei Diagonalmatrizen $\mathbf{Q}_j$ wählen: $\mathbf{Q}_1$ enthält als Elemente a^2 auf der Hauptdiagona-

len ($\mathbf{Q}_1 = a^2\mathbf{I}$, $\mathbf{I}$ Einheitsmatrix), $\mathbf{Q}_2$ enthält als Elemente für jede Strecke das Produkt $b^2 s_i^2$ auf der Hauptdiagonalen ($\mathbf{Q}_2 = \mathrm{diag}(b^2 s_i^2)$). Dabei stellen a^2 und b^2 Näherungswerte dar. Die Schätzungen $\hat{\sigma}_1$ und $\hat{\sigma}_2$ geben an, um welche Faktoren man a^2 bzw. b^2 ändern sollte, um bessere Näherungen zu erhalten.

Je nach der Struktur der Matrizen $\mathbf{Q}_j$ spricht man von Varianz- bzw. von Varianz- und Kovarianzkomponenten. Wenn alle $\mathbf{Q}_j$ symmetrische positiv semidefinite Matrizen sind, sich also als Produkt $\mathbf{U}_j\mathbf{U}_j'$ darstellen lassen, handelt es sich um Varianzkomponenten, im anderen Fall um Varianz- und Kovarianzkomponenten (vgl. GRAFAREND, SCHAFFRIN (1979), KOCH (1979)). Wie man im allgemeinen Fall die Matrizen $\mathbf{Q}_j$ wählen kann, soll hier nicht diskutiert werden.

Um Varianz- und Kovarianzkomponenten auf einfache Weise schätzen zu können, sehen wir statt der Aufteilung der Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}$ nach Gl. (2a) auch die Aufteilung ihrer Inversen vor:

$$\mathbf{\Sigma}^{-1} = \sum_{j=1}^{p} (\mathbf{\Sigma}^{-1})_j = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{P}_j \sigma_j^{-1} = \mathbf{P}\sigma_0^{-2}. \tag{2b}$$

Die Matrizen $\mathbf{P}_j$ seien vorgegeben, die Faktoren σ_j unbekannt.

Wegen $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ sind die Dispersionsmatrizen von $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\mathbf{y}$ identisch, so daß man prinzipiell Beobachtungs- und Modellfehler nicht trennen kann. Man kann daher nur dann aus den geschätzten Modellfehlern $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = -\mathbf{v}$, den üblichen Verbesserungen, auf die Genauigkeit der Beobachtungen schließen, wenn man die Voraussetzung $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$ als hinreichend gut erfüllt ansieht.

3. Schätzung der Unbekannten x und des Varianzfaktors σ

In bekannter Weise erhält man eine Schätzung $\hat{\mathbf{x}}$ für $\mathbf{x}$, wenn die Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}$ bekannt ist, aus $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{A})^{-}\mathbf{A}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{y}$. Die Schätzung $\hat{\mathbf{x}}$ ist nur dann erwartungstreu, wenn die Matrix $\mathbf{A}$ vollen Rang hat ($q = u$). Dann geht die verallgemeinerte Inverse $(.)^{-}$ in die normale Inverse $(.)^{-1}$ über.

Wir erhalten aber immer (d. h. auch bei Rangdefekt von $\mathbf{A}$) eine erwartungstreue Schätzung $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ für die Modellfehler $\boldsymbol{\varepsilon}$, aus der wir die Genauigkeit unserer Beobachtungen bestimmen wollen. Die Schätzung $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ist mit den Beobachtungen $\mathbf{y}$ und den wahren Modellfehlern $\boldsymbol{\varepsilon}$ auf einfache Weise verknüpft:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{D}\mathbf{y} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{3a}$$

mit der idempotenten Matrix

$$\mathbf{D} = \mathbf{I}_n - \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{A})^{-}\mathbf{A}'\mathbf{\Sigma}^{-1} = \mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P} \tag{3b}$$

($\mathbf{Q}_{vv}$ sei die Gewichtskoeffizientenmatrix der Verbesserungen $\mathbf{v} = -\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$). Die folgende elementare Ableitung für die bekannte erwartungstreue Schätzung des Varianzfaktors σ_0^2 liegt auch der Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten zugrunde, weshalb wir sie ausführlich darstellen.

Dazu bildet man den Erwartungswert der quadratischen Form $\Omega_0 = \varepsilon'\Sigma^{-1}\varepsilon$. Mit der Matrix $\mathbf{D}$ aus Gl. (3b) oder der symmetrischen Matrix

$$\mathbf{W} = \mathbf{D}'\mathbf{\Sigma}^{-1} = \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{D} \tag{3c}$$

(vgl. KOCH (1978)) ist

$$\Omega_0 = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y}'\mathbf{D}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{y} = \mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{\Sigma}\mathbf{W}\mathbf{y}. \tag{4}$$

Da die Spur eines Produkts zweier Matrizen gegen Vertauschung der Matrizen invariant ist, erhalten wir mit Gl. (3a) für den Erwartungswert von Ω_0

$$E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = E(\mathrm{sp}(\mathbf{y}'\mathbf{D}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{y})) = \mathrm{sp}(\mathbf{D}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{D}E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')) = \mathrm{sp}(\mathbf{D}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{\Sigma}) \tag{5a}$$

bzw.

$$E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = E(\mathrm{sp}(\mathbf{y}'\mathbf{W}\mathbf{\Sigma}\mathbf{W}\mathbf{y})) = \mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{\Sigma}\mathbf{W}E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')) = \mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{\Sigma}\mathbf{W}\mathbf{\Sigma}). \tag{5b}$$

Mit $\Sigma = \mathbf{Q}\sigma_0^2$ bzw. $\Sigma^{-1} = \mathbf{P}\sigma_0^{-2}$ wird daraus

$$E(\hat{\varepsilon}'\Sigma^{-1}\hat{\varepsilon}) \quad = \sigma_0^2 \operatorname{sp}(\mathbf{D}'\Sigma^{-1}\mathbf{D}\mathbf{Q}) = \sigma_0^2 \operatorname{sp}(\mathbf{W}\Sigma\mathbf{W}\mathbf{Q}) \tag{6a}$$

bzw.

$$\sigma_0^{-2} E(\hat{\varepsilon}'\mathbf{P}\hat{\varepsilon}) \; = \operatorname{sp}(\mathbf{D}'\Sigma^{-1}\mathbf{D}\Sigma) \quad = \operatorname{sp}(\mathbf{W}\Sigma\mathbf{W}\Sigma). \tag{6b}$$

Wenn man nun als Näherung $\sigma_0 = 1$ wählt, so erhält man für die Spuren aller Matrizenprodukte in Gl. (6) die Redundanz $r = n - rg(\mathbf{A}) = n - q$. Geht man schließlich vom Erwartungswert auf den Schätzwert über, so führen Gln. (6a) und (6b) in gleicher Weise auf die bekannte erwartungstreue Schätzung

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{\hat{\varepsilon}'\mathbf{P}\hat{\varepsilon}}{r}. \tag{7}$$

Um diese Schätzung zu erhalten, haben wir also in Gl. (5) eine der Matrizen Σ bzw. Σ^{-1} durch die in unserem Modell Gl. (2) getroffene Annahme $\mathbf{Q}\sigma_0^2$ bzw. $\mathbf{P}\sigma_0^{-2}$ ersetzt, nach σ_0^2 aufgelöst und sind vom theoretischen Wert $E(\Omega_0)$ auf den aktuellen Wert $\hat{\varepsilon}'\Sigma^{-1}\hat{\varepsilon} = \mathbf{v}'\mathbf{P}\mathbf{v}$ übergegangen.

4. Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten

Die Schätzung von Varianzfaktoren σ_j für einzelne Komponenten geschieht völlig analog. Dazu betrachten wir den Anteil $\bar{\omega}_j$ oder ω_j, den jede Komponente $\mathbf{P}_j\sigma_j^{-1}$ oder $\mathbf{Q}_j\sigma_j$ zur gewogenen Quadratsumme Ω_0 der Residuen beiträgt. Wir nutzen Gl. (4) auf zwei Weisen:

$$\Omega_0 = \sum_j \bar{\omega}_j = \mathbf{y}'\mathbf{D}'\left(\sum_j \Sigma^{-1})_j\right)\mathbf{D}\mathbf{y} = \sum_j \mathbf{y}'\mathbf{D}'(\Sigma^{-1})_j\mathbf{D}\mathbf{y} \tag{8a}$$

oder

$$\Omega_0 = \sum_j \omega_j = \mathbf{y}'\mathbf{W}\left(\sum_j \Sigma_j\right)\mathbf{W}\mathbf{y} \quad = \sum_j \mathbf{y}'\mathbf{W}\Sigma_j\mathbf{W}\mathbf{y}. \tag{8b}$$

Der Erwartungswert der Anteile $\bar{\omega}_j$ bzw. ω_j läßt sich leicht angeben (vgl. Gl. (6)):

$$E(\bar{\omega}_j) = E(\mathbf{y}'\mathbf{D}'(\Sigma^{-1})_j\mathbf{D}\mathbf{y}) = \operatorname{sp}(\mathbf{D}'(\Sigma^{-1})_j\mathbf{D}\Sigma); \; j = 1, \ldots, p \tag{9a}$$

oder

$$E(\omega_j) = E(\mathbf{y}'\mathbf{W}\Sigma_j\mathbf{W}\mathbf{y}) \quad = \operatorname{sp}(\mathbf{W}\Sigma_j\mathbf{W}\Sigma); \qquad j = 1, \ldots, p. \tag{9b}$$

Wir haben nun wieder zwei Möglichkeiten weiter zu verfahren: Entweder wir berücksichtigen die Struktur der Dispersionsmatrix Σ bzw. ihrer Inversen Σ^{-1} ein zweites Mal im rechten Teil der Gl. (9a, b); damit wird zum Ausdruck gebracht, daß der Anteil ω_j der j-ten Komponente auch von den übrigen über die Korrelation unter den Residuen beeinflußt wird. Oder wir vernachlässigen diesen Einfluß mit der Begründung, daß er in der Nähe des Konvergenzpunktes klein ist.

a) Im ersten Fall folgt aus Gl. (9) nach Übergang auf die Schätzwerte $\hat{\sigma}_k$

$$\bar{\omega}_j = \sum_{k=1}^{p} \operatorname{sp}(\mathbf{D}'(\Sigma^{-1})_j\mathbf{D}\mathbf{Q}_k)\,\hat{\sigma}_k; \; j = 1, \ldots, p \tag{10a}$$

oder

$$\omega_j = \sum_{k=1}^{p} \operatorname{sp}(\mathbf{W}\Sigma_j\mathbf{W}\mathbf{Q}_k)\,\hat{\sigma}_k; \qquad j = 1, \ldots, p. \tag{10b}$$

Beides sind Gleichungssysteme für die Varianz- und Kovarianzfaktoren $\hat{\sigma}_k$. Wenn wir von guten Näherungen für diese Faktoren ausgehen, d. h. $\sigma_k^{(\nu)} = 1$ wählen, können wir die $(\Sigma^{-1})_j$ durch $\mathbf{P}_j$ bzw. die

Σ_j durch $\mathbf{Q}_j$ ersetzen. Dann sind die Spuren der Matrizenprodukte bekannt. Wir können sie zu Matrizen

$$\mathbf{T} = (t_{jk}) = (\mathrm{sp}(\mathbf{D}'\mathbf{P}_j\mathbf{D}\mathbf{Q}_k)) \text{ bzw. } \mathbf{S} = (s_{jk}) = (\mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{Q}_j\mathbf{W}\mathbf{Q}_k))$$

zusammenfassen. Gln. (10) vereinfachen sich dann zunächst zu $\bar{\omega}_j = \sum_k t_{jk}\hat{\sigma}_k$ bzw. $\omega_j = \sum_k s_{jk}\hat{\sigma}_k$. Mit den Vektoren $\bar{\boldsymbol{\omega}} = (\bar{\omega}_j)$ bzw. $\boldsymbol{\omega} = (\omega_j)$ der aktuellen Anteile der Komponenten an Ω_0 und dem Vektor $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_k)$ der unbekannten Faktoren ergeben sich schließlich die folgenden Gleichungssysteme für $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$

$$\mathbf{T}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\boldsymbol{\omega}} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{S}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\omega}. \tag{11a, b}$$

Das Gleichungssystem Gl. (11b) stimmt mit dem von HELMERT überein. Es führt auf Schätzungen mit minimaler Varianz (KOCH (1978)). Das Gleichungssystem Gl. (11a) geben GRAFAREND und SCHAFFRIN (1979) für die Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten an.

b) Die zweite Möglichkeit, zu Schätzungen für die Varianz- und Kovarianzfaktoren zu kommen, besteht darin, in Gl. (9) Σ_j bzw. $(\Sigma^{-1})_j$ durch $\mathbf{Q}_j\sigma_j$ bzw. $\mathbf{P}_j\sigma_j^{-1}$ zu ersetzen und nach σ_j aufzulösen. Wir erhalten unmittelbar

$$\sigma_j^{-1}\mathrm{E}(\mathbf{y}'\mathbf{D}'\mathbf{P}_j\mathbf{D}\mathbf{y}) = \mathrm{sp}(\mathbf{D}'(\Sigma^{-1})_j\mathbf{D}\Sigma);\ j = 1, \ldots, p \tag{12a}$$

und mit $\mathbf{W}\Sigma\mathbf{W} = \mathbf{W}$

$$\mathrm{E}(\mathbf{y}'\mathbf{W}\Sigma_j\mathbf{W}\mathbf{y}) = \sigma_j\,\mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{Q}_j); \qquad j = 1, \ldots, p. \tag{12b}$$

Die Varianzfaktoren σ_j sind getrennt schätzbar, denn die zugehörigen Gleichungssysteme haben Diagonalgestalt. Mit $\bar{T} = \mathrm{diag}(t_j) = \mathrm{diag}(\mathrm{sp}(\mathbf{D}'\mathbf{P}_j\mathbf{D}\Sigma)) = \mathrm{diag}(\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}_j))$ bzw. $\bar{S} = \mathrm{diag}(s_j) = \mathrm{diag}(\mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{Q}_j)) = \mathrm{diag}(\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}\mathbf{Q}_j\mathbf{P}))$ nehmen die zu Gl. (11) analogen Gleichungssysteme die Gestalt

$$\bar{T}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\boldsymbol{\omega}} \quad \text{bzw.} \quad \bar{S}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\omega} \tag{13}$$

an. Ihre Lösung läßt sich unmittelbar angeben:

$$\hat{\sigma}_j = \frac{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\mathbf{P}_j\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\mathrm{sp}(\mathbf{D}\Sigma\mathbf{D}'\mathbf{P}_j)} = \frac{\mathbf{v}'\mathbf{P}_j\mathbf{v}}{\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}_j)}; \qquad j = 1, \ldots, p \tag{14a}$$

und

$$\hat{\sigma}_j = \frac{v'\mathbf{P}\mathbf{Q}_j\mathbf{P}\mathbf{v}}{\mathrm{sp}(\mathbf{W}\mathbf{Q}_j)} = \frac{\mathbf{v}'\mathbf{P}\mathbf{Q}_j\mathbf{P}\mathbf{v}}{\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}\mathbf{Q}_j\mathbf{P})}; \quad j = 1, \ldots, p \tag{14b}$$

Gl. (14a) enthält als Spezialfälle die vom Verfasser (1979a) angegebenen Schätzer für Varianz- und Kovarianzfaktoren. Die dort dargestellte Herleitung läßt sich nun auch auf die Schätzung von sich „überlappenden" Varianzkomponenten übertragen (Gl. 14b). Damit sind alle vier angegebenen Schätzer Gln. (11) bzw. (13) unter gleich allgemeinen Bedingungen anwendbar. Gln. (11) bzw. (13) führen bei Konvergenz auch zum selben Ergebnis (FÖRSTNER (1979c)). Die Optimaleigenschaften der Schätzer von Gl. (11) übertragen sich so auf den Konverzengpunkt der Schätzer Gl. (13). Auch wenn bei diesen keine unmittelbaren Angaben über die Genauigkeit der Schätzung möglich ist, so gibt doch der Anteil $\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}_j)$ bzw. $\mathrm{sp}(\mathbf{Q}_{vv}\mathbf{P}\mathbf{Q}_j\mathbf{P})$ der einzelnen Komponenten an der Gesamtredundanz r einen Hinweis zur Beurteilung.

c) Betrachten wir noch den Spezialfall, wenn man die Varianzfaktoren aus wahren Fehlern $\boldsymbol{\varepsilon}$ schätzt. Dann muß man in Gln. (10), (12) bzw. (14) $\mathbf{v}$ durch $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\mathbf{D}$ durch die Einheitsmatrix $\mathbf{I}$ ersetzen. Dies führt im Falle von Varianzkomponenten auf die von HELMERT (1924) angegebenen Formeln für die Varianzfaktoren. Diese kann man z. B. bei der Schätzung eines neigungsabhängigen Höhenfehlers nach KOPPE verwenden. Dazu ist keine Klasseneinteilung notwendig (vgl. AMENT (1978)). Die Schätzung von Kovarianzmatrizen für photogrammetrische Modell- bzw. Bildkoordinaten, wie sie STARK (1973) und SCHILCHER (1979) durchführten, verwenden ebenfalls Gl. (14a) für

den Fall wahrer Fehler. Die Näherung der ε durch $\hat{\varepsilon} = -v$ ist in beiden Fällen wegen der hohen Redundanz berechtigt. Denn Gl. (14a) stimmt für den Fall gleicher Korrelation unter den Beobachtungen zweier Gruppen mit der bekannten Gleichung zur Berechnung der Kovarianz überein.

5. Anwendungsbeispiel

Für die Schätzung des konstanten und linearen Anteils bei einer Streckenvarianz $\sigma^2{}_i = a^2 + b^2 s_i^2$ (s. o.) führen Gln. (14b) auf folgende Schätzer

$$\hat{\sigma}_a = \frac{\sum_i v_i^2/\sigma_i^4}{\sum_i r_i/\sigma_i^2}, \quad \hat{\sigma}_b = \frac{\sum_i v_i^2 s_i^2/\sigma_i^4}{\sum_i r_i s_i^2/\sigma_i^2} \tag{15a, b}$$

(hierin bedeuten $r_i = D_{ii} = 1 - p_{s_i} q_{\hat{s}_i}$ die Redundanzanteile der Strecken s_i). Ähnlich wie bei der Schätzung der Varianzen von Beobachtungsgruppen werden hier Ω_0 und r in gleicher Weise aufgespalten, denn es gilt:

$$\Omega_0 = \sum_i v_i^2/\sigma_i^2 = \sum_i v_i^2 a^2/\sigma_i^4 + \sum_i v_i^2 b^2 s_i^2/\sigma_i^4 = (\Omega_0)_a + (\Omega_0)_b, \tag{16a}$$

$$r = \sum_i r_i = \sum_i r_i a^2/\sigma_i^2 + \sum_i r_i b^2 s_i^2/\sigma_i^2 = \left(\sum_i r_i\right)_a + \left(\sum_i r_i\right)_b, \tag{16b}$$

also:

$$\hat{\sigma}_a = \frac{(\Omega_0)_a}{\left(\sum_i r_i\right)_a}, \quad \hat{\sigma}_b = \frac{(\Omega_0)_b}{\left(\sum_i r_i\right)_b}.$$

Mit Gln. (15) wurde in einem Trilaterationsnetz 2. Ordnung der Streckenfehler elektromagnetischer Strecken geschätzt. Die dafür notwendige Änderung im Programm TRINA (FÖRSTNER, 1979b) belief sich auf ca. 30 Befehle. Die Rechenzeit für die Ausgleichung und die Analyse des Netzes mit 112 Punkten betrug ca. 12 sec. pro Iteration auf einer IBM 370/158. Bei dieser geringen Rechenzeit pro Iteration kann man die langsame Konvergenz von 14 Iterationen pro Dezimale in Kauf nehmen. Der große Konvergenzradius des Verfahrens war auch hier festzustellen. Die geschätzte Varianz der Strecken ergab sich zu

$$\hat{\sigma}_s^2 = (2.6\ \text{cm})^2 + (2.1\ \text{mm/km} \cdot s)^2$$

Der Anteil $\Sigma r_i = 73.5$ der Strecken an der Gesamtredundanz verteilte sich zu etwa gleichen Teilen auf die Bestimmung der Varianzfaktoren $\left(\left(\sum_i r_i\right)_a = 36.2, \left(\sum_i r_i\right)_b = 37.3\right)$. Die Anteile sollten zwar für eine zuverlässige Bestimmung höher liegen (>50), begründen aber doch die recht gute Übereinstimmung der Schätzwerte mit den Erfahrungen der Praxis.

6. Schlußbemerkungen

Das Ziel dieser Arbeit war, die Gemeinsamkeiten der in jüngerer Zeit bekannt gewordenen Verfahren zur Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten zu zeigen. In allen Fällen liegt das gleiche erweiterte stochastische Modell zugrunde. Die Schätzung der unbekannten Parameter der Varianz-Kovarianzmatrix führt auf Gleichungssysteme, deren Struktur vom Lösungsweg abhängen. Alle Verfahren führen bei Konvergenz zur selben Lösung. Es handelt sich (Konvergenz vorausgesetzt) um einen globalen besten invarianten quadratischen nverzerrten Schätzer (globaler BIQUE):

- global, da er unabhängig von Näherungswerten für die unbekannten Varianzfaktoren ist;
- bester, da er minimale Varianz aufweist[2];

[2] Streng genommen entfällt diese Eigenschaft, da sich der Vergleich der Varianzen verschiedener Schätzer auf das Ergebnis der 1. Iteration bei vorgegebenen Näherungswerten, d. h. auf lokale Schätzer bezieht.

- invariant, da er von Näherungswerten für die Parameter **x** unabhängig ist;
- quadratisch, da er sich aus einer quadratischen Form der Beobachtungen **y** ableitet;
- unverzerrt, da er nach Konstruktion erwartungstreu ist.

Für die Anwendung der Schätzer ist folgendes zu bemerken:

- Mit dem Verfahren von KOCH für die Schätzung von Varianzkomponenten erhält man auch die Varianzen der Schätzwerte zur Beurteilung. Ob dies auch für das Verfahren von GRAFAREND/SCHAFFRIN für die Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten zutrifft, ist offen. Über die Verteilung der Schätzwerte ist allerdings bisher noch nichts bekannt, so daß Hypothesentests für die Schätzwerte fehlen. Ebenso unbekannt ist der Einfluß der Varianzkomponentenschätzung auf die Hypothesentests der Parameter **x**.
- Das Verfahren von GRAFAREND/SCHAFFRIN weist bei spezieller Struktur der Varianz-Kovarianzmatrix günstige numerische Eigenschaften auf (vgl. FÖRSTNER (1979c)).
- Das Verfahren des Verfassers benötigt bei unkorrelierten Beobachtungen den geringsten numerischen Aufwand.

Die Verfahren werden in Zukunft sicher einen breiten Anwendungsbereich finden, nicht nur bei der Bestimmung der Genauigkeitsstruktur geodätischer oder photogrammetrischer Beobachtungen oder bei der Analyse von Grundstückswerten (vgl. HILDEBRANDT (1978)). Auch zur Schätzung der Parameter von Kovarianzfunktionen bei der linearen Prädiktionsfilterung (Schwerewerte, Lotabweichungen, Geländehöhen usw.) kann man die Varianzkomponentenschätzung verwenden, die keine vorherige Klasseneinteilung der Beobachtungen erfordert. Die Nichtlinearität der Modelle für inhomogene und/oder anisotrope Kovarianz- bzw. Gewichtsfunktionen (vgl. RUMMEL/SCHWARZ (1977), MORRISON (1977)) steht dem nicht im Weg (AMENT (1978), vgl. auch BÄHR (1979))

Literatur

AMENT, R.: Berechnung des mittleren Höhenfehlers nach Koppe ohne vorherige Klasseneinteilung, Selbständige Arbeit am Institut für Photogrammetrie, Stuttgart 1978.

BÄHR, H.-G.: Die Bestimmung der Regression nicht-normalverteilter Zufallsgrößen – dargestellt am Beispiel der Varianzfunkion und der Korrelationsfunktion, Geod. Schriftenreihe der TH. Braunschweig, Heft 1, 1979.

EBNER, H.: A posteriori Varianzschätzung für die Koordinaten unabhängiger Modelle, ZfV 97 (1972), 166–173.

FÖRSTNER, W.: Konvergenzbeschleunigung bei der a posteriori Varianzschätzung, ZfV 104 (1979a), 149–156.

FÖRSTNER, W.: Das Rechenprogramm TRINA für geodätische Lagenetze in der Landesvermessung, Nachr. a. d. Öffentl. Vermessungsdienst Nordrhein-Westfalen, Heft 2, 1979b.

FÖRSTNER, W.: Eine Optimierung der Schätzung von Varianz- und Kovarianzkomponenten, Vortrag auf dem Seminar über Varianzkomponentenschätzung am Institut für theoretische Geodäsie an der Hochschule der Bundeswehr, München 1979c.

GRAFAREND, E. und D'HONE, A.: Gewichtsschätzung in geodätischen Netzen, DGK A 88, München 1978.

GRAFAREND, E. und SCHAFFRIN, B.: Variance-Covariance-Component Estimation of Helmert Type, Invited Paper, ASP-ASCM-Convention Washington D. C., March 1979.

HELMERT, F. R.: Die Ausgleichung nach der Methode der kleinsten Quadrate, 3. Auflage, Teubner, Berlin 1924.

HILDEBRANDT, H.: Anwendung varianzanalytischer Methoden bei der Grundstücksbewertung, ZfV 103, 1978, 101–104.

KELM, R.: Ist die Varianzschätzung nach Helmert MINQUE? AVN 85, 1978, 49–54.

KLEFFE, J.: Bayes invariant quadratic estimators for variance components in linear models, Math. Operationsforsch. Statist. 6, 1975, 753–767.

KLEFFE, J. und PINCUS, R.: Bayes and best quadratic unbiased estimators for parameters fo the covariance matrix in a linear model, Math. Operationsforforsch. Statistik, 5, 1974, 43–67.

KOCH, K. R.: Schätzung von Varianzkomponenten, AVN 85, 1978, 264–269.

KOCH, K. R.: Parameterschätzung und Hypothesentests in linearen Modellen, Dümmler, 1979.

KUBIK, K.: Schätzung der Gewichte der Fehlergleichungen beim Ausgleichsproblem nach vermittelnden Beobachtungen, ZfV 92, 1967, 173–178.

MORRISON, F.: Azimuth-dependant statistics for interpolating geodetic data, Bull. Geod. 51 (1977), 105–118.

PINCUS, R.: Estimability of parameters of the covariance matrix and variance components, Math. Operationsforsch. Statistik, 5, 1974, 245–248.
PUKELSHEIM, F.: On HSU's Model in Regression Analysis, Math. Operationsforsch. Statist. 8, 1977, 323–331.
RAO, C. R. und MITRA, S. K.: Generalized inverse of matrices and its application, New York 1971.
RUMMEL, R. und SCHWARZ, K. P.: On the non homogeneity of the global covariance function, Bull. Geod. 51 (1977), 93–103.
SCHILCHER, M.: Empirisch-statistische Untersuchungen zur Genauigkeitsstruktur des photogrammetrischen Luftbildes, Diss. Stuttgart 1979.
STARK, E.: Die Genauigkeitsstruktur im photogrammetrischen Einzelmodell, DGK C 193, München 1973.