Skript zur Vorlesung Räumliche Statistik SS 07

basierend auf einer Mitschrift vom SS 2001
durch Marcel Dettling und Christian Sangiorgio

Hansruedi Künsch
Seminar für Statistik
ETH Zürich

May 2022

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung

Die folgenden Beispiele zeigen einige typische Fragestellungen der räumlichen Statistik und der Bildanalyse:

Cadmiumgehalt im Oberboden (aus einer unpublizierten Arbeit von Andreas Papritz, Institut fuer terrestrische Ökologie, ETHZ). Das Ziel ist die Interpolation des Cadmiumgehalts im Oberboden aus einem Netz von Beobachtungspunkten. Man will den Cadmiumgehalt (mit Genauigkeitsangabe) an einer Stelle vorhersagen, wo keine Messung gemacht wurde.
Methoden: *Geostatistik*, *Kriging*.

Räumliche Verteilung von Krankheiten (siehe z.B. Besag, York und Mollié, Ann. Inst. Statist. Math. 43, 1991, 1–59). Das Ziel ist, den Einfluss von erklärenden Variablen zu untersuchen. Dazu betrachtet man auch die räumliche Korrelation der Residuen, was Hinweise auf im Modell nicht erfasste Variable liefern kann.
Methoden: *Bayes-Verfahren*, *Markov-Felder*.

Feldversuche (siehe z.B. Besag und Higdon, J. Royal Statist. Soc. B 61, 1999, 691–746). Mit Hilfe der räumlichen Korrelation der Residuen wird versucht, die Bodenbeschaffenheit (latente Variable) aus den Daten zu schätzen.
Methoden: *Bayes-Verfahren*, *Markov-Felder*.

Satellitenbilder (low level vision) (siehe z.B. Geman und Geman, IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell. 6, 1984, 721–741). Das Ziel ist, die "Verschmierung" ("blurring") rückgängig zu machen. Das Rauschen im Bild soll allerdings unter Beibehaltung der wesentlichen Strukturen (Kanten, etc.) entfernt werden.
Methoden: *Bayes-Verfahren*, *Wavelets*.

Objekterkennung (high level vision) (siehe z.B. Fleuret und Geman, Intern. J. Computer Vision 41, 2001, 85–107). Das Ziel ist, in Bildern vorgängig definierte Objekte zu erkennen. Man benützt die Stochastik zur Formalisierung von Mehrdeutigkeit auf lokalem Niveau.
Methoden: *Klassifikation, Feature-Extrahierung*.

Standorte von Bäumen (siehe z.B. Ogata und Tanemura, J. Royal Statist. Soc. B 46, 1984, 496–518). Das Ziel ist, zu untersuchen ob die Bäume regelmässig, bzw. zufällig oder geclustert wachsen.
Methoden: *(markierte) Punktmuster*.

Oberflächen, Texturen, 3-dimensionale Strukturen (siehe z.B. Ohser und Mücklich, Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science, Wiley, 2000). Das Ziel ist die Beschreibung, Klassifizierung und Simulation 3-dimensionaler Eigenschaften aus 2-dimensionalen Schnitten.
Methoden: *Stochastische Geometrie*, *Markovfelder*.

Kapitel 2

Gauss'sche Modelle, Geostatistik

2.1 Begriffe und Grundlagen

Wir betrachten hier Modelle, wo man potentiell an jedem beliebigen Punkt im $\mathbb{R}^d$ eine Messgrösse hat. Dazu führen wir den Begriff des Zufallsfeldes ein. Danach werden wichtige Spezialfälle von Zufallsfeldern definiert und diskutiert.

Definition 2.1 *Ein* Zufallsfeld *ist eine Kollektion von Zufallsvariablen* $\left(Z(x); x \in \mathbb{R}^d\right)$ *auf einem gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum* $(\Omega, \mathcal{F}, P)$.

Ein Zufallsfeld ist also eine Abbildung $Z : \mathbb{R}^d \times \Omega \to \mathbb{R}$, $(x, \omega) \to Z(x, \omega)$. Für festes x ist $Z(x, .)$ eine Zufallsvariable, und für festes ω ist $Z(., \omega)$ eine Funktion von $\mathbb{R}^d$ nach $\mathbb{R}$. Im Fall $d = 1$ wird x meist als Zeit aufgefasst, und man spricht dann von einem Zufallsprozess.

Mathematisch ist die Konstruktion eines Zufallsfelds, d.h. die Konstruktion eines Wahrscheinlichkeitsraums $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ und der zugehörigen Abbildung Z eine anspruchsvolle Aufgabe. Wir gehen in dieser Vorlesung aber nicht näher darauf ein. Alles, was wir verwenden werden, sind die endlich-dimensionalen Verteilungen, d.h. die Wahrscheinlichkeiten $\mathrm{P}\left[Z(x_1) \leq a_1, \ldots Z(x_n) \leq a_n\right]$ für $n \in \mathbb{N}$ und $x_j \in \mathbb{R}^d$.

Am einfachsten sind die Gauss'schen Zufallsfelder:

Definition 2.2 *Ein Zufallsfeld heisst* Gauss'sch*, falls alle endlich-dimensionalen Verteilungen Gauss'sch sind.*

Ein Gauss'sches Zufallsfeld ist festgelegt durch den Erwartungswert $m(x) = \mathbf{E}\left[Z(x)\right]$ und die Kovarianz $C(x, x') = \mathrm{Cov}\left(Z(x), Z(x')\right)$.

Im Unterschied zur Statistik von i.i.d. Modellen beobachten wir in der räumlichen Statistik meist nur eine einzige Realisierung z von Z an endlich vielen Punkten $x_1, \ldots, x_n$. Ohne zusaetzliche Annahmen ist es daher nicht möglich, Rückschlüsse auf die zu Grunde liegende Verteilung zu ziehen. Die einfachste solche Annahme ist die **Stationarität**. Dies bedeutet, dass sich die endlich-dimensionalen Verteilungen nicht ändern, wenn man alle Messpunkte um den gleichen Vektor verschiebt: $(Z(x_1), \ldots, Z(x_n))$ und $(Z(x_1+h), \ldots, Z(x_n+h))$ sind identisch verteilt für alle n und alle x_i. Weil im Gauss'schen Fall alle endlich-dimensionalen Verteilungen durch Erwartungswert und Kovarianz bestimmt sind, vereinfacht sich diese Bedingung.

Definition 2.3 *Ein Gauss'sches Zufallsfeld heisst* stationär*, falls der Erwartungswert konstant ist, d.h.* $m(x) \equiv m$*, und falls die Kovarianz invariant unter Verschiebungen ist,* $C(x+h, x'+h) = C(x, x')$*. In diesem Fall gilt* $C(x, x') = C(x - x')$ *und* $C(\cdot)$ *heisst Autokovarianzfunktion.*

Wenn das Zufallsfeld nicht Gauss'sch ist, dann heisst die Invarianz der ersten beiden Momente schwache Stationarität, während die Verschiebungsinvarianz der endlich-dimensionalen Verteilungen als strikte Stationarität bezeichnet wird.

Die folgende Eigenschaft ist schwächer als die Stationarität.

Definition 2.4 *Ein Gauss'sches Zufallsfeld heisst* intrinsisch*, falls der Erwartungswert konstant ist, d.h.* $m(x) \equiv m$*, und falls* $\frac{1}{2}\operatorname{Var}(Z(x) - Z(x'))$ *nur vom Abstand* $x - x'$ *abhängt. In diesem Fall nennen wir* $\gamma(h) = \frac{1}{2}\operatorname{Var}(Z(x+h) - Z(x))$ *das Semivariogramm.*

Bei einem Gauss'schen intrinsischen Zufallsfeld haben also $Z(x) - Z(x')$ und $Z(x+h) - Z(x'+h)$ die gleiche Verteilung. Die Verteilung von Zuwächsen ändert sich nicht bei Verschiebungen.

Wie die folgende Rechnung zeigt, folgt aus der Eigenschaft "stationär" die Eigenschaft "intrinsich":

$$\begin{aligned}\operatorname{Var}(Z(x+h) - Z(x)) &= \operatorname{Var}(Z(x+h)) + \operatorname{Var}(Z(x)) - 2\operatorname{Cov}(Z(x), Z(x+h)) \\ &= C(0) + C(0) - 2C(h) \;=\; 2(C(0) - C(h)).\end{aligned}$$

Im stationären Fall ist also insbesondere $\gamma(h) = C(0) - C(h)$.

Umgekehrt folgt aber aus der Eigenschaft "intrinsisch" nicht die Eigenschaft "stationär". Wir betrachten als Gegenbeispiel den Fall, wo $d = 1$ ist und $Z(x)$ gleich der Brown'schen Bewegung ist. In diesem Fall ist $\mathbf{E}[Z(x)] = 0$, aber $\operatorname{Var}(Z(x)) = |x|$, und damit ist Z nicht stationär. Aus der Eigenschaft der unabhängigen Zuwächse folgt jedoch $\operatorname{Var}(Z(x+h) - Z(x)) = |h|$, und damit ist Z intrinsisch. Bei Zeitreihen entspricht "intrinsisch" der Eigenschaft, dass die ersten Differenzen stationär sind.

Das nächste einfache Lemma wird im Folgenden eine wichtige Rolle spielen

Lemma 2.1 *a) Falls* $Z(x)$ *stationär ist, dann gilt:*

$$\operatorname{Cov}\left(\sum_{j=1}^{n} \beta_j Z(x_j), \sum_{j=1}^{n} \beta'_j Z(x_j)\right) = \sum_{j,k=1}^{n} \beta_j \beta'_k C(x_k - x_j). \tag{2.1}$$

b) Falls $Z(x)$ *intrinsisch ist, dann gilt:*

$$\operatorname{Cov}\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_j Z(x_j), \sum_{j=1}^{n} \lambda'_j Z(x_j)\right) = -\sum_{j \neq k} \lambda_j \lambda'_k \gamma(x_k - x_j) \tag{2.2}$$

für alle n*, für alle* $x_1, \ldots, x_n$ *und für alle* λ_j, λ'_j *mit* $\sum \lambda_j = \sum \lambda'_j = 0$*.*

Beweis:

a) Rechenregel für die Kovarianz.

b) Wir benützen

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j Z(x_j) \;=\; \sum_{j=1}^{n} \lambda_j (Z(x_j) - Z(x_1))$$

(und analog für die zweite Linearkombination). Daraus folgt

$$\mathrm{Cov}\left(\sum \lambda_j Z(x_j), \sum \lambda'_j Z(x_j)\right) \;=\; \sum_{j,k} \lambda_j \lambda'_k \,\mathrm{Cov}\left(Z(x_j) - Z(x_1), Z(x_k) - Z(x_1)\right)$$

Mit Hilfe von

$$Z(x_j) - Z(x_k) = Z(x_j) - Z(x_1) + Z(x_1) - Z(x_k)$$

erhalten wir

$$2\gamma(x_j - x_k) \;=\; 2\gamma(x_j - x_1) + 2\gamma(x_k - x_1) - 2\,\mathrm{Cov}\left(Z(x_j) - Z(x_1), Z(x_k) - Z(x_1)\right)$$

und somit

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\left(\sum \lambda_j Z(x_j), \sum \lambda'_j Z(x_j)\right) &= \sum_{j,k} \lambda_j \lambda'_k (\gamma(x_j - x_1) + \gamma(x_k - x_1) - \gamma(x_j - x_k)) \\ &= 0 + 0 - \sum_{j \neq k} \lambda_j \lambda_k \gamma(x_k - x_j).\end{aligned}$$

□

Neben der Invarianz unter Verschiebungen kann man auch noch Invarianz unter Drehungen betrachten.

Definition 2.5 *Ein intrinsisches Gauss'sches Zufallsfeld heisst isotrop, falls* $\gamma(h) = \gamma(\|h\|)$.

2.2 Nichtparametrische Schätzung der ersten beiden Momente

Das Ziel in diesem Abschnitt ist die Schätzung des Erwartungswerts m und der Autokovarianzfunktion $C(\cdot)$ bzw. des Semivariogramms $\gamma(\cdot)$ aus Beobachtungen $(z(x_1), \ldots, z(x_n))$. Zur Vereinfachung der Notation setzen wir ausserdem meist noch die Isotropie des zu Grunde liegenden Zufallsfelds voraus. Einfach und naheliegend sind nichtparametrische Schätzungen für m, $C(\cdot)$ und $\gamma(\cdot)$.

1) Für den Erwartungswert wird "klassisch" gemittelt, d.h. $\widehat{m} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z(x_i)$.

2) Für das Semivariogramm bestimmt man das Mittel über Paare mit ungefähr gleichen Abständen, d.h. $\widehat{\gamma}(\|h\|)$ = Mittel von $\frac{1}{2}(Z(x_i) - Z(x_j))^2$ über alle Paare i, j für die $\|x_i - x_j\| \approx h$.

Zur praktischen Durchführung werden meist Klassen von Paaren gebildet, die Beobachtungen mit ähnlichen Abständen enthalten (analog zu einem Histogramm). Dann wird für

jede Klasse das (gewöhnliche) Mittel gebildet. Stattdessen kann man aber auch mit einem Kernschätzer eine Glättung durchführen:

$$\widehat{\gamma}(h) \quad = \quad \frac{\frac{1}{2}\sum_{i,j}(Z(x_i) - Z(x_j))^2 \cdot K(\|x_i - x_j\| - \|h\|)}{\sum_{i,j} K(|x_i - x_j| - \|h\|)}$$

Ein Nachteil dieses Vorgehens ist die grosse Variabilität der nichtparametrischen Schätzungen. Ein weiterer Nachteil ist, dass die so geschätzten Grössen für $C(\cdot)$ und $\gamma(\cdot)$ oft gar nicht einem möglichen Modell entsprechen. Gemäss Lemma 2.1 muss nämlich jede Kovarianzfunktion *positiv definit* sein, d.h.

$$\sum_{j,k=1}^{n} \beta_j \beta_k C(x_k - x_j) \geq 0$$

muss gelten für $n = 1, 2, \ldots$ $x_j \in \mathbb{R}^d$ und $\beta_j \in \mathbb{R}$. Ebenso muss jedes Semivariogramm *bedingt negativ definit* sein, d.h.

$$\sum_{j \neq k} \lambda_j \lambda_k \gamma(x_k - x_j) \leq 0$$

für $n = 2, 3, \ldots$, $x_j \in \mathbb{R}^d$ und $\lambda_j \in \mathbb{R}$ mit $\sum \lambda_j = 0$. Für nichtparametrische Schätzungen ist dies oft nicht der Fall.

Um den Nachteilen der nichtparametrischen Schätzungen aus dem Weg zu gehen, passt man parametrische Modelle an mit Kovarianzfunktionen, von denen man weiss, dass sie positiv definit sind. Eine Liste solcher Modelle folgt im nächsten Abschnitt.

2.3 Parametrische Modelle für Kovarianz und Variogramm

Hier folgt zuerst ein Überblick über die wichtigsten parametrischen Modelle:

"Weisses Rauschen", "Nugget-Modell" In diesem Modell wird vorausgesetzt, dass die Werte an verschiedenen Stellen unabhängig sind. Damit erhalten wir die Autokovarianzfunktion

$$C(h) = \begin{cases} \sigma^2, & \text{falls } h = 0 \\ 0, & \text{falls } h \neq 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

"Allgemeines exponentielles Modell"

$$C(h) = \sigma^2 \cdot \exp\left(-\left(\frac{\|h\|}{\rho}\right)^{\nu}\right) \tag{2.4}$$

wobei $0 < \nu \leq 2$ sein muss, damit $C(\cdot)$ die im Lemma 1.1 bewiesenen Eigenschaften einer Autokovarianzfunktion erfüllt. Am häufigsten verwendet werden die Parameter $\nu = 1$ bzw. $\nu = 2$, die unter der Bezeichnung "exponentielles Modell" bzw. "Gauss'sches Modell" bekannt sind.

"Sphärisches Modell"

$$C(h) = \sigma^2 \cdot \frac{|B(0,1) \cap B(h/\rho, 1)|}{|B(0,1)|} \tag{2.5}$$

wo $B(x, r)$ die Sphäre mit Zentrum x und Radius r in $\mathbb{R}^d$ ist, und $|\cdot|$ für das Volumen (bzw. die Fläche) dieser Sphäre steht.

"Matérn-Modell"

$$C(h) = \sigma^2 \cdot \frac{1}{2^{\nu-1}\Gamma(\nu)} \left(2\sqrt{\nu}\frac{\|h\|}{\rho}\right)^{\nu} K_\nu \left(2\sqrt{\nu}\frac{\|h\|}{\rho}\right), \tag{2.6}$$

wo $K_\nu(\cdot)$ die Besselfunktion und $\Gamma(\cdot)$ die Gammafunktion ist.

"Potenz-Modell"

$$\gamma(h) = \sigma^2 \cdot \|h\|^\nu \tag{2.7}$$

mit $0 < \nu < 2$. Für $\nu = 1$ und $d = 1$ entspricht dieses Modell gerade der Brown'schen Bewegung.

Die unbekannten Parameter sind σ^2, ρ und ν. Dabei dient σ^2 zur Skalierung von Z ($Z \to const \cdot Z$), ρ dient zur Skalierung der Distanz ($x \to const \cdot x$), und ν ist ein Formparameter, der die Glattheit von C bzw. γ bei 0 regelt. Weil $\gamma(h) = \mathbf{E}\left[(Z(x+h) - Z(x))^2\right]/2$ und $\gamma(0) = 0$, steht das in direkter Beziehung mit der Glattheit des Zufallsfelds.

Insbesondere ist $Z(x)$ stetig im quadratischen Mittel, d.h. $Z(x') \to Z(x)$ in L_2 für $x' \to x$, genau dann wenn $\gamma(\cdot)$ bzw. $C(\cdot)$ im Nullpunkt stetig sind. Beim Nugget-Modell ist also Z nicht stetig im quadratischen Mittel. Konvergenz in L_2 ist schwächer als fast sichere Konvergenz, d.h. aus Stetigkeit im quadratischen Mittel folgt nicht, dass fast alle Realisationen $Z(., \omega)$ stetig sind.

Das folgende Lemma zeigt den Zusammenhang zwischen der Differenzierbarkeit von Z und Differenzierbarkeit von γ.

Lemma 2.2 *Ein intrinsisches Zufallsfeld Z ist differenzierbar im quadratischen Mittel, d.h. die Richtungsableitung in eine beliebige Richtung h existiert in L_2, genau dann wenn $\gamma(\cdot)$ 2-mal stetig differenzierbar ist. In diesem Fall gilt*

$$\mathrm{Cov}(D_x Z(x'), D_x Z(x)) = D_x^2 \gamma(x - x').$$

Beweis: Falls $(Z(x+th) - Z(x))/t$ in L_2 konvergiert, dann konvergiert insbesondere das zweite Moment gegen das zweite Moment der Richtungsableitung. Also konvergiert

$$\mathbf{E}\left[\left(\frac{Z(x+th) - Z(x)}{t}\right)^2\right] = \frac{2\gamma(th)}{t^2}.$$

Damit ist die zweimalige Differenzierbarkeit bei Null zumindest plausibel. Für einen exakten Beweis und für die zweimalige Differenzierbarkeit an andern Stellen, braucht man die Spektraldarstellung. Wir verzichten darauf.

Für die Umkehrung der Behauptung zeigt man, dass $t \to \frac{Z(x+th)-Z(x)}{t}$ eine Cauchyfolge in L_2 ist, d.h zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein δ, so dass

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}\left[\left(\frac{Z(x+th) - Z(x)}{t} - \frac{Z(x+sh) - Z(x)}{s}\right)^2\right] \\ &= \frac{2\gamma(th)}{t^2} + \frac{2\gamma(sh)}{s^2} - 2\frac{\gamma(th) + \gamma(sh) - \gamma((t-s)h)}{ts} \;\leq\; \varepsilon \end{aligned}$$

für alle t, s mit $|t|, |s| \leq \delta$. Die beiden ersten Terme konvergieren je gegen $h^T D_x^2 \gamma(0) h$. Für den dritten Term setzen wir $f(t,s) = \gamma(th) - \gamma((t-s)h)$, $f_1 = \partial f/\partial t$ und $f_{12} = \partial^2 f/\partial t \partial s$. Weil $f_1(t,0) = 0$, folgt dann mit dem Zwischenwertsatz dass

$$\frac{f(t,s) - f(0,s)}{ts} = \frac{f_1(\theta_1 t, s)}{s} = f_{12}(\theta_1 t, \theta_2 s).$$

Weil γ zweimal stetig differenzierbar ist, konvergiert $f_{12}(\theta_1 t, \theta_2 s)$ gegen $f_{12}(0,0) = h^T D_x^2 \gamma(0) h$. Die Formel für die Kovarianz der partiellen Ableitungen $D_x Z$ folgt mit einer einfachen Rechnung. □

2.3.1 Schätzung der Parameter

Die unbekannten Parameter sind m sowie $\theta = (\sigma^2, \rho, \nu)$. Zur Schätzung dieser Parameter gibt es mindestens zwei mögliche Verfahren

1) Anpassung über die nichtparametrisch geschätzte Autokovarianzfunktion $\widehat{C}(\cdot)$, bzw. über das Semivariogramm $\widehat{\gamma}(\cdot)$. Dies macht man entweder "von Auge" oder dann aber mit "kleinsten Quadraten":

$$\sum_{j=1}^{k} w_j \cdot \left(\widehat{C}(h_j) - C_\theta(h_j)\right)^2$$

wird bezüglich θ minimiert. Die w_j sind Gewichte, z.B. die Anzahl Paare, die bei der Berechnung von $\widehat{C}(h_j)$ verwendet werden.

2) Maximum-Likelihood. Weil wir ein Gauss'sches Zufallsfeld angenommen haben, ist die Likelihood basierend auf den Beobachtungen $\mathbf{z} = (z(x_1), \ldots, z(x_n))^T$ gegeben durch

$$2 \log L(\mu, \theta) = -\log \det(C_n(\theta)) - (\mathbf{z} - \mu \mathbf{1})^T C_n(\theta)^{-1} (\mathbf{z} - \mu \mathbf{1}).$$

Dabei ist $\mathbf{1} = (1, \ldots, 1)^T$ und $C_n(\theta)_{ij} = \frac{1}{\sigma^2} C(x_i - x_j)$. Die Berechnung und Maximierung der Likelihood-Funktion ist meist aufwändig. Für gegebenes (ρ, ν) kann man die Maximierung bezüglich μ und σ^2 geschlossen durchführen. Setzt man das Ergebnis ein, so erhält man die sogenannte Profil-Likelihood, welche dann nur noch von zwei Parametern abhängt.

2.4 Kriging

Wir beobachten

$$\mathbf{Z} := (Z(x_1), Z(x_2), \ldots, Z(x_n))^T$$

und wir wollen $Z(x_0)$ schätzen. Neben einer *Punktvorhersage* $\widehat{Z}(x_0)$ möchte man mindestens noch einen *Vorhersagefehler* $\mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \widehat{Z}(x_0))^2\right]^{1/2}$ angeben. Für eine vollständige Beschreibung der Unsicherheit braucht man sogar die bedingte Verteilung von $Z(x_0)$ gegeben $\mathbf{Z}$.

2.4.1 Einfaches (simple) Kriging

Wir betrachten zunächst die lineare Vorhersage

$$\widehat{Z}(x_0) = \alpha + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{Z}$$

und wir wollen α und $\boldsymbol{\beta}$ so bestimmen, dass

$$\mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \widehat{Z}(x_0))^2\right]$$

minimal wird. Das Feld muss weder Gauss'sch, noch stationär oder intrinsisch sein.

Die Lösung lautet (vergleiche Vorlesung Lineare Regression)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\beta}_0 &= C_n^{-1}\mathbf{c}_n \\ \alpha_0 &= m(x_0) - (m(x_1), \ldots m(x_n))\boldsymbol{\beta}_0 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} C_n &= (\mathrm{Cov}\,(Z(x_i), Z(x_j)))_{1\le i,j\le n} \\ \mathbf{c}_n &= (\mathrm{Cov}\,(Z(x_0), Z(x_i)))_{1\le i\le n} \end{aligned}$$

Es folgt also

$$\widehat{Z}(x_0) = \mathbf{E}\,[Z(x_0)] + \boldsymbol{\beta}_0^T(\mathbf{Z} - \mathbf{E}\,[\mathbf{Z}])$$

und der Vorhersagefehler ist

$$\mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \widehat{Z}(x_0))^2\right] = \mathrm{Var}\,(Z(x_0)) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1}\mathbf{c}_n$$

Lemma 2.3 *Bei einem Gauss'schen Zufallsfeld minimiert die optimale lineare Prognose $\widehat{Z}(x_0)$ den mittleren quadratischen Prognosefehler unter allen (auch nichtlinearen) Vorhersagen und*

$$Z(x_0) \mid \mathbf{Z} \sim \mathcal{N}\left(\widehat{Z}(x_0), \mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \widehat{Z}(x_0))^2\right]\right).$$

Beweis: Für die bedingte Dichte von $Z(x_0)$ gegeben $\mathbf{Z}$ gilt:

$$p(z(x_0) \mid \mathbf{z}) = \frac{p(z(x_0), \mathbf{z})}{p(\mathbf{z})} \propto p(z(x_0), \mathbf{z}).$$

Die Proportionalität bedeutet "bis auf einen Faktor, der von $\mathbf{z}$, aber nicht von $z(x_0)$ abhängen darf". Diesen Faktor erhält man dann aus der Normierung $\int p(z(x_0) \mid \mathbf{z})dz(x_0) = 1$.

Die gemeinsame Dichte $p(z(x_0), \mathbf{z})$ ist eine $(n+1)-$dimensionale Normalverteilungsdichte. Mit quadratischem Ergänzen kann man diese auf die Form bringen

$$p(z(x_0), \mathbf{z}) = const_1 \cdot \exp\left(-const_2 \cdot z(x_0)^2 + const_3 z(x_0)\right),$$

wobei $const_1$ und $const_3$ von $\mathbf{z}$ abhängen. Daraus ist ersichtlich, dass $Z(x_0)$ gegeben $\mathbf{Z}$ normalverteilt ist.

Mit dem gleichen Argument sieht man ferner, dass der Erwartungswert dieser bedingten Verteilung linear ist in $\mathbf{z}$ und dass deren Varianz nicht von $\mathbf{z}$ abhängt. Der Rest des Lemmas folgt nun aus dem allgemeinen Resultat, dass die beste (nichtlineare) Vorhersage gegeben ist durch $\mathbf{E}\left[Z(x_0)|\mathbf{Z}\right]$. □

Die Schwierigkeit bei der Anwendung dieser Resultate ist, dass $m(x_i)$ und $C(x_i, x_j)$ unbekannt sind. Der einfachste Ausweg ist, diese Grössen unter der Annahme von Stationarität zu schätzen und die erhaltenen Schätzungen in die obigen Formeln einzusetzen. Unbefriedigend dabei ist, dass der Effekt des Schätzfehlers so ignoriert wird.

2.4.2 Gewöhnliches (ordinary) Kriging

Wir setzen jetzt voraus, dass der Erwartungswert von Z konstant ist, d.h. $m(x) \equiv m$ und betrachten lineare Vorhersagen der Form

$$\widehat{Z}(x_0) = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z} \qquad \text{mit} \qquad \sum \lambda_j = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{1} = 1$$

Durch die zusätzliche Bedingung an die Koeffizienten nimmt der Vorhersagefehler natürlich zu. Die folgenden Überlegungen zeigen, dass diese Zusatzbedingung trotzdem vernünftig ist:

- Zur Bestimmung des optimalen $\boldsymbol{\lambda}$ braucht man m nicht.
- Wenn man m erwartungstreu und linear schätzt und beim simple Kriging einsetzt, hat $\widehat{Z}(x_0)$ diese Form: Sei $\widehat{m} = \mathbf{w}^T \mathbf{Z}$ mit $\mathbf{E}\left[\widehat{m}\right] = m$. Dies ist äquivalent zu $\mathbf{w}^T \mathbf{1} = 1$. Einsetzen ergibt

  $$\widehat{Z}(x_0) = \widehat{m} + \boldsymbol{\beta}_0^T(\mathbf{Z} - \widehat{m}\mathbf{1}) = (1 - \boldsymbol{\beta}_0^T \mathbf{1})\mathbf{w}^T \mathbf{Z} + \boldsymbol{\beta}_0^T \mathbf{Z} = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z}$$

  mit

  $$\boldsymbol{\lambda} = (1 - \boldsymbol{\beta}_0^T \mathbf{1})\mathbf{w} + \boldsymbol{\beta}_0.$$

  Dieses $\boldsymbol{\lambda}$ erfüllt $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{1} = 1$.

Zur Bestimmung der optimalen Koeffizienten $\boldsymbol{\lambda}$ berechnen wir für ein intrinsisches Feld

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \widehat{Z}(x_0))^2\right] &= \mathbf{E}\left[(Z(x_0) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z})^2\right] = \mathrm{Var}\left(Z(x_0) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z}\right) \\ &= -\sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + 2 \sum_i \lambda_i \gamma(x_i - x_0) \end{aligned}$$

(die letzte Gleichung folgt aus Lemma 2.1.) Der Vorhersagefehler hängt also nur vom Semivariogramm ab, welches man ohne Kenntnis von m schätzen kann.

Die Optimierung dieses Ausdrucks mit Nebenbedingung $\boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{1} = 1$ führt auf ein lineares Gleichungssystem. Die konkrete Form dieses Gleichungssystems ist für uns nicht von grosser Bedeutung, da wir sowieso Programmpakete benutzen werden.

Man kann ferner zeigen, dass man die Lösung des gewöhnlichen Krigings bekommt, wenn man einfaches Kriging benutzt und für m den besten linearen erwartungstreuen Schätzer

$$\widehat{m} = \frac{\mathbf{1}^T C_n^{-1}\mathbf{Z}}{\mathbf{1}^T C_n^{-1}\mathbf{1}}$$

einsetzt.

2.4.3 Bayes'sches Kriging

In der Bayes'schen Statistik betrachtet man die unbekannten Parameter (m, σ^2, ρ, ν) ebenfalls als zufällig mit einer sogenannten a priori Dichte. Die Dichte der Beobachtungen $\mathbf{Z}$ wird dann als bedingte Dichte gegeben die Parameter interpretiert, und man berechnet mit Hilfe der Bayes-Formel die a posteriori Dichte, das heisst die Dichte von (m, σ^2, ρ, ν) gegeben die Beobachtungen:

$$p((m, \sigma^2, \rho, \nu) \mid \mathbf{z}) = \frac{p(\mathbf{z} \mid m, \sigma^2, \rho, \nu)p(m, \sigma^2, \rho, \nu)}{p(\mathbf{z})} \propto p(\mathbf{z} \mid m, \sigma^2, \rho, \nu)p(m, \sigma^2, \rho, \nu).$$

Proportionalität bedeutet "bis auf einen Faktor, der von $\mathbf{z}$, aber nicht von m, σ^2, ρ, ν abhängt". Diesen Faktor kann man dann durch Integration über m, σ^2, ρ, ν bestimmen.

Als a priori Dichte wählt man etwas, was wenn möglich die Rechnungen vereinfacht und möglichst "nicht informativ" ist, also Dichten mit einer grossen Streuung. Meist nimmt man an, dass m, σ^2, ρ, ν a priori unabhängig sind. Für m und $\log(\sigma^2)$ verwendet man häufig die "Gleichverteilung", obwohl das natürlich keine Wahrscheinlichkeitsdichten sind. In einem gewissen Sinn sind das die am wenigsten informativen Dichten, wir gehen jedoch nicht näher darauf ein. Eine mögliche Wahl für die Dichten von ρ und ν ist

$$p(\rho) = \frac{1}{(1+\rho)^2}, \quad p(\nu) = \frac{1}{(1+\nu)^2},$$

da dies wegen der Langschwänzigkeit nicht sehr informativ ist. Als a posteriori Dichte erhält man dann

$$p((m, \sigma^2, \rho, \nu)|\mathbf{z}) \propto \frac{p(\rho)p(\nu)}{(\sigma^2)^{n/2}(\det(C_n(\rho, \nu)))^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{z} - m\mathbf{1})^T C_n^{-1}(\mathbf{z} - m\mathbf{1})\right).$$

Die a posteriori Dichte gibt einem einmal eine Angabe, welche Parameterwerte im Lichte der Daten plausibel sind. Man ist also insbesondere an den Randdichten interessiert, weil man diese grafisch darstellen kann. Durch Ausintegrieren von m und σ^2 erhält man die gemeinsame Dichte von ρ und ν. Die Dichte von ρ, bzw. ν allein muss dann numerisch berechnet werden.

Die a posteriori Dichte spielt auch eine wichtige Rolle bei der Vorhersage für $Z(x_0)$. Gemäss dem Satz der totalen Wahrscheinlichkeit gilt

$$p(z(x_0)|\mathbf{z}) = \int \underbrace{p(z(x_0)|\mathbf{z}, m, \sigma^2, \rho, \nu)}_{\text{Normalverteilungsdichte}} \; p(m, \sigma^2, \rho, \nu|\mathbf{z}) \; dm \; d\sigma^2 \; d\rho \; d\nu$$

Statt geschätzte Parameter einzusetzen, wird in der Bayes'schen Statistik also gemittelt gemäss der a posteriori Verteilung.

2.5 Weitere Themen und Resultate

Wir geben hier noch einen stichwortartigen Überblick über weitere Themen und Resultate:

- Nugget-Effekt: falls vorhanden, dann $\widehat{Z}(x_0) \nrightarrow Z(x_i)$ falls $x_0 \to x_i$. Man macht dann also eine echte Glättung.
- Lineares Modell für $m(x)$:

$$m(x) = m + \sum_{j=1}^{p} \alpha_j f_j(x)$$

  Analoge Überlegungen wie vorher. Man kann lineare Vorhersagen betrachten, für die man die Koeffizienten α_j nicht braucht (universelles Kriging).
- Intrinsische Modelle höherer Ordnung. Statt für die Differenzen $Z(x+h)-Z(x)$ verlangt man Verschiebungsinvarianz nur für Zuwächse höherer Odrnung. Ein Beispiel einer Differenz zweiter Ordnung ist $Z(x+h)+Z(x-h)-2Z(x)$.
- Block-Kriging: Vorhersage von $\int_A Z(x)dx$ durch $\int_A \widehat{Z}(x)dx$.
- Nichtlineare Vorhersagen:
  - Transformieren (z. Bsp. mit Hilfe der log Funktion) führt auf log-normales Kriging.
  - Disjunctive Kriging. Hier betrachtet man Vorhersagen der Form $\widehat{Z}(x) = \sum g_i(Z(x_i))$.
- Anisotropie: Man kann ein anisotropes Variogramm schätzen, indem man die quadrierten Differenzen $(Z(x_i)-Z(x_j))^2$ zweidimensional als Funktion von $x_i - x_j$ glättet. Aus einem isotropen parametrischen Variogramm kann man mit $h \to \gamma(||Ah||)$ ein gültiges anisotropes Modell erhalten (entspricht einer Verzerrung des Raumes). Eine andere anisotrope Klasse bilden die Produktvariogramme $h \to \prod_{i=1}^{d} \gamma_i(h_i)$, wobei die γ_i beliebige Variogramme für $d = 1$ sind.

Kapitel 3

Markovmodelle auf einem Gitter

Die Spezifikation nicht-Gauss'scher Modelle $(Z_x; x \in \mathbb{R}^d)$ mit kontinuierlichem Parameter x ist schwierig. Einfacher ist es, ein Modell $(Z_x; x \in L)$ für ein grosses, aber endliches Gitter $L \subset \mathbb{R}^d$ zu definieren, zum Beispiel $L = \{1, 2, \ldots, N\}^d$. Dazu genügt es, die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsfunktion anzugeben, wenn Z_x diskret ist, bzw. die gemeinsame Dichte, wenn Z_x stetig ist. Wir verwenden in beiden Fällen die Bezeichnung Dichte und das Symbol $p(z)$. Ferner bezeichnen wir den Wertebereich von Z_x mit S, und wir nennen jede mögliche Realisierung $z \in S^L$ ein Bild.

3.1 Räumliche Markoveigenschaft

Gesucht sind Modelle mit einfacher Abhängigkeitsstruktur. Eine naheliegende Idee ist zu verlangen, dass $Z_A := (Z_x; x \in A)$ und $Z_B := (Z_x; x \in B)$ unabhängig sein sollen, wenn die Mengen $A \subset L$ und $B \subset L$ weit auseinander liegen. Ausgedrückt mit Hilfe der Dichte p heisst das

$$\int p(z) \prod_{x \in (A \cup B)^c} dz_x = \int p(z) \prod_{x \in A^c} dz_x \cdot \int p(z) \prod_{x \in B^c} dz_x.$$

(Im diskreten Fall hat man eine Summe an Stelle eines Integrals). Es ist jedoch nicht klar, welche Form p haben muss, damit diese Bedingung erfüllt ist.

Es stellt sich heraus, dass es einfacher ist, die Einfachheit einer Abhängigkeitsstruktur über die bedingten Verteilungen zu definieren. Zur Erinnerung: Die bedingte Dichte von Z_A gegeben Z_{A^c} ist gleich

$$p(z_A \mid z_{A^c}) = \frac{p(z)}{\int p(z) \prod_{x \in A} dz_x}.$$

Da der Nenner nur eine Normierung ist, kann man auch schreiben

$$p(z_A \mid z_{A^c}) \propto p(z),$$

wobei die Proportionalität heisst "bis auf Faktoren, die keine Variablen z_x mit $x \in A$ enthalten". Faktoren, die Variablen z_x mit $x \in A^c$ enthalten, werden also zur Proportionalitäts"konstanten" genommen.

Wir nennen nun $(Z_x; x \in L)$ ein räumliches Markovfeld, wenn die bedingte Dichte von Z_x gegeben $Z_{x^c} := (Z_{x'}; x' \neq x)$ nur abhängt von den Werten $Z_{x'}$, wo x' nahe bei x ist. Was

"nahe" heissen soll, kann man dabei frei festlegen. Das heisst, wir betrachten eine beliebige Nachbarschaftsrelation $x \sim x'$, welche symmetrisch und nicht reflexiv ist: $x \sim x' \Leftrightarrow x' \sim x$ und $x \nsim x$.

Definition 3.1 *$(Z_x; x \in L)$ heisst ein Markov-Feld bezüglich der Nachbarschaftsrelation $\sim$, falls*

$$p(z_x \mid z_{x^c}) = p(z_x \mid z'_{x^c})$$

für alle $x \in L$ und für alle $z, \bar{z}$ mit $z_{x'} = \bar{z}_{x'}$ sofern $x' \sim x$.

Dies kann man auch so formulieren, dass die bedingte Dichte von Z_x gegeben der Rest gleich der bedingten Dichte gegeben die Nachbarn sein soll:

$$p(z_x \mid z_{x^c}) = p(z_x \mid z_{\partial x})$$

wobei $\partial x = \{x' \in L; x' \sim x\}$ ist. Dies ist intuitiv klar, für einen formalen Beweis integriert man in

$$p(z) = p(z_x \mid z_{x^c}) \int p(z) dz_x$$

auf beiden Seiten über $z_{(x \cup \partial x)^c}$.

Als erstes, einfaches Beispiel betrachten wir Gauss'sche Markovfelder. Wir können die gemeinsame Dichte schreiben als

$$p(z) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(z-\mu)^T \Sigma^{-1}(z-\mu)\right) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} z^T \Sigma^{-1} z + z^T \Sigma^{-1} \mu\right).$$

Die bedingte Dichte von Z_x gegeben der Rest erhalten wir, indem wir alle Terme sammeln, in denen z_x vorkommt:

$$\begin{aligned} p(z_x | z_{x^c}) &\propto \exp\left((\Sigma^{-1}\mu)_x z_x - \frac{1}{2}(\Sigma^{-1})_{xx} z_x^2 - z_x \sum_{x' \sim x} (\Sigma^{-1})_{xx'} z_{x'}\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\Sigma^{-1})_{xx}\left(z_x - \frac{(\Sigma^{-1}\mu)_x}{(\Sigma^{-1})_{xx}} + \frac{\sum_{x' \sim x}(\Sigma^{-1})_{xx'} z_{x'}}{(\Sigma^{-1})_{xx}}\right)^2\right), \end{aligned}$$

Es handelt sich also wieder um eine Normalverteilungsdichte mit Erwartungswert

$$\mu_x - \frac{1}{(\Sigma^{-1})_{xx}} \sum_{x' \neq x} (\Sigma^{-1})_{xx'} (z_{x'} - \mu_{x'})$$

und Varianz $1/(\Sigma^{-1})_{xx}$. Ein Gauss'sches Feld ist daher genau dann ein Markovfeld, wenn

$$(\Sigma^{-1})_{xx'} \neq 0 \Rightarrow x \sim x',$$

d.h. wenn die inverse Kovarianzmatrix Σ^{-1} dünn besetzt ist.

Bevor wir untersuchen, wie die Dichte eines allgemeinen Markovfelds aussieht, diskutieren wir noch den Zusammenhang mit der zeitlichen Markoveigenschaft.

3.1.1 Zeitliche und räumliche Markoveigenschaft

Wir betrachten $L = \{1, 2, \ldots, N\}$ mit der üblichen Nachbarschaftsrelation $x \sim x' \Leftrightarrow x - x' = \pm 1$. Die räumliche Markoveigenschaft lautet dann

$$p(z_x \mid z_1, \ldots z_{x-1}, z_{x+1}, \ldots, z_N) = p(z_x \mid z_{x-1}, z_{x+1})$$

(mit einer offensichtlichen Modifikation am Rand).

Wenn $x \in \{1, 2, \ldots, N\}$ als Zeit interpretiert wird, ist auch die zeitliche Markoveigenschaft naheliegend, welche lautet:

$$p(z_x \mid z_1, \ldots, z_{x-1}) = p(z_x \mid z_{x-1}).$$

Unter allen vorangegangenen Werten ist also nur der letzte relevant für die Prognose des momentanen Wertes. Wenn dies gilt, sprechen wir von einem Markovprozess (im Unterschied zu einem Markovfeld).

Es ist nicht schwierig zu sehen, dass die räumliche Markoveigenschaft aus der zeitlichen folgt:

Lemma 3.1 *Ein Markovprozess ist auch ein Markov-Feld bezüglich der Relation* $x \sim x' \Leftrightarrow x - x' = \pm 1$.

Beweis: Aus der allgemeinen Regel

$$p(z_1, \ldots, z_N) = \prod_{n=1}^{N} p(z_n \mid z_1, \ldots, z_{n-1})$$

folgt, dass die gemeinsame Dichte eines Markovprozesses gegeben ist durch

$$p(z_1, \ldots, z_N) = p(z_1) \prod_{x=2}^{N} p(z_x \mid z_{x-1}). \tag{3.1}$$

Damit erhalten wir gemäss der Definition der bedingten Dichte

$$p(z_x | z_{x^c}) \propto p((z_1, \ldots, z_N)) \propto p(z_x | z_{x-1}) p(z_{x+1} | z_x)$$

Für $x = 1$ und $x = N$ gilt ein analoges Argument. □

Die Umkehrung ist komplizierter. Sie gilt, falls $p(z) > 0$ für alle z, siehe Abschnitt 3.2.3 unten.

3.2 Die Gibbsdarstellung für Markovfelder

Wie sieht $p(z)$ aus für ein Markov-Feld? Kann man $p(z_x \mid z_{\partial x})$ beliebig wählen und dann eine analoge Formel wie (3.1) anwenden? Dies werden wir in diesem Abschnitt untersuchen.

3.2.1 Der Satz von Hammersley-Clifford

Wenn wir jeweils zwei benachbarte Punkte von L durch eine Kante verbinden, erhalten wir einen (ungerichteten) Graphen. Um das Hauptresultat dieses Abschnitts formulieren zu können, brauchen wir noch einen Begriff aus der Graphentheorie:

Definition 3.2 *$C \subset L$ heisst Clique falls $x \in C, x' \in C$ impliziert $x = x'$ oder $x \sim x'$, d.h. falls C ein vollständiger Teilgraph ist.*

Satz 3.1 (Hammersley-Clifford ~ 1970**)** *Wenn $p(z) > 0$ für alle z, dann ist das zugehörige Zufallsfeld ein Markov-Feld genau dann, wenn Funktionen $g_C : S^C \longrightarrow \mathbb{R}^+$ existieren, so dass*

$$p(z) = \prod_{C \ Cliquen} g_C(z_C).$$

Beweis: Der Beweis von "$\Leftarrow$" geht analog zum Beweis des Lemmas 3.1 oben. Wir haben insbesondere

$$p(z_x \mid z_{x^c}) \propto \prod_{C; x \in C} g_C(z_C). \tag{3.2}$$

Für den Beweis von "$\Rightarrow$" fixieren wir ein beliebiges Bild w und definieren für $A \subset L$

$$\begin{aligned} \Psi_A(z_A) &= -\log(p(z_A w_{A^c})) \\ \Phi_A(z_A) &= \sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \Psi_B(z_B). \end{aligned}$$

Dabei bedeutet $z_A w_{A^c}$ einfach, dass wir auf A die Komponenten von z und auf dem Komplement die Komponenten von w nehmen.

Der Übergang von (Ψ_A) zu (Φ_A) heisst die *Moebiustransformation*. Die Umkehrung dieser Transformation lautet (siehe z.B. S. Lauritzen, Graphical Models (1966), Lemma A.2):

$$\Psi_A(z_A) = \sum_{B \subset A} \Phi_B(z_B).$$

Also gilt

$$p(z) = \exp\left(-\Psi_L(z)\right) = \exp\left(-\sum_{B \subset L} \Phi_B(z_B)\right) = \prod_{B \subset L} g_B(z_B)$$

mit $g_B(z_B) = \exp\left(-\Phi_B(z_B)\right)$

Es bleibt zu zeigen: Falls B keine Clique ist, dann ist $g_B \equiv 1$, bzw. $\Phi_B \equiv 0$. Sei also B mit $x \in B$, $x' \in B$, $x \neq x'$, $x \nsim x'$. Für $A \subset B \setminus \{x, x'\}$ definieren wir $A_1 = A \cup x$, $A_2 = A \cup x'$ und $A_3 = A \cup \{x, x'\}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \Phi_B(z_B) &= \sum_{A \subset B} (-1)^{|B|-|A|} \Psi_A(z_A) \\ &= \sum_{A \subset B \setminus \{x,x'\}} (-1)^{|B|-|A|} \left(\Psi_A(z_A) - \Psi_{A_1}(z_{A_1}) - \Psi_{A_2}(z_{A_2}) + \Psi_{A_3}(z_{A_3})\right) \\ &= \sum_{A \subset B \setminus \{x,x'\}} (-1)^{|B|-|A|} \log\left(\frac{p(z_{A_1} w_{A_1^c}) p(z_{A_2} w_{A_2^c})}{p(z_A w_{A^c}) p(z_{A_3} w_{A_3^c})}\right) \\ &= \sum_{A \subset B \setminus \{x,x'\}} (-1)^{|B|-|A|} \log\left(\frac{p(z_x | z_A w_{A_1^c}) p(w_x | z_{A_2} w_{A_3^c})}{p(w_x | z_A w_{A_1^c}) p(z_x | z_{A_2} w_{A_3^c})}\right). \end{aligned}$$

Jeder Term in der Summe ist gleich Null, weil $x \nsim x'$. □

Einige Bemerkungen und Folgerungen zu diesem wichtigen Satz:

- $\Phi_\emptyset = \Psi_\emptyset = -\log(p(w))$ ist eine Konstante. Es folgt:

$$p(z) \propto \prod_{C \text{ Clique}, C \neq \emptyset} g_C(z_C).$$

  Die Normierungskonstante lässt sich aber im Allgemeinen nicht berechnen. Im diskreten Fall hat man eine Summe mit sehr vielen Termen, und im stetigen Fall ein hochdimensionales Integral.

- Modelle dieser Form heissen *Gibbsverteilungen*. Sie spielen in der statistischen Mechanik eine wichtige Rolle. Dort ist Z_x der Spin des Teilchens an der Stelle x. Statt von einem Bild spricht man dann von einer Konfiguration. Die Grössen Φ_B und Ψ_B sind dann gleich T^{-1} mal das *Potential*, bzw. die Energie der Konfiguration z_B und T ist die absolute Temperatur. Es gilt also

$$p(z) \propto \exp(-\frac{1}{T}\text{Energie}).$$

  Wir nehmen die Temperatur T meist als eins an und verwenden auch für (Φ_C) die Bezeichnung Potential.

- Die Darstellung von $p(z)$ als $\prod g_C(z_C)$ ist nicht eindeutig (und damit natürlich das Potential (Φ_C) ebenfalls nicht). Das im Beweis konstruierte Potential hat die Eigenschaft $\Phi_C(z_C) = 0$ falls $z_x = w_x$ für ein $x \in C$. Mit dieser Zusatzbedingung ist (Φ_C) eindeutig.

- Wie bei Markovprozessen lässt sich also die gemeinsame Dichte als ein Produkt von Faktoren schreiben, die jeweils nur wenige Variablen enthalten. Die Faktoren sind aber *nicht* die bedingten Dichten von jeweils einer Variablen gegeben der Rest:

$$\prod_{x \in L} p(z_x \mid z_{\partial x}) \neq p(z),$$

  vergleiche (3.2). Links kommt nämlich g_C $|C|$–mal vor, ausserdem treten wegen der Normierung auch Faktoren g_A auf, wo A keine Clique ist.

- Sei $L \subset \mathbb{R}^d$ und $A \subset L$. Dann gilt die Beziehung

$$p(z_A|z_{A^c}) \propto \prod_{C; C \cap A \neq \emptyset} g_C(z_C),$$

  d.h. $p(z_A|z_{A^c})$ hängt nur von denjenigen Werten z_x ab, für die x zu einer Clique C mit $A \cap C \neq \emptyset$ gehört. In andern Worten, es muss ein $y \in A$ existieren mit $y \sim x$. Wir verwenden dafür die Notation $x \in \partial A$, zu interpretieren als: “Alle Punkte, die zu einem Punkt innerhalb von A benachbart sind”. Damit gilt die mehrpunktige Markoveigenschaft

$$p(z_A|z_{A^c}) = p(z_A|z_{\partial A}).$$

3.2.2 Beispiele

Binäre Markovfelder

Als erstes betrachten wir den Fall, wo $Z_x \in \{0, 1\}$ ("weiss", bzw. "schwarz"). Weiter wählen wir $w_x = 0$ für alle x ("alles weiss") als Bezugskonfiguration und wir betrachten ein normiertes Potential, d.h. $\Phi_C(z_C) = 0$ falls $z_x = 0$ für ein x in C. Dann gibt es Konstanten J_C derart dass

$$\Phi_C(z_c) \quad = \quad J_C \cdot \prod_{x \in C} z_x.$$

Damit ist also

$$p(z) \propto \exp\left(- \sum_C J_C \cdot \prod_{x \in C} z_x \right).$$

Falls $J_C < 0$ ist, so besteht eine erhöhte Tendenz, dass alle Punkte in C schwarz sind.

Die bedingten Verteilungen von $Z(x)$ gegeben den Rest sehen dann wie folgt aus

$$\mathrm{P}\left[z_x = 1 \mid z_{\partial x}\right] = \frac{\exp\left(- \sum_{C; x \in C} J_C \prod_{x' \in C, x' \neq x} z_{x'} \right)}{1 + \exp\left(- \sum_{C; x \in C} J_C \prod_{x' \in C, x' \neq x} z_{x'} \right)}$$

Den einfachsten Spezialfall erhalten wir, wenn wir $J_C = 0$ setzen, falls $|C| > 2$, d.h. es handelt sich um Paarpotentiale. Im Fall des kubischen Gitters mit $2d$ nächsten Nachbarn bestehen alle Cliquen nur aus einem oder zwei benachbarten Punkten, das heisst wir haben dann immer ein Paarpotential. Wir vereinfachen die Notation, indem wir J_x anstelle von $J_{\{x\}}$ schreiben und $J_{xy} = J_{yx} = \frac{1}{2} J_{\{x,y\}}$ setzen. Es gilt dann

$$p(z) \propto \exp\left(- \sum_{x \in L} J_x z_x - \sum_{x,y; x \sim y} J_{xy} z_x z_y \right).$$

Wir formen die zweite Summe in der Exponentialfunktion um. Weil $z_x^2 = z_x$, folgt

$$\sum_{x,y; x \sim y} J_{xy} z_x z_y = -\frac{1}{2} \sum_{x,y; x \sim y} J_{xy} (z_x - z_y)^2 + \sum_{x \in L} z_x \sum_{y \sim x} J_{xy},$$

und wir erhalten schliesslich

$$p(z) \propto \exp\left(- \sum_{x \in L} z_x (J_x + \sum_{y, y \sim x} J_{xy}) + \frac{1}{2} \sum_{x \sim y} J_{xy} (z_x - z_y)^2 \right).$$

Falls $J_x = -\sum_{y, y \sim x} J_{xy}$, dann besteht also eine Symmetrie bezüglich der Vertauschung von 0 und 1. $J_{xy} < 0$ bedeutet eine Tendenz benachbarter Punkte gleich zu sein ("Anziehung"), während $J_{xy} > 0$ einer Abstossung gleicher Werte entspricht. Wenn J_{xy} konstant gleich J ist hat man das sogenannte Ising-Modell. Dann wird in der zweiten Summe gezählt, wieviele Paare von benachbarten Punkten mit verschiedenen Werten es gibt. Bei nächsten Nachbarn ist dies einfach die Länge der Grenze zwischen den beiden Zuständen "schwarz" und "weiss'.

Beim kubischen Gitter mit $2d$ nächsten Nachbarn hat man für ein festes x wegen der Gibbsdarstellung $2d + 1$ freie Parameter für die Wahrscheinlichkeiten $\mathrm{P}\left[z_x = 1 | z_{\partial x}\right]$. Die Anzahl

möglicher Randbedingungen $z_{\partial x}$ ist jedoch $2^{2d} > 1 + 2d$. Man kann darum $\mathrm{P}\left[z_x = 1 | z_{\partial x}\right]$ im Unterschied zu zeitlichen Markovketten nicht beliebig wählen. Wegen der Gibbsdarstellung bestehen ausserdem Beziehungen zwischen diesen bedingten Wahrscheinlichkeiten für verschiedene x.

Oft erhält man aber interessantere Modelle, wenn man nicht nur Paarpotentiale betrachtet. Tjelmeland und Besag (1998) arbeiten mit einem hexagonalen Gitter und lassen "zweitnächste" Nachbarn zu. Es entstehen dann Cliquen der Grösse ≤ 7. Anstatt ein normiertes Potential zu nehmen, kann man $\Phi_C = 0$ setzen für $|C| < 7$. Mit Translations- und Rotationsinvarianz ergeben sich schliesslich 26 verschiedene Werte für Φ_C, d.h. man hat 26 freie Parameter.

Endliche oder abzählbare Wertebereiche

Die Menge S der möglichen Werte sei $\{0, 1, 2, \ldots, k\}$. Wenn diese $k+1$ Werte ungeordnete Kategorien, z.B. Farben, bezeichnen, dann ist ein naheliegende Modell gegeben durch

$$p(z) \propto \exp\left(-\sum_x \Phi_x(z_x) - \sum_{y \sim x} J_{xy} 1_{[z_x \neq z_y]}\right).$$

Wenn S ordinal ist, also z.B. $(k+1)$ Graustufen darstellt, ist dieses Modell nicht sinnvoll. Naheliegender ist dann ein Modell, wo

$$Z_x \mid Z_{\partial x} \sim \mathrm{Bin}\left(k, \pi(z_{\partial x})\right),$$

d.h. man hat eine Binomialverteilung für Z_x mit einer Erfolgswahrscheinlichkeit, die von den benachbarten Werten abhängt. Diese Abhängigkeit kann man aber nicht willkürlich festlegen, sondern es gibt Einschränkungen wegen der Gibbs'schen Form. Damit

$$p(z_x | z_{\partial x}) = \binom{k}{z_x} \pi(z_{\partial x})^{z_x} (1 - \pi(z_{\partial x}))^{k - z_x} \propto \binom{k}{z_x} \exp\left(z_x \log\left(\frac{\pi(z_{\partial x})}{1 - \pi(z_{\partial x})}\right)\right).$$

von der Gibbs'schen Form ist, muss die sogenannte log odds ratio gleich einem Polynom sein:

$$\log\left(\frac{\pi(z_{\partial x})}{1 - \pi(z_{\partial x})}\right) = -J_x - \sum_{C; x \in C} J_C \prod_{x' \in C \setminus x} z_{x'}.$$

Das ist analog zum Modell der logistischen Regression, wo die log odds ratio eine lineare Funktion der erklärenden Variablen ist. Da hier die gleiche Variable Z als Ziel- und als erklärende Grösse dient, spricht man auch von einem "autologistischen" Modell.

Schliesslich betrachten wir noch den Fall, wo S abzählbar ist. Dies tritt auf bei Zähldaten, z.B. die Anzahl Krankheitsfälle pro Ort. Wir suchen ein Modell, wo

$$Z_x \mid Z_{\partial x} \sim \mathrm{Pois}\left(\lambda(z_{\partial x})\right).$$

Das bedeutet

$$p(z_x | z_{\partial x}) = \exp\left(-\lambda(z_{\partial x})\right) \frac{\lambda(z_{\partial x})^{z_x}}{z_x!} \propto \exp\left(z_x \log \lambda(z_{\partial x}) - \log(z_x!)\right).$$

Damit dies von der Gibbs'schen Form ist, muss der Logarithmus von $\lambda(z_{\partial x})$ wie oben ein Polynom sein. Weil der Wertebereich nicht mehr endlich ist, tritt aber eine zusätzliche Komplikation auf: Man muss noch sicher stellen, dass die Normierung der Gibbsverteilung

$$\sum_z \exp\left(-\sum_x (\log(z_x!) + J_x z_x) - \sum_{C;|C|>1} J_C \prod_{x\in C} z_x\right)$$

endlich ist. Dies ist genau dann erfüllt, falls alle $J_{xy} \geq 0$ und $J_C = 0$ für $|C| > 2$. Dass dies hinreichend ist, sieht man leicht. Dann ist nämlich jeder Summand kleiner oder gleich

$$\prod_x \frac{\exp(-J_x z_x)}{z_x!}.$$

Für die Notwendigkeit betrachten wir z.B. den Fall, wo ein $J_{xy} < 0$ ist. Wir summieren nur über Bilder mit $z_x = z_y$ und $z_{x'} = 0$ für alle andern Orte. Dann erhalten wir

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \exp(-(J_x + J_y)k - J_{xy}k^2),$$

und dies ist unendlich wegen der Stirling-Formel. Andere Fälle gehen analog.

Weil $J_{xy} \geq 0$ bedeutet, dass grosse Werte bei den Nachbarn von x kleine Werte bei x begünstigen, ist das Modell nur beschränkt brauchbar.

3.2.3 Ergänzungen und Kommentare

Markovfelder auf einem unendlichen Gitter (zum Beispiel $\mathbb{Z}^d$). Die Menge aller Bilder z ist dann überabzählbar, und die Formel

$$p(z) \propto \exp(-\sum_C \Phi_C(z_C))$$

macht keinen Sinn mehr. Die Formeln für die bedingten Verteilungen von Z_x gegeben der Rest,

$$p(z_x \mid z_{x^c}) = p(z_x \mid z_{\partial x}) \propto \exp(-\sum_{C;x\in C} \Phi_C(z_C))$$

hingegen macht weiterhin Sinn (zumindest wenn jedes x nur endlich viele Nachbarn hat). Man definiert daher eine Gibbsverteilung auf dem unendlichen Gitter durch die Forderung, dass alle bedingten Verteilungen von Z_x gegeben der Rest von dieser Form sein müssen. Dann muss man natürlich zeigen, dass solche Gibbsverteilungen existieren. Dies kann man mit einem Grenzwert ("thermodynamischer Limes") tun.

Sei $L_n = \{-n, -n+1, \ldots, n\}^d \nearrow \mathbb{Z}^d$ für $n \to \infty$ und sei p_n ein Gibbsfeld auf L_n mit einem (translationsinvarianten) Potential. Wenn der Wertebereich von Z_x kompakt ist, dann existiert $\lim_{n\to\infty} p_n$ im Sinne der schwachen Konvergenz (wenn man zu einer Teilfolge übergeht). Unter Umständen hängt der Limes aber davon ab, wie man p_n am Rand von L_n definiert. Damit ist eine Gibbsverteilung auf einem unendlichen Gitter im Allgemeinen nicht eindeutig. Man spricht von *Phasenübergang.*

Zeitliche Markoveigenschaft Für $L = \{1, 2, \ldots, n\}$ mit nächsten Nachbarn impliziert die Gibbs'sche Form auch die zeitliche Markov-Eigenschaft.

Beweis: Die Cliquen bestehen entweder aus einem oder zwei benachbarten Punkten. Aus der Gibbsdarstellung folgt

$$p(z_k|z_{k-1},\dots,z_1) \propto p(z_1,\dots,z_k) = \sum_{z_{k+1},\dots,z_n} p(z) \propto \sum_{z_{k+1},\dots,z_n} \prod_{j=k}^{n} g_j(z_j) g_{j-1,j}(z_{j-1},z_j).$$

Offensichtlich kommen $z_{k-2},\dots,z_1$ nicht vor. □

Man kann jedoch Beispiele von Markovfeldern konstruieren, bei denen $p(z)$ null ist für gewisse z und wo die zeitliche Markoveigenschaft nicht gilt.

Randverteilungen kann man Im Allgemeinen nicht explizit berechnen. Im diskreten Fall gilt

$$p(z_x) = \sum_{z_{L\setminus x}} p(z) = \frac{\sum_{z_{L\setminus x}} \exp(-\sum_C \Phi_C(z_C))}{\sum_z \exp(-\sum_C \Phi_C(z_C))},$$

und man hat sowohl im Nenner als auch im Zähler zu viele Terme, über die summiert werden muss.

Verfeinerung oder Vergröberung des Gitters macht Probleme: Die Markov-Eigenschaft geht dabei im Allgemeinen verloren. Das sieht man am einfachsten im Gauss'schen Fall: Wenn man bei Σ Zeilen und Spalten streicht (oder hinzufügt), dann ändern sich alle Elemente von Σ^{-1}.

3.2.4 Schätzung der Potentiale

Die Gibbsdarstellung ergibt die richtige Parametrisierung der bedingten Verteilungen von Z_x gegeben den Rest. Wir betrachten nun das Problem, wie man die Potentiale aus einer Realisierung z von Z schätzen kann. Wir nehmen an, dass die Potentiale bis auf einen endlich dimensionalen Parameter θ bekannt sind: $\Phi_C(z_C) = \Phi_C(z_C,\theta)$. Üblicherweise nimmt man dazu an, dass das Potential translationsinvariant ist.

Die Maximum-Likelihood-Schätzung ist im Allgemeinen nicht direkt anwendbar. Im diskreten Fall gilt

$$p_\theta(z) = \frac{\exp(-\sum_C \Phi_C(z_C,\theta))}{\sum_{z'} \exp(-\sum_C \Phi_C(z'_C,\theta))},$$

Der Nenner, d.h. die Normierung, hängt ebenfalls von θ ab, lässt sich aber nicht explizit berechnen.

Es gibt Verfahren, die die Likelihoodfunktion mit Hilfe von Simulationen approximieren und dann diese approximative Likelihood maximieren. Wir gehen hier jedoch nicht darauf ein, sondern betrachten ein einfacheres Verfahren, welches die sogenannt Pseudo-Likelihood maximiert. Diese ist definiert als

$$L_p(\theta) = \prod_{x\in L} p_\theta(z_x \mid z_{\partial x}) = \prod_{x\in L} \frac{\exp(-\sum_{x\in C} \Phi_C(z_C,\theta))}{N(z_{\partial x},\theta)}.$$

Der entscheidende Punkt ist, dass man hier die Normierung $N(z_{\partial x},\theta)$ in vielen Fällen berechnen kann. Im diskreten Fall ist es eine Summe, wobei die Anzahl Summanden gleich der Anzahl möglicher Werte von einem Z_x ist.

Warum ist die Pseudo-Likelihood-Methode sinnvoll? Diese Methode gehört zur Klasse der M-Schätzer, und wir besprechen hier kurz die Heuristik für solche Schätzer.

Exkurs: M-Schätzer Wir betrachten eine (im Allgemeinen hoch-dimensionale) Zufallsvariable Z, deren Verteilung von einem Parameter θ abhängt. Dann sind M-Schätzer definiert durch

$$T(z) = \arg\max_{\theta} \rho(z, \theta)$$

wobei ρ eine zunächst beliebige "Kontrastfunktion" ist. Damit dies einen vernünftigen Schätzer definiert, müssen zwei Bedingungen erfüllt sein:

- Wenn $Z \sim p_{\theta_0}(z)$, dann gilt für alle $\theta \neq \theta_0$

  $$\mathbf{E}_{\theta_0}\left[\rho(Z, \theta)\right] < \mathbf{E}_{\theta_0}\left[\rho(Z, \theta_0)\right],$$

  d.h. die gemittelte Funktion ρ hat das Maximum beim wahren Parameter.

- $\rho(z, \theta)$ ist mit grosser Wahrscheinlichkeit nahe bei $\mathbf{E}_{\theta_0}\left[\rho(Z, \theta)\right]$.

In unserem Fall ist

$$\rho(z, \theta) = \sum_{x \in L} \log\left(p_\theta(z_x | z_{\partial x})\right).$$

Um die erste Bedingung zu verifzieren, berechnen wir den Erwartungswert von einem Summanden in $\rho(Z, \theta)$:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{E}_{\theta_0}\left[\log\left(p_\theta(Z_x | Z_{\partial x})\right)\right] \\
&= \mathbf{E}_{\theta_0}\left[\mathbf{E}_{\theta_0}\left[\log(p_\theta(Z_x | Z_{\partial x})) \mid Z_{\partial x}\right]\right] = \mathbf{E}_{\theta_0}\left[\int p_{\theta_0}(z_x | Z_{\partial x}) \log\left(p_\theta(z_x | Z_{\partial x})\right) dz_x\right] \\
&= \mathbf{E}_{\theta_0}\left[\int p_{\theta_0}(z_x | Z_{\partial x}) \log\left(p_{\theta_0}(z_x | Z_{\partial x})\right) dz_x + \int p_{\theta_0}(z_x | Z_{\partial x}) \log\left(\frac{p_\theta(z_x | Z_{\partial x})}{p_{\theta_0}(z_x | Z_{\partial x})}\right) dz_x\right].
\end{aligned}$$

Das zweite Integral ist stets negativ, weil

$$\log\left(\frac{p_\theta(z_x | z_{\partial x})}{p_{\theta_0}(z_x | z_{\partial x})}\right) \leq \frac{p_\theta(z_x | z_{\partial x})}{p_{\theta_0}(z_x | z_{\partial x})} - 1,$$

und die Ungleichung ist strikt, ausser wenn $p_\theta(z_x | z_{\partial x}) \equiv p_{\theta_0}(z_x | z_{\partial x})$.

Für die zweite Bedingung braucht man ein Gesetz der Grossen Zahlen. Wir gehen nicht weiter darauf ein.

3.3 Anwendungen

3.3.1 Klassifikation und Synthese von Texturen

Bei der Synthese von Texturen sucht man einen Algorithmus zur Erzeugung künstlicher Texturen, die sich visuell nicht wesentlich von einer vorgegebenen Textur unterscheiden. Eine Möglichkeit dafür ist die Simulation von einem Markovfeld, bei dem das Potential aus der vorgegebenen Textur geschätzt wurde. Die Schätzung der Potentiale kann mit der Maximierung der Pseudo-Likelihood erfolgen. Die Simulation von Markovmodellen besprechen wir in dieser Vorlesung nur am Rande, da dies in der Vorlesung "Stochastische Simulation" ausführlicher geschieht. Alle Verfahren sind iterativ, d.h. man erzeugt nicht eine Realisierung auf einen Schlag, sondern man beginnt mit irgendeiner Bild und modifiziert dann diese iterativ so, dass sich im Limes eine Realisierung gemäss dem Markovmodell

ergibt. Der einfachste Algorithmus ist der Gibbs-Sampler: Dabei wird jeweils die Bild nur an einem Punkt x modifiziert gemäss der richtigen bedingten Verteilung $p(z_x \mid z_{\partial x})$.

Es ist jedoch ziemlich schwierig, mit diesem Vorgehen gute Resultate zu erhalten. Die Bilder in *Cross & Jain, IEEE Pattern Anal. Machine Intell. 5, 1983* sind vermutlich fast "zu gut", weil der Simulationsalgorithmus nicht oft genug iteriert wurde.

Die Klassifikation von Texturen ist einfacher: Zur Verfügung steht ein Trainingsdatensatz von Texturen, die in endlich viele mögliche Klassen eingeteilt sind. Damit soll ein Algorithmus konstruiert werden, der eine neue Textur automatisch einer dieser Klassen zuordnen kann. Anstatt direkt das ganze Bild als Input eines Klassifikationsverfahrens zu benutzen, ist es meist besser, zunächst gewisse "Features" aus dem Bild zu extrahieren (Dimensionsreduktion), die man dann als Input nimmt. Die geschätzten Potentiale eines Markovfelds ergeben oft sehr trennscharfe Features.

Diese Idee wurde von *Baron et al.,Technometrics 43, 2001* verwendet. In dieser Arbeit geht es um die Qualitätskontrolle bei der Fabrikation von Halbleitern. Dabei werden Chips auf eine dünne Silikonplatte (Wafer) aufgebracht. Man möchte die räumliche Anordnung von defekten Chips auf einem Wafer benutzen, um fehlerhafte Wafers einem von acht möglichen Ursachen im Produktionsprozess zuordnen zu können. Dazu werden funktionierende/defekte Chips als 0/1 kodiert und an das so entstandende Bild wird ein Markovmodell mit 8 nächsten Nachbarn und 10 unbekannten Werten des Potentials angepasst. Dies 10 Werte dienen dann als Input eines neuronalen Netzes zur Klassifikation.

3.3.2 Bildrekonstruktion

Sei $z = (z_x)_{x \in L}$ das "richtige", ungestörte Bild, das wir aber nicht beobachten können. Wir sehen nämlich nur $y = (y_x)_{x \in L'}$, ein gestörtes, degradiertes Bild, das verrauscht und verschmiert wurde. Das beobachtete Bild kann sogar auf einem andern Gitter L' statt L gegeben sein. Der Zusammenhang zwischen z und y ist gegeben durch

$$y_x = \sum_{x'} \gamma(x, x') z_{x'} + \varepsilon_x,$$

wo $\gamma(\cdot)$ die sogenannte *point-spread-Funktion* und die Fehler ε_x unabhängig sind mit $\varepsilon_x \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma_\varepsilon^2\right)$. Wenn wir mit $N(x)$ die Menge aller Punkte $x' \in L$ bezeichnen, für die $\gamma(x, x') \neq 0$ ist, dann gilt

$$y \mid z \sim \prod_{x \in L'} q\left(y_x \mid z_{N(x)}\right),$$

mit

$$q(y_x \mid z_{N(x)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\varepsilon} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2}\left(y_x - \sum_{x'} \gamma(x, x') z_{x'}\right)^2\right).$$

Statt additivem Gauss'schen Rauschen können wir allgemeinere bedingte Verteilungen q betrachten, z.B. für binäre Beobachtungen

$$\frac{\mathrm{P}\left[Y_x = 1 | z\right]}{\mathrm{P}\left[Y_x = 0 | z\right]} = \exp\left(\alpha + \sum_{x'} \gamma(x, x') z_{x'}\right)$$

oder für Anzahlen

$$y_x | z \sim \mathrm{Pois}\left(\exp(\alpha + \sum_{x'} \gamma(x, x') z_{x'})\right).$$

Ohne die dazwischengeschaltete Exponentialfunktion tritt der letzte Fall auf bei SPECT (single photon emission computerized tomography) : Dabei ist z_x die unbekannte Isotopenkonzentration an der (diskretisierten) Stelle x und $\gamma(x, x')$ ist proportional zur Wahrscheinlichkeit, dass ein an der Stelle x emittiertes Photon an der Stelle x' des Detektors ankommt. Das gleiche Modell tritt auch bei der Modellierung der räumlichen Verteilung von Krankheiten auf: Dort ist z_x die unbekannte Rate im Distrikt x, $\alpha = \alpha_x$ ist die logarithmierte Grösse der Risikopopulation im Distrikt x und $\gamma(x, x') = 0$ für $x \neq x'$.

Die Rekonstruktion von z aus y ist (wie die meisten Aufgaben in der Statistik) ein sogenanntes *inverses Problem*. Wir können die wahren, aber unbekannten Bildwerte$(z_x)_{x\in L}$ als unbekannte Parameter betrachten. Die Maximum-Likelihood-Methode

$$\widehat{z} = \arg\max_z \sum_x \log q(y_x \mid z_{N(x)})$$

liefert aber meist keine brauchbare Schätzung, weil die Anzahl zu schätzender Parameter gleich der Anzahl Beobachtungen ist. Dies sieht man sehr leicht im Fall, wo $y_x = z_x + \varepsilon_x$. Dann ist

$$\log q(y_x \mid z_{N(x)}) = -\frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2} \sum_x (y_x - z_x)^2 + \text{const.},$$

und damit ist der Maximum Likelihood Schätzer $\widehat{z}_x = y_x$. Die Schätzung des Originalbildes ist einfach gleich dem beobachteten, verrauschten Bild. Eine alternative Möglichkeit wäre die Verwendung des Steinschätzers $\widehat{z}_x = \lambda y_x + (1 - \lambda)\bar{y}$. Weil hier nur mit dem globalen Mittelwert korrigiert wird, ist dieses Vorgehen aber ebenfalls ungenügend.

Die sinnvollste Ansatz zur Bildrekonstruktion ist das Ausnützen von Vorinformationen der Art "benachbarte Werte sind ähnlich". Dies entspricht einem Bayes-Ansatz, d.h. wir arbeiten mit einer a-priori-Verteilung $z \sim \pi(z)$, welche Bilder z bevorzugt, bei denen benachbarte Werte ähnlich sind. Die Bayes-Formel ergibt dann die a-posteriori-Verteilung

$$p(z \mid y) \propto \pi(z) \prod_{x\in L'} q(y_x \mid z_{N(x)}).$$

Als Schätzung von z wird entweder der Modus dieser a posteriori Verteilung (abgekürzt *MAP*) verwendet:

$$\widehat{z} = \arg\max_z p(z \mid y) = \arg\max_z \log(p(z \mid y)) = \arg\max_z (\log \pi(z) + \sum_{x\in L'} \log q(y_x \mid z_{N(x)})),$$

oder der Erwartungswert von z bezüglich der a posteriori Verteilung: $\widehat{z} = (\widehat{z}_x; x \in L)$ mit

$$\widehat{z}_x = \mathbf{E}\,[Z_x|y] = \int \ldots \int z_x p(z|y) \prod_{x'\in L} dz_{x'}.$$

Der MAP-Schätzer unterscheidet sich vom Maximum Likelihood Schätzer durch den zusätzlichen Term $\log \pi(z)$ in der zu maximierenden Funktion. Dies kann als zusätzlicher Regularisierungsterm aufgefasst werden: Bilder mit tiefer a priori Wahrscheinlichkeit werden bestraft.

Um das Vorgehen in die Praxis umzusetzen, müssen wir den Mittelwert oder den Modus der a-posteriori-Verteilung berechnen können und eine geeignete a-priori-Verteilung $\pi(\cdot)$ wählen.

Markovfelder als a priori Verteilungen

Wir betrachten als a priori Verteilungen spezielle Gibbs-Verteilungen

$$\pi(z) \propto \exp\left(-\beta_1 \sum_x \phi(z_x) - \beta_2 \sum_{x\sim x'} \rho\left(\frac{z_x - z_{x'}}{\delta}\right)\right)$$

mit einer geeigneten Nachbarschaftsrelation $x \sim x'$. Die Funktion ρ ist gerade mit $\rho(0) = 0$ und $\rho(z) > 0$ für $z \neq 0$. Für $\beta_2 > 0$ bevorzugt diese a priori Verteilung also lokal konstante Bilder. Wenn der Wertebereich $S \subset \mathbb{R}$ gross ist, ist die Form von ρ für die Eigenschaften von $\widehat{z}$ ziemlich wichtig. Man kann mindestens die folgenden Fälle unterscheiden:

$$\begin{aligned}
\rho(z) &= \frac{z^2}{2}, \\
\rho(z) &= \begin{cases} \frac{z^2}{2} & \text{falls } |z| \leq 1 \\ |z| - \frac{1}{2} & \text{falls } |z| \geq 1 \end{cases} \\
\rho(z) &= \frac{z^2}{1+z^2}.
\end{aligned}$$

Der zweite Fall gehört zum Typ "ρ konvex mit linearer Asymptote" und enthält im Grenzfall $\delta \to 0$ den Fall $\rho(z) = |z|$. Der dritte Fall ist konvex in der Mitte und beschränkt. Im Extremfall erhält man $\rho(z) = 1_{\{z\neq 0\}}$. Der Unterschied liegt darin, wie stark die zugehörige a priori Dichte Sprünge, die von Kanten im Bild herrühren, durch niedrige Wahrscheinlichkeit bestraft. Bei quadratischem ρ ist diese Bestrafung am stärksten und nimmt dann sukzessive ab.

Die Funktion ϕ erlaubt es noch, a priori zwischen den verschiedenen möglichen Werten zu differenzieren. Meist wird $\phi \equiv 0$ gesetzt, so dass alle möglichen Werte a priori gleich wahrscheinlich sind. Wenn S unbeschränkt ist, ist dann aber $\pi(z)$ keine Verteilung mehr (die Normierung ist unendlich).

Der schwierigste Punkt bei der Wahl der a priori Verteilung ist die Festlegung der Parameter β_1, β_2 und δ. Wir diskutieren die Wahl dieser Parameter unten noch etwas genauer.

Die a priori Verteilung ist also ein Markovfeld. Um zu entscheiden, ob die a posteriori Verteilung auch wieder die Markoveigenschaft hat, berechnen wir die bedingten Dichten

$$p(z_x \mid z_{x^c}, y) \propto \pi(z) \prod_{x'\in L} q(y'_x \mid z_{N(x')}) \propto \prod_{C, x\in C} g_C(z_C) \prod_{x', x\in N(x')} q(y'_x \mid z_{N(x')}).$$

Auf der rechten Seite kommt daher $z_{x''}$ nur vor, wenn entweder $x'' \sim x$ oder wenn ein x' existiert, so dass $x \in N(x')$ und $x'' \in N(x')$. Wenn die Verschmierung nur Punkte in der Nachbarschaft involviert, dann ist also die a posteriori Verteilung wieder ein Markovfeld, allerdings "verdoppelt" sich die Nachbarschaft. Falls es keine Verschmierung gibt, so sind die Nachbarschaften der a priori und der a posteriori Verteilung identisch. Dies wird die Berechnung von $\widehat{z}$ etwas vereinfachen.

Berechnung von $\widehat{z}$

Wir betrachten zunächst den MAP

$$\widehat{z} = \arg\max_z \left(\log \pi(z) + \sum_x \log q(y_x | z_{N(x)})\right).$$

Wenn die a priori-Verteilung und die $q(y_x|z_{N(x)})$ Gauss'sch sind, dann kann man $\widehat{z}$ geschlossen berechnen:

$$\widehat{z} = \arg\min_z \left(z^T \Sigma^{-1} z + + \frac{1}{\sigma_\varepsilon^2} (y - \Gamma z)^T (y - \Gamma z) \right).$$

Auf der rechten Seite steht eine quadratische Form in z, und die Bestimmung von arg min führt auf ein lineares Gleichungssystem. Die Berechnung sind zwar einfach, aber die Resultate sind im allgemein nicht befriedigend: Innerhalb von homogenen Regionen wird zuwenig geglättet oder die Kanten werden verschmiert oder beides.

In den meisten andern Fällen muss man iterative Verfahren zur Berechnung von $\widehat{z}$ verwenden. Ein einfacher Algorithmus ist die iterative Maximierung bezüglich einer Komponente, wobei alle anderen Komponenten festgehalten werden.

$$\widehat{z}_x^{neu} = \arg\max_{z_x} p(z_x \widehat{z}^{alt}_{L\setminus\{x\}} \mid y) = \arg\max_{z_x} p(z_x \mid \widehat{z}^{alt}_{L\setminus\{x\}}, y).$$

Wie wir oben gesehen haben, hängt die zu maximierende Funktion dann nur von wenigen Werten $z^{alt}_{x'}$ ab, was die Berechnungen vereinfacht. Die Nachteile dieses Verfahrens sind, dass häufig viele Iterationen notwendig sind (wenn die Funktion einen langen schmalen Grat hat, der nicht parallel zu einer Koordinatenachse läuft), und dass man in einem lokalen Maximum steckenbleiben kann.

Nebenmaxima können nicht auftreten, wenn der Wertebereich von Z_x ein Intervall ist und wenn die zu maximierende Funktion konkav ist. In allen Beispielen, die wir angeschaut haben, ist $\sum_x \log q(y_x \mid z_{N(x)})$ konkav in z. Die Berechnung von MAP vereinfacht sich daher, wenn man auch $\log \pi(z)$ konkav wählt. Insbesondere kann es von Vorteil sein, die Funktion ρ von vorher konvex zu wählen. Konkavität der Zielfunktion allein genügt aber nicht, damit die iterative Maximierung bezüglich einer Komponente gegen das eindeutige Maximum konvergiert: Man kann leicht Gegenbeispiele mit zwei Punkten und $\rho(z) = |z|$ konstruieren. Für die Konvergenz braucht man noch Differenzierbarkeit.

Dass in der Regel viele lokale Maxima existieren, sieht man an folgendem Beispiel.

Beispiel 3.1 *Seien (z_x) und (y_x) binär (wir betrachten also schwarz/weiss Bilder). Weiter ist $\pi(z)$ ein Markovfeld:*

$$\pi(z) \propto \exp\left(-\beta \sum_{x \sim x'} 1_{[z_x = z_{x'}]}\right),$$

für verschiedene x, sind die y_x bedingt unabhängig und $y_x = z_x$ mit Wahrscheinlichkeit p und $y_x = 1 - z_x$ mit Wahrscheinlichkeit $1 - p$. Dies kann man schreiben als

$$\log p(y_x \mid z_x) = \log(1-p) + 1_{[y_x = z_x]} \log(p/(1-p)).$$

Damit ist die a posteriori Verteilung

$$\log p(z \mid y) = \gamma \sum_x 1_{[z_x = y_x]} - \beta \sum_{x \sim x'} 1_{[z_x = z_{x'}]} + \ \textit{const.},$$

wobei $\gamma = \log(p/(1-p))$. Für $\beta > 0$ und $\gamma > 0$ betrachten wir das folgende beobachtete Bild y:

Dann ist $z = y$ ein lokales Maximum, aber das folgende Bild z hat höhere a posteriori Wahrscheinlichkeit, falls $3\gamma < 2\beta$ ist

Um aus lokalen Maxima herauszukommen, verwendet man randomisierte Algorithmen. Die einfachste Form eines solchen Algorithmus' ist die folgende. Man hält iterativ alle Werte ausser an einem Punkt x fest, und man wählt einen Kandidaten ζ für z_x zufällig. Dann setzt man

$$\widehat{z}_x^{neu} = \begin{cases} \zeta & \text{mit Wahrscheinlichkeit} \quad \min\left(1, \left(\frac{p(\zeta, z^{alt}_{L\setminus\{x\}}|y)}{p(\widehat{z}^{alt}|y)}\right)^{1/T}\right) \\ \widehat{z}_x^{alt} & \text{mit Wahrscheinlichkeit} \quad 1 - \min\left(1, \left(\frac{p(\zeta, z^{alt}_{L\setminus\{x\}}|y)}{p(\widehat{z}^{alt}|y)}\right)^{1/T}\right) \end{cases}$$

Wenn der Kandidat die a posteriori Wahrscheinlichkeit vergrössert, nimmt man ihn auf jeden Fall, sonst nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit, die davon abhängt, wieviel kleiner die a posteriori Wahrscheinlichkeit ist. $T = \infty$ entspricht einer reinen Zufallssuche und $T = 0$ einem iterativen Maximieren wie vorher. Man sucht ein Kompromiss: $T \longrightarrow 0$ langsam im Iterationsprozess (simuliertes annealing).

Die Berechnung des a posteriori Erwartungswert wird mit Simulation durchgeführt. Um zu simulieren, kann man gleich vorgehen wie bei simuliertem annealing, aber mit $T = 1$ fest. Für den Erwartungswert wird über die verschiedenen $\widehat{z}_x^{(j)}$ gemittelt:

$$\widehat{z}_x = \frac{1}{R}\sum_{j=1}^{R} \widehat{z}_x^{(j)}.$$

3.3.3 Schätzung der Parameter

Wenn es unbekannte Parameter in $p(y|z)$ bzw. $\pi(z)$ gibt, müssen diese geschätzt, bzw. festgelegt werden. Dies kann auf mehrere Arten geschehen:

- Durch Kalibrierungsexperimente: Man kann z.B. ein typisches, unverrauschtes Bild nehmen, Rauschen dazu addieren und dann testen, welche a priori Verteilungen zu guten Rekonstruktionen führen.
- Aus dem beobachteten y allein, z.B. mit Kreuzvalidierung, Maximierung der marginalen Likelihood oder mit hierarchischen Bayes-Verfahren.

Die Verfahren, die rein auf den beobachteten Daten basieren, sind allerdings alle schwierig zu berechnen. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass nur die a priori Dichte $\pi_\theta(z)$ von einem unbekannten Parameter θ abhängt, während die bedingte Dichte $p(y|z)$ bekannt ist (was in unseren Anwendungen mindestens approximativ richtig ist).

Die marginale Likelihood ist definiert als

$$p_\theta(y) = \int p(y \mid z)\pi_\theta(z)dz,$$

und man kann versuchen, θ so zu bestimmen, dass diese marginale Likelihood maximal wird. Für $\pi_\theta(z) \propto \exp(-\theta U(z))$, ist

$$p_\theta(y) = \frac{\int p(y \mid z) \exp(-\theta U(z)) dz}{\int \exp(-\theta U(z)) dz}.$$

Dies kann man auffassen als einen Quotienten von zwei Normierungskonstanten, den man höchstens approximativ bestimmen kann.

Bei der Kreuzvalidierung maximiert man nicht die marginale Likelihood, sondern analog zur Pseudo-Likelihood das Produkt

$$\prod_{x \in L'} p_\theta(y_x \mid y_{x^c}).$$

Wenn wir wie zuvor annehmen, dass $p(y \mid z) = \prod_x q(y_x \mid z)$, dann gilt

$$p_\theta(y_x \mid y_{x'}, x' \neq x) = \int q(y_x \mid z) p_\theta(z \mid y_{x'}, x' \neq x) dz = \frac{\int q(y_x \mid z) \prod_{x' \neq x} q(y_{x'} \mid z) \pi_\theta(z) dz}{\int \prod_{x' \neq x} q(y_{x'} \mid z) \pi_\theta(z) dz}.$$

Dies kann man auch wieder auffassen als den Quotienten von zwei Normierungskonstanten, aber die folgende Interpretation bringt mehr

$$p_\theta(y_x \mid y_{x^c}) = \left(\int \frac{1}{q(y_x \mid z)} \, \pi_\theta(z \mid y) dz \right)^{-1}.$$

Wenn man gemäss der a posteriori Verteilung $\pi_\theta(z \mid y)$ simuliert, um den a posteriori Erwartungswert zu berechnen, dann kann man damit gleichzeitig auch noch das Kreuzvalidierungskriterium approximieren. Eine andere mögliche Approximation lautet

$$p_\theta(y_x \mid y_{x^c}) \approx q(y_x \mid \widehat{z}^{(-x)}),$$

wobei

$$\widehat{z}^{(-x)} = \arg\max p_\theta(z \mid y_{x^c}) = \arg\max \Big(\sum_{x' \neq x} \log(q(y_{x'} \mid z)) + \log(\pi_\theta(z)) \Big)$$

der MAP-Schätzer ohne die Beobachtung y_x ist. Dies kann man näherungsweise berechnen, indem ausgehend vom MAP iterativ eine Komponente von z maximiert und die andern Komponenten festhält.

Als Bayesianer würde man für die Schätzung von θ eine weitere a priori Dichte $p_0(\theta)$ für θ annehmen. Man spricht dann von einem hierarchischen Modell: Auf der untersten Stufe ist das beobachtete Bild y, auf der mittleren Stufe das ungestörte Bild z und zuoberst der Parameter θ. Die gemeinsame Dichte von (θ, z, y) ist

$$p(\theta, z, y) = p_0(\theta) \pi_\theta(z) p(y|z),$$

und die gemeinsame a posteriori Dichte von θ und z gegeben y ist

$$p(\theta, z \mid y) \propto p_0(\theta) \pi_\theta(z) p(y|z).$$

Diese a posteriori Dichte möchte man nun als Bayesianer simultan bezüglich θ und z maximieren, bzw. man möchte den a posteriori Erwartungswert

$$\widehat{z}_x = \mathbf{E}[z_x \mid y] = \int_{S^L} \int_\Theta z_x p(\theta, z \mid y) d\theta dz = \int_\Theta \int_{S^L} z_x p(z \mid \theta, y) dz \; p(\theta \mid y) d\theta$$

berechnen. Diese Grössen sind aber im Allgemeinen noch schwieriger zu berechnen, weil jetzt zum hochdimensionalen z noch eine zusätzliche Variable auftritt.

Im folgenden wichtigen Spezialfall kann man die Normierungskonstante angeben: Wenn $S = \mathbb{R}$ und $U(z)$ homogen ist vom Grad p, d.h. $U(cz) = c^p U(z)$, dann folgt mit einer Substitution, dass die Normierung $N(\theta)$ der Gibbs-Verteilung

$$\pi_\theta(z) = N(\theta)^{-1} \exp(-\theta U(z))$$

die Form hat

$$N(\theta) = \theta^{|L|/p} N(1).$$

Ein wichtiges Beispiel ist

$$U(z) = \sum_{x \sim x'} |z_x - z_{x'}|^p.$$

Allerdings führt das auf eine uneigentliche Verteilung: Weil $U(z)$ konstant ist in der Richtung $(1, 1, \ldots, 1)$, gilt $N(\theta) = \infty$ für alle θ. Wenn man π_θ als Dichte auf dem Unterraum der Zuwächse von (Z_x) auffasst, dann erhält man mit dem gleichen Argument

$$N(\theta) = \theta^{(|L|-1)/p} N(1).$$

Für solche a priori Dichten kann man damit die gemeinsame a posteriori Dichte $p(\theta, z|y)$ maximieren, bzw. gemäss dieser Dichte simulieren.

Kapitel 4

Kurzer Ausblick auf Wavelets

4.1 Grundidee, 1-dimensional

Wir beschränken uns zunächst auf den 1-dimensionalen Fall, ohne Verschmierung, nur mit additivem Rauschen. Das heisst

$$Y = Z + \varepsilon$$

mit $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)^T$, $Z = (Z_1, \ldots, Z_n)^T$, $\varepsilon = (\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n)^T$ und $\varepsilon_x \overset{iid}{\sim} \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$.

Für eine beliebige orthogonale Matrix A gilt

$$AY = AZ + A\varepsilon = AZ + \eta,$$

wobei η wiederum $\overset{iid}{\sim} \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$ ist. Die Grundidee ist nun, A so zu wählen, dass das Produkt AZ auf wenige Stellen konzentriert ist, d.h. $|(AZ)_x|$ klein für die "meisten" x. Beachte, dass

$$\sum_x AZ_x^2 = \sum_x Z_x^2$$

gilt. Das heisst, wenn $|(AZ)_x|$ klein ist für die "meisten" x, dann muss $|(AZ)_x|$ gross sein für die übrigen Stellen x. Da das Rauschen η_x überall etwa gleich ist, folgt damit

$$\begin{aligned} (AY)_x &\approx (AZ)_x, \text{ falls } |(AY)_x| \text{ gross;} \\ (AY)_x &\approx \eta_x, \text{ falls } |(AY)_x| \text{ klein.} \end{aligned}$$

Daher sollte die Rekonstruktion

$$\widehat{Z} = A^T(t(AY))$$

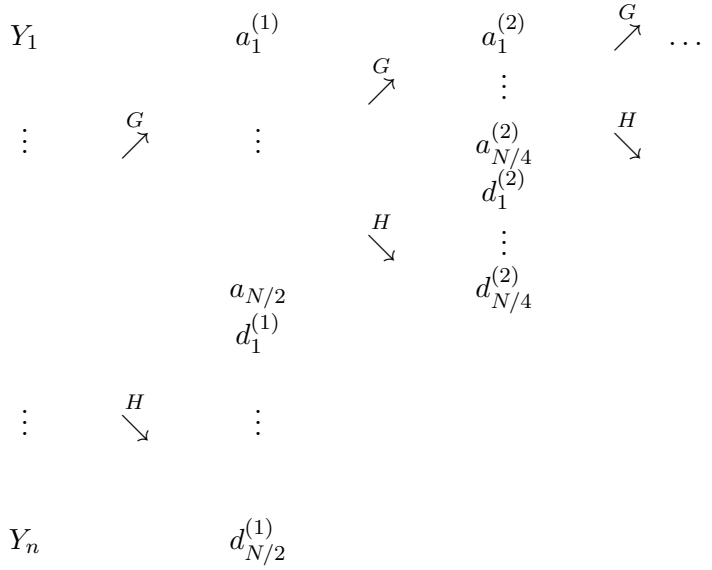
eine gute Schätzung von Z darstellen, wenn wir $t(AY) = (t((AY)_1), \ldots t((AY)_n))$ komponentenweise definieren und für t die sogenannte "soft thresholding"-Funktion wählen

$$t(u) = \begin{cases} 0, & \text{falls } |u| \leq c\sigma \\ u - \operatorname{sign}(u) \cdot c\sigma, & \text{falls } |u| > c\sigma. \end{cases}$$

Im Allgemeinen wählt man $c \approx 3\sigma$, bzw. $c \approx \sqrt{2 \log N}\sigma$.

4.2 Konstruktion der orthogonalen Matrix A

Der ursprüngliche Vektor $(Y_1, \ldots, Y_n)^T$ wird sukzessive transformiert,



so dass das Schlussresultat nur noch $d^{(1)}, d^{(2)}, \ldots, d^{(j)}$ und $a^{(j)}$ enthält. Die beiden Abbildungen G und H sind definiert als

$$\begin{aligned} a_x^{(j)} &= \sum_{k=0}^{L-1} g_k a_{2x-k}^{(j-1)} \\ d_x^{(j)} &= \sum_{k=0}^{L-1} h_k a_{2x-k}^{(j-1)}. \end{aligned}$$

Die Indizes werden dabei periodisch fortgesetzt, g_k und h_k werden so gewählt, dass die Transformation orthogonal ist und so dass G bzw. H sogenannte Tief- bzw. Hochpassfilter sind. Dies bedeutet, dass G die hochfrequenten Anteile eliminiert und die niedrigfrequenten Anteile belaesst, während es bei H gerade umgekehrt ist. Daher stellen $a^{(j)}$ die Approximation auf der j-ten Skala dar und $d^{(j)}$ die Details auf der j-ten Skala.

Beispiel 4.1 *Sei $L = 2, g_0 = g_1 = 1/\sqrt{2}, h_0 = 1/\sqrt{2}, h_1 = -1/\sqrt{2}$. Das heisst, G bildet bis auf einen Faktor die Mittelwerte zweier aufeinanderfolgender Werte, und H die Differenzen.*

Weshalb der Name "Wavelet"(kleine Welle) ? Da $Y = A^T(AY)$, wrid Y dargestellt als eine Linearkombination der Zeilen von A. Diese Zeilen sehen nun aus wie verschobene und skalierte Wellenpakete Die k-te Zeile im j-ten Block entspricht approximativ einer Skalierung und Verschiebung einer festen Funktion ψ, nämlich $\psi(2^{-j}(x-k))$.

4.3 Grundidee, 2-dimensional

Die Grundidee im 2-dimensionalen Fall ist dieselbe wie 1-dimensional: Transformieren, thresholding, Rücktransformieren. Der Prozess läuft jetzt jedoch simultan in zwei Dimensionen ab. Die Transformation dd bedeutet dann, dass H sowohl horizontal wie auch

vertikal auf Y angewandt wird. Sie ist definiert durch

$$dd^{(j)}_{(x_1,x_2)} = \sum_{k_1,k_2} h_{k_1} h_{k_2} aa^{(j-1)}_{(2x_1-k_1,2x_2-k_2)}$$

Sinngemäss bedeutet dann ad, dass H horizontal und G vertikal angewandt wird. da heisst H vertikal und G horizontal, aa heisst G vertikal und horizontal. Im Beispiel 4.1 entspricht dies:

$$\begin{aligned}
aa^{(1)} &= 1/2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \text{“Summe von 4-er Blöcken”} \\
ad^{(1)} &= 1/2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \text{“Differenz von zwei 2-er Blöcken”} \\
da^{(1)} &= 1/2 \cdot \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \text{“Differenz von zwei 2-er Blöcken”} \\
dd^{(1)} &= 1/2 \cdot \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \text{“Konstruktion für Diagonalstruktur”}
\end{aligned}$$

4.4 Rekonstruktion mit Verschmierung

Sei $Y = \Gamma Z + \varepsilon$, mit einer “verschmierenden” Transformation Γ. Sehr naheliegend wäre, das Problem mit dem Ansatz

$$AY = A\Gamma Z + A\varepsilon$$

zu lösen. Im Allgemeinen ist dann aber $A\Gamma Z$ nicht mehr auf “wenige” Stellen konzentriert. Falls Γ invertierbar ist, so wäre auch

$$\Gamma^{-1}Y = Z + \Gamma^{-1}\varepsilon$$

eine Alternative, allerdings ist dann Γ^{-1} nicht mehr iid. Deswegen ist $A\Gamma^{-1}\varepsilon$ nicht mehr “schön gleichmässig” verteilt und eine Trennung zwischen Signal und Rauschen wird schwierig.

Eine Lösung dieses Problems bietet die *Wavelet-Vaguelet-Zerlegung*. Zu gegebenem Γ konstruiert man ein “fast orthogonales” B, so dass $B\Gamma Z = AZ$. Es gilt dann

$$BY = B\Gamma Z + B\varepsilon,$$

wobei der Fehlerterm $B\varepsilon$ einigermassen “gleichmässig verteilt” ist, d.h. ungefähr $\overset{iid}{\sim} \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$. Für die Schätzung gilt dann

$$\widehat{Z} = A^T(t(BY))$$

Für mehr Details, siehe Donoho, Nonlinear solution of linear inverse problems by wavelet-vaguelet decomposition, Applied and Computational Harmonic Analysis, 1995.

4.5 Edgelets, curvelets

Sowohl die Erfahrung als auch theoretische Überlegungen zeigen, dass zweidimensionale Wavelets nicht ideal sind für Strukturen in Bildern, die nicht parallel zu den Achsen verlaufen. Deshalb wurden alternative Zerlegungen in skalierte, gedrehte und verschobene kleine Kanten (ëdgeletsünd "curvelets") vorgeschlagen.

Für mehr Details, siehe Starck, Candes und Donoho, IEEE Transactions on Medical Imaging, 11 (2002), p. 670-684.

Kapitel 5

Punktmuster und zufällige Mengen

5.1 Grundlegende Definitionen für Punktmuster

Definition 5.1 *Ein Punktmuster ist eine zufällige, lokal endliche Teilmenge* $Z = \{x_1, x_2, \ldots\}$ *des* $\mathbb{R}^d$ *mit* $x_i \neq x_j$ *für alle* $i \neq j$*. "Lokal endlich" heisst, dass es in jedem beschränkten* B *nur endlich viele Punkte* x_i *gibt.*

Die Anzahl Punkte in B, $B \subset \mathbb{R}^d$, bezeichnen wir mit

$$N(B) = \sum_{i=1}^{\infty} 1_B(x_i) \quad \in \{0, 1, 2, \ldots, \infty\}.$$

Dies ist offensichtlich ein Mass auf $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B})$.

Um ein Punktmuster und dessen Verteilung exakt zu definieren, braucht man etwas Masstheorie. Hier gehen wir nicht auf diese Probleme ein. Unter der Verteilung von Z verstehen wir die endlich dimensionalen Verteilung von $(N(B_1), \ldots, N(B_k))$ für alle k und alle beschränkten $B_1, \ldots B_k$ in $\mathbb{R}^d$. Ein Modell für ein Punktmuster ist festgelegt durch die Angabe der endlich dimensionalen Verteilungen.

Definition 5.2 *Ein Punktmuster* Z *heisst* stationär*, bzw.* isotrop*, falls sich die endlichdimensionalen Verteilungen nicht ändern, wenn man die Mengen verschiebt, bzw. rotiert. Das heisst, dass für alle* k *und alle* $B_1, \ldots B_k$ *die Zufallsvariablen* $(N(B_1), \ldots, N(B_k))$ *die gleiche Verteilung haben müssen wie* $(N(B_1 + x), \ldots, N(B_k + x))$ *für alle* x*, bzw. wie* $(N(R(B_1)), \ldots, N(R(B_k)))$ *für alle Drehungen* R *um Null.*

Wie bei Gauss'schen Modellen dient die Stationarität und Isotropie als Rechtfertigung für die räumliche Mittelung zur Schätzung von Kennzahlen und Parametern.

Definition 5.3 *Die* Intensität Λ *eines Punktmusters ist die Funktion, die jeder Borel-Menge* B *in* $\mathbb{R}^d$ *den Wert*

$$\Lambda(B) = \mathbf{E}\,[N(B)] \quad \in \ [0, \infty]$$

zuordnet. Wenn $\Lambda(B) < \infty$ ist für alle beschränkten Mengen B, dann sagen wir, der Punktprozess habe endliche Intensität.

Die Intensität ist ein Mass auf der σ-Algebra der Borelmengen: Die Additivität ist klar, und die $\sigma-$-Additivität

$$\Lambda\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} B_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \Lambda(B_i) \qquad \text{für } B_i \cap B_j = \emptyset, \forall i \neq j.$$

folgt aus monotoner Konvergenz, weil

$$0 \leq N\left(\bigcup_{i=1}^{n} B_i\right) \nearrow N\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} B_i\right)$$

eine monoton wachsende Folge ist und damit die Erwartungswerte konvergieren.

Im stationären Fall gilt

$$\Lambda(B + x) = \Lambda(B).$$

Daraus folgt aus einem Satz der Masstheorie, dass Λ ein Vielfaches $\lambda(\in [0, \infty])$ des Lebesguemasses ist. Wir nennen λ ebenfalls die Intensität.

Intuitiv vermutet man, dass für $\Lambda(B) \to 0$ gilt

$$\mathrm{P}\left[N(B) = 1\right] = \Lambda(B) + o(\Lambda(B)), \quad \mathrm{P}\left[N(B) = 0\right] = 1 - \Lambda(B) + o(\Lambda(B)).$$

(Dann ist natürlich $\mathrm{P}\left[N(B) \geq 2\right] = o(\Lambda(B))$.) Die Bedingungen dafür, dass dies korrekt ist, sind relativ kompliziert. Sie sind erfüllt im stationären Fall falls $0 < \lambda < \infty$. Wir werden dies voraussetzen und die anschauliche Schreibweise $\mathrm{P}\left[N(dx) = 1\right] = \Lambda(dx)$ verwenden.

5.2 Das Poisson-Punktmuster

Das Poisson-Punktmuster ist das einfachste Modell, bei dem "alle Punkte unabhängig" sind.

Definition 5.4 Poisson Punktmuster: *Sei Λ ein beliebiges Mass auf $\mathbb{R}^d$ mit $\Lambda(\{x\}) = 0$ für alle x und $\lambda(B) < \infty$ für alle beschränkten B. Z heisst ein Poisson Punktmuster mit Intensität Λ falls*

- $N(B) \sim \mathrm{Pois}\left(\Lambda(B)\right)$ *für alle B.*
- $(N(B_1), N(B_2), \ldots, N(B_k))$ *unabhängig, falls $B_i \cap B_j = \emptyset$ für alle $i \neq j$.*

Satz 5.1 *Ein Poisson Punktmuster existiert für jedes Λ, das die obigen Voraussetzungen erfüllt.*

Beweis: Es handelt sich um einen konstruktiven Beweis, man kann so ein Poisson-Punktmuster simulieren. Wir überdecken $\mathbb{R}^d$ mit abzählbar vielen paarweise disjunkten und beschränkten Mengen A_i und konstruieren $Z \cap A_i$, unabhängig für $i = 1, 2, \ldots$, gemäss folgendem Rezept:

- $N_i := N(A_i) \sim \text{Pois}\,(\Lambda(A_i))$,
- gegeben $N_i = n$, wähle n Punkte $x_1, x_2, \ldots, x_n$ i.i.d mit

$$\text{P}\,[x_i \in B] = \frac{\Lambda(A_i \cap B)}{\Lambda(A_i)}$$

Für den Nachweis der beiden Eingenschaften in der Definition des Poisson Punktmusters betrachten wir zuerst $B \subset A_i$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\text{P}\,[N(B) = k] &= \sum_{n=k}^{\infty} \text{P}\,[N(B) = k | N(A_i) = n] \cdot \text{P}\,[N(A_i) = n] \\
&= \sum_{n=k}^{\infty} \binom{n}{k} \left(\frac{\Lambda(B)}{\Lambda(A_i)}\right)^k \left(1 - \frac{\Lambda(B)}{\Lambda(A_i)}\right)^{n-k} \cdot \exp\left(-\Lambda(A_i)\right) \frac{\Lambda(A_i)^n}{n!} \\
&= \exp\left(-\Lambda(A_i)\right) \frac{\Lambda(B)^k}{k!} \sum_{n=k}^{\infty} \frac{1}{(n-k)!} (\Lambda(A_i) - \Lambda(B))^{n-k} \\
&= \exp\left(-\Lambda(A_i)\right) \frac{\Lambda(B)^k}{k!} \exp\left(\Lambda(A_i) - \Lambda(B)\right) \\
&= \exp\left(-\Lambda(B)\right) \frac{\Lambda(B)^k}{k!}
\end{aligned}$$

Für ein allgemeines B benutzen wir

$$N(B) = \sum_i N(B \cap A_i).$$

Da $N(B \cap A_i) \sim \text{Pois}\,(\Lambda(B \cap A_i))$ ist, und die einzelnen Summanden nach Konstruktion unabhängig sind, folgt, dass die Summe $N(B)$ wieder Poisson verteilt ist.

Für die zweite Eigenschaft betrachten wir zunächst $B_1 \subset A_i$, $B_2 \subset A_i$ mit $B_1 \cap B_2 = \emptyset$. Mit $B_3 = A_i \setminus (B_1 \cup B_2)$ folgt

$$\begin{aligned}
&\text{P}\,[N(B_1) = k_1, N(B_2) = k_2] \\
= &\sum_{n=k_1+k_2}^{\infty} \text{P}\,[N(B_1) = k_1, N(B_2) = k_2 | N(A_i) = n] \cdot \text{P}\,[N(A_i) = n] \\
= &\sum_{n=k_1+k_2}^{\infty} \frac{n!}{k_1! k_2! (n-k_1-k_2)!} \left(\frac{\Lambda(B_1)}{\Lambda(A_i)}\right)^{k_1} \left(\frac{\Lambda(B_2)}{\Lambda(A_i)}\right)^{k_2} \left(\frac{\Lambda(B_3)}{\Lambda(A_i)}\right)^{n-k_1-k_2} \\
&\cdot \exp\left(-\Lambda(A_i)\right) \frac{\Lambda(A_i)^n}{n!} \\
= &\exp\left(-\Lambda(A_i)\right) \frac{\Lambda(B_1)^{k_1}}{k_1!} \frac{\Lambda(B_2)^{k_2}}{k_2!} \sum_{n=k_1+k_2}^{\infty} \frac{1}{(n-k_1-k_2)!} \Lambda(B_3)^{n-k_1-k_2} \\
= &\exp\left(-\Lambda(B_1) - \Lambda(B_2)\right) \frac{\Lambda(B_1)^{k_1}}{k_1!} \frac{\Lambda(B_2)^{k_2}}{k_2!} = \text{P}\,[N(B_1) = k_1]\,\text{P}\,[N(B_2) = k_2]\,.
\end{aligned}$$

Der Nachweis für beliebige disjunkte B_1 und B_2 geht analog wie oben. Die gleichen Argumente können auch im Fall von mehr als zwei Mengen B_i benutzt werden. □

5.3 Zweite Momente und andere Kennzahlen

5.3.1 Definitionen

Definition 5.5 *Das zweite Momentenmass* $\Lambda^{(2)}$ *ist definiert als*

$$\Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) = \mathbf{E}\left[N(B_1)N(B_2)\right].$$

$\Lambda^{(2)}$ ist ein Mass auf $\mathbb{R}^{2d}$, nämlich die Intensität des Produktmusters $\big((x_i, x_j) \in \mathbb{R}^{2d} \mid i = 1, 2, \ldots; j = 1, 2, \ldots\big)$.

Insbesondere gilt

$$\mathrm{Cov}\left(N(B_1), N(B_2)\right) = \Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) - \Lambda(B_1)\Lambda(B_2)$$

Beispiel 5.1 *Berechnung von* $\Lambda^{(2)}$ *beim Poisson Punktmuster.*

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\left(N(B_1), N(B_2)\right) &= \mathrm{Cov}\left(N(B_1 \cap B_2) + N(B_1 \cap B_2^c), N(B_1 \cap B_2) + N(B_1^c \cap B_2)\right)\\ &= \mathrm{Var}\left(N(B_1 \cap B_2)\right) + 0 + 0 + 0 = \Lambda(B_1 \cap B_2)\end{aligned}$$

(die 3 Terme sind null wegen der zweiten Eigenschaft des Poisson-Punktmusters). Es folgt:

$$\Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) = \Lambda(B_1 \cap B_2) + \Lambda(B_1)\Lambda(B_2)$$

Nicht nur im Poisson-Fall, sondern für alle Punktmuster hat $\Lambda^{(2)}$ hat stets den Anteil Λ auf der Diagonalen. Insbesondere hat $\Lambda^{(2)}$ nie eine Dichte bezüglich des Lebesguemasses auf R^{2d}. Für die meisten Modelle hat man aber ausserhalb der Diagonalen eine Dichte:

$$\Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) = \Lambda(B_1 \cap B_2) + \int_{B_1}\int_{B_2} \lambda_2(x, x')\, dxdx'.$$

Beim Poisson Punktmuster mit $\Lambda(dx) = \lambda(x)dx$ ist insbesondere

$$\lambda_2(x, x') = \lambda(x)\lambda(x').$$

Die Dichte λ_2 hat die folgende Interpretation für $x \neq x'$:

$$\lambda_2(x, x')\, dxdx' = \mathrm{P}\left[N(dx) = 1, N(dx') = 1\right].$$

Mit $\lambda(x)dx = \mathrm{P}\left[N(dx) = 1\right]$ folgt damit auch

$$\frac{\lambda_2(x, x')dx'}{\lambda(x)} = \mathrm{P}\left[N(dx') = 1 | x \in Z\right],$$

sowie

$$\int_B \frac{\lambda_2(x, x')dx'}{\lambda(x)} = \mathbf{E}\left[N(B) | x \in Z\right] - 1_B(x)$$

Wenn Z stationär ist, dann lässt sich $\Lambda^{(2)}$ wie folgt faktorisieren:

$$\Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) = \lambda|B_1 \cap B_2| + \lambda^2 \int_{B_2} K(B_1 - x)dx,$$

wobei K ein Mass auf R^d ist, das sogenannte reduzierte zweite Momentenmass. Anschaulich sieht man das leicht ein im Fall, wo λ_2 existiert. Wegen der Stationarität ist nämlich $\lambda_2(x, x') = \lambda_2(x - x')$ und damit

$$K(B) = \frac{\int_B \lambda_2(y)dy}{\lambda^2} = \frac{\mathbf{E}\left[N(B) \mid 0 \in Z\right] - 1_B(0)}{\lambda}.$$

Für das stationäre Poisson-Punktmuster ist $K(B)$ gleich dem Lebesguemass von B.

Wenn der Punktprozess zusätzlich noch isotrop ist, dann ist sowohl das reduzierte zweite Momentenmass als auch die Dichte $\lambda_2(x, x')$ isotrop. Dann genügt es, die sogenannte sogenannte K-Funktion $K(r) = K(\{x; 0 < \|x\| < r\})$ anzugeben. Ausgedrückt mit λ_2 gilt

$$K(r) = \frac{\nu_d}{\lambda^2} \int_0^r s^{d-1} \lambda_2(s)ds,$$

wobei ν_d die Oberfläche der Einheitskugel im $\mathbb{R}^d$ bezeichnet.

Die zweiten Momente und insbesondere die K-Funktion geben eine Beschreibung der Abhängigkeit in einem Punktmuster. Man muss sich jedoch bewusst sein, dass damit nur ein Teil der Abhängigkeit erfasst wird. Es gibt Fälle, wo zwei Punktmuster trotz identischen ersten und zweiten Momenten visuell unterschiedliche Realisierungen haben, vgl. Baddeley und Silverman, Biometrics 40, 1984.

Aus diesem Grund zieht man auch andere Kenngrössen in Betracht. Die beiden wichtigsten sind die "empty space function" F und die "nearest neighbor function" G. F ist die Verteilungsfunktion des Abstandes von einer festen Stelle $x \in \mathbb{R}^d$ zum nächsten Punkt des Punktmusters Z, d.h. $F(r)$ ist gleich der Wahrscheinlichkeit, dass in der Kugel mit Radius r und Zentrum x mindestens ein Punkt des Punktmusters liegt:

$$F(r) = \mathrm{P}\left[N\left(\{x' | \left\|x' - x\right\| \leq r\}\right) > 0\right].$$

Für ein stationäres Punktmuster hängt F nicht von x ab.

Die Funktion G ist die Verteilungsfunktion des Abstands von einem $x_i \in Z$ zum nächsten Punkt des Punktmusters Z, d.h. $G(r)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass in der Kugel mit Radius r und Zentrum $x_i \in Z$ noch ein weiterer Punkt liegt (im Zentrum der Kugel befindet sich ja schon ein Punkt):

$$G(r) = \mathrm{P}\left[N\left(\{x' | \left\|x' - x\right\| \leq r\}\right) > 1 \mid x \in Z\right].$$

Die Form von G und F geben zusätzliche Hinweise, wie die Punkte verteilt sind. Meist vergleicht man F und G mit dem, was bei einem homogenen Poisson-Muster auftritt. Dort sind die beiden Funktionen gleich, es gilt

$$F(r) = 1 - \exp\left(-\lambda \left|\{x | \|x\| \leq r\}\right|\right) = G(r).$$

5.3.2 Schätzung

Wir beobachten ein stationäres und isotropes Punktmuster Z auf einem beschränkten Beobachtungsfenster W: $\{x_1, x_2, \ldots, x_{N(W)}\}$. Zusätzlich gibt es Punkte ausserhalb W, die nicht beobachtet sind. Wir wollen nun untersuchen, wie man nichtparametrische Schätzungen für die Kenngrössen λ, K, λ_2, G, F findet.

Wegen der Stationarität ist

$$\widehat{\lambda} = \frac{N(W)}{|W|}$$

die naheliegende Schätzung der Intensität. Sie ist stets erwartungstreu, aber ihre Varianz hängt von zweiten Moment ab:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}\left(\widehat{\lambda}\right) &= \frac{1}{|W|^2}\,\mathrm{Var}\left(N(W)\right) = \frac{1}{|W|^2}\left(\mathbf{E}\left[N(W)^2\right] - \mathbf{E}\left[N(W)\right]^2\right) \\
&= \frac{1}{|W|^2}(\Lambda^{(2)}(W\times W) - \lambda^2\,|W|^2) \\
&= \frac{1}{|W|^2}\left(\lambda\,|W| + \int_W\int_W \lambda_2(\|x-x'\|)\;dxdx' - \lambda^2\,|W|^2\right) \\
&= \frac{\lambda}{|W|} + \frac{1}{|W|^2}\int_W\int_W (\lambda_2(\|x-x'\|) - \lambda^2)\;dxdx'.
\end{aligned}$$

Es gilt

$$\left|\int_W\int_W (\lambda_2(\|x-x'\|) - \lambda^2)\;dxdx'\right| \le |W| \int_{\mathbb{R}^d} \left|\lambda_2(\|x\|) - \lambda^2\right|\;dx.$$

Die Varianz ist also umgekehrt proportional zur Grösse des Beobachtungsfensters, wenn $\lambda_2(\|x\|) - \lambda^2$ integrierbar ist.

Die Schätzung der andern Kenngrössen ist schwieriger. Auf Grund der Definition von K, λ_2, G und F sind die folgenden Schätzer naheliegend ($B(x,r)$ bezeichnet die Kugel mit Mittelpunkt x und Radius r):

$$\begin{aligned}
\widehat{K}(r) &= \frac{1}{\widehat{\lambda}N(W)}\sum_{i=1}^{N(W)} (N(B(x_i,r)\cap W) - 1) = \frac{1}{\widehat{\lambda}N(W)}\sum_{i=1}^{N(W)}\sum_{j\neq i} 1_{[\|x_i-x_j\|\le r]} \\
\widehat{G}(r) &= \frac{1}{N(W)}\sum_{i=1}^{N(W)} 1_{[N(B(x_i,r)\cap W)>1]} \\
\widehat{F}(r) &= \frac{1}{|W|}\,|\{x\in W | N(B(x,r)\cap W) > 0\}| = \frac{|\cup_i\, B(x_i,r)\cap W|}{|W|} \\
\widehat{\lambda}_2(r) &= \frac{1}{N(W)^2}\sum_{i\neq j}\frac{1}{h^d}k\left(\frac{\|x_i-x_j\|-r}{h}\right).
\end{aligned}$$

Der Schätzer $\widehat{\lambda}_2(r)$ ist einfach ein Kernschätzer für eine rotationsinvariante Dichte auf $\mathbb{R}^d$.

Alle obigen Schätzer unterschätzen aber die wahren Grössen zum Teil massiv wegen der nicht beobachteten Punkte ausserhalb W. Eine mögliche Verbesserung ist die Reduktion des Beobachtungsfensters: Anstelle von W verwendet man das reduzierte Fenster

$$W_{\ominus r} = \{x\in W \mid B(x,r)\subset W\}.$$

Dann ist

$$\widehat{K}(r) = \frac{1}{\widehat{\lambda}N(W_{\ominus r})}\sum_{i=1}^{N(W_{\ominus r})}\sum_{j\neq i} 1_{[\|x_i-x_j\|\le r]} = \frac{1}{\widehat{\lambda}N(W_{\ominus r})}\sum_{i=1}^{N(W_{\ominus r})} (N(B(x_i,r)) - 1)$$

und analog für die anderen Grössen.

Dies bedeutet jedoch, dass man die vorliegende Information nicht voll ausnutzt. Ferner sind $\widehat{F}$ und $\widehat{G}$ nicht mehr immer monoton. Es gibt bessere Methoden.

Für K gibt es eine einfache Gewichtung zur Biaskorrektur:

$$\widehat{K}(r) = \frac{1}{\widehat{\lambda} N(W)} \sum_{i=1}^{N(W)} \sum_{j \neq i} 1_{[\|x_i - x_j\| \leq r]} w_{ij}$$

mit

$$w_{ij} = \frac{2\pi \cdot \|x_j - x_i\|}{\text{Länge von } (\{x | \, \|x - x_i\| = \|x_j - x_i\|\} \cap W)},$$

d.h. man gewichtet mit dem Inversen des Anteils des Kreisumfanges, der in W enthalten ist. Paare in der Nähe des Randes erhalten so ein grösseres Gewicht, das im Mittel die nicht-beobachteten Punkte kompensiert.

Die so erhaltene Schätzung ist bis auf den Nenner erwartungstreu:

Satz 5.2 *Es gilt:*

$$\mathbf{E}\left[\widehat{\lambda}^2 \widehat{K}(r)\right] = \lambda^2 K(r)$$

Beweis: Weggelassen □

Für die Schätzung von G benützt man eine Analogie zur Überlebenszeitanalyse. Wir definieren

$$T_i = \min_j \|x_i - x_j\| .$$

Dieser Abstand von x_i zu demjenigen Punkt des Musters, der am nächsten liegt, kann nicht immer beobachtet werden, weil der nächste Punkt des Musters auch ausserhalb des Beobachtungsfensters W liegen kann. Wenn wir noch den kleinsten Abstand vom Punkt x_i zum Rand des Beobachtungsfensters W,

$$C_i = \min_{x \notin W} (\|x - x_i\|),$$

einführen, dann beobachten wir nur $Y_i = \min(T_i, C_i)$ zusammen mit dem Indikator $\Delta_i = 1_{[T_i \leq C_i]}$, der angibt, ob T_i beobachtet wurde.

In der Überlebenszeitanalyse kommen alle obigen Grössen auch vor, haben aber eine etwas andere Bedeutung: T_i ist dort die Lebenszeit des Individuums i, C_i ist die Zeit bis zum Abbruch der Studie, bzw. bis zum vorzeitigen Ausscheiden des Patienten i. Auch hier ist $Y_i = \min(T_i, C_i)$ die beobachtete Grösse und $\Delta_i = 1_{[T_i \leq C_i]}$ die Indikatorfunktion, die die Zensierung anzeigt. In der Überlebenszeitanalyse gibt es einen Standardschätzer, um die Verteilungsfunktion $F(\cdot)$ von T auf Grund der zensierten Daten (Y_i, Δ_i) zu schätzen, den sogenannten Kaplan-Meier Schätzer. Dieser lässt sich direkt anwenden zur Schätzung von G.

Der Kaplan-Meier-Schätzer

Für eine absolut stetige Verteilung F auf $[0,\infty)$ mit Dichte f ist die Sterberate, bzw. Hazardfunktion λ definiert als

$$\lambda(t) = \lim_{h\to 0} \frac{\mathrm{P}\left[t \le T \le t+h \mid T \ge t\right]}{h} = \lim_{h\to 0} \frac{\mathrm{P}\left[t \le T \le t+h\right]}{h\,\mathrm{P}\left[T \ge t\right]} = \frac{f(t)}{1-F(t)} = -\frac{d}{dt}\log(1-F(t)).$$

Der letzte Ausdruck zeigt, wie man F aus der Sterberate berechnen kann:

$$F(t) = 1 - \exp\left(-\int_0^t \lambda(s)ds\right).$$

Falls F diskret ist und die Werte $0 \le t_1 < t_2 < \ldots$ annimmt, so ist die Hazardfunktion $\lambda(\cdot)$ ebenfalls diskret:

$$\lambda(t_i) = \frac{\mathrm{P}\left[T = t_i\right]}{\mathrm{P}\left[T \ge t_i\right]} = \frac{F(t_i) - F(t_i-)}{1-F(t_i-)},$$

und es gilt dann

$$F(t) = 1 - \prod_{t_i \le t} \left(1 - \lambda(t_i)\right).$$

Beweis: Es gilt

$$1 - F(t) = \mathrm{P}\left[T > t\right] = \mathrm{P}\left[T > t_k\right]$$

falls $t_k \le t < t_{k+1}$. Wir bilden dann das Produkt

$$1 - F(t) = \frac{\mathrm{P}\left[T > t_k\right]}{\mathrm{P}\left[T > t_{k-1}\right]} \cdot \frac{\mathrm{P}\left[T > t_{k-1}\right]}{\mathrm{P}\left[T > t_{k-2}\right]} \cdot \ldots \cdot \frac{\mathrm{P}\left[T > t_1\right]}{1}.$$

Daraus folgt die Behauptung, denn es gilt

$$\frac{\mathrm{P}\left[T > t_k\right]}{\mathrm{P}\left[T > t_{k-1}\right]} = \frac{\mathrm{P}\left[T \ge t_k\right] - \mathrm{P}\left[T = t_k\right]}{\mathrm{P}\left[T \ge t_k\right]} = 1 - \lambda(t_k).$$

□

Die Kaplan-Meier-Schätzung ergibt eine diskrete Verteilung, die auf der Menge der beobachteten, unzensierten T_i's konzentriert ist. Sie schätzt die Hazardfunktion an diesen Stellen einfach mit der naheliegenden relativen Häufigkeit

$$\widehat{\lambda}(t_i) = \frac{|\{j|Y_j = t_i, \Delta_j = 1\}|}{|\{j|Y_j \ge t_i\}|}$$

und verwendet dann obige Produktformel.

5.4 Modelle mit Abhängigkeit

5.4.1 Cox-Punktmuster

Dies ist ein zweistufiges Modell: Auf der ersten Stufe haben wir ein nichtnegatives Zufallsfeld $\xi(x), x \in \mathbb{R}^d$. Auf der zweiten Stufe haben wir – bedingt auf ξ – ein inhomogenes Poisson-Punktmuster Z mit Intensität $\Xi(B) = \int_B \xi(x)dx$. Dabei wird ξ nicht beobachtet, nur Z. So kann das Punktmuster Z zum Beispiel den Standorten von Pflanzen entsprechen, und ξ ist dann eine zufällig variierende Umweltbedingung, die den Pflanzenwuchs fördert bzw. hemmt.

Für konkrete Konstruktionen kann man z.B. $\log \xi$ als ein Gauss'sches Zufallsfeld wählen mit Erwartungswert $m(x)$ und Kovarianzfunktion $C(x, x')$, oder man setzt

$$\xi(x) = \sum_i k(x, s_i),$$

wobei $\{s_1, s_2, \ldots\}$ ein stationäres Poisson-Punktmuster auf $\mathbb{R}^{d'}$ ist und k eine Funktion $\mathbb{R}^d \times R^{d'} \longrightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\int k(x, y)dy < \infty$ für alle x.

Eigenschaften des Cox-Musters:

1) Z ist stationär, falls ξ stationär ist.

2) Die Intensität ist $\lambda(x) = \mathbf{E}[\xi(x)]$, denn mit Fubini gilt

$$\Lambda(B) = \mathbf{E}[N(B)] = \mathbf{E}[\mathbf{E}[N(B) \mid \xi]] = \mathbf{E}\left[\int_B \xi(x)dx\right] = \int_B \mathbf{E}[\xi(x)]\, dx$$

3) Das gleiche Argument liefert auch das zweite Moment

$$\begin{aligned}
\Lambda^{(2)}(B_1 \times B_2) &= \mathbf{E}[\mathbf{E}[N(B_1)N(B_2) \mid \xi]] \\
&= \mathbf{E}\left[\int_{B_1 \cap B_2} \xi(x)dx + \int_{B_1}\int_{B_2} \xi(x)\xi(x')dxdx'\right] \\
&= \int_{B_1 \cap B_2} \lambda(x)dx + \int_{B_1}\int_{B_2} \mathbf{E}\left[\xi(x)\xi(x')\right] dxdx'.
\end{aligned}$$

Es gilt also

$$\lambda_2(x, x') = \mathbf{E}\left[\xi(x)\xi(x')\right] = \mathrm{Cov}\left(\xi(x), \xi(x')\right) + \lambda(x)\lambda(x').$$

Wenn man nur eine Realisierung eines Cox-Musters beobachtet hat, dann ist das nicht unterscheidbar von einem inhomogenen Poisson-Muster. Bei einem inhomogenen Poisson-Muster kann man die unbekannte Intensität auch nichtparametrisch mit einem Kern-Schätzer schätzen:

$$\widehat{\xi}(x) = \sum_{x_i \in Z} h^{-d} k\left(\frac{x - x_i}{h}\right).$$

Mit der Annahme, dass ξ zufällig ist und einem einfachen parametrischen Modell genügt, kann man unter Umständen die Intensität besser schätzen (vor allem an den Rändern).

5.4.2 Cluster-Punktmuster

Diese Modelle, die auch Neyman-Scott Punktmuster heissen, sind wie folgt definiert. Die Zentren $\{x'_1, x'_2, x'_3, \ldots\}$ der Cluster bilden ein stationäres Poisson-Punktmuster mit $\Lambda(dx) = \lambda_0 \cdot dx$. Weiter seien die Cluster-Grössen $M_1, M_2, M_3, \ldots$ (mit Werten in $\mathbb{N}_0$) iid, unabhängig von den Cluster-Zentren. Schliesslich sind die relativen Positionen D_i der Punkte eines Clusters relativ zu ihrem Zentrum iid mit der Dichte f auf $\mathbb{R}^d$ sein. Das heisst, das Punktmuster besteht aus den Punkten

$$x'_1 + D_1, x'_1 + D_2, \ldots, x'_1 + D_{M_1}, x'_2 + D_{M_1+1}, \ldots x'_2 + D_{M_1+M_2}, x'_3 + D_{M_1+M_2+1}, \ldots.$$

Im Beispiel der Standorte von Pflanzen fasst man die Cluster-Zentren als die Positionen der Eltern auf, die M_i's als die Anzahl Nachkommen und die D_i's als die Distanzen zwischen Nachkommen und Eltern.

Obwohl die Cluster-Modelle auf einer ganz anderen heuristischen Vorstellung beruhen als die Cox-Modelle, sind die beiden Klassen nicht disjunkt: Wenn die M_i's nämlich Poisson-verteilt sind (mit Parameter λ), dann hat das zugehörige Cluster-Punktmuster die gleiche Verteilung wie ein Cox-Punktmuster mit der zufälligen Intensität

$$\xi(x) = \lambda \sum_i f(x - x'_i)$$

wobei f die Dichte der D_i bezeichnet. Das sieht man wie folgt ein: Gegeben x'_i bilden die Punkte des i-ten Clusters ein inhomogenes Poisson-Punktmuster mit Intensität $f(x - x'_i)$ (vgl. den Beweis von Satz 5.1), und die Summe von unabhängigen Poisson-Punktmustern ist wieder ein Poisson-Punktmuster (weil die Summe von unabhängigen Poisson-verteilten Zufallsvariablen wieder Poisson-verteilt ist).

Eigenschaften eines Cluster-Punktmusters Z:

1) Z ist stationär.

2) Die Intensität ist $\lambda = \lambda_0 \, \mathbf{E}\,[M_i]$. Begründung:

$$\begin{aligned} \lambda(x)dx &= \mathrm{P}\,[N(dx) = 1] = \mathbf{E}\left[\mathrm{P}\left[N(dx) = 1 \mid x'_1, M_1, x'_2, M_2, \ldots\right]\right] \\ &= \mathbf{E}\left[\sum_i M_i f(x - x'_i)\right] dx. \end{aligned}$$

   Die Behauptung folgt jetzt, weil die M_i's und die x'_i's unabhängig sind und weil für eine beliebige messbare positive Funktion h auf $\mathbb{R}^d$ und für ein Punktmuster Z mit Intensität Λ gilt

$$\mathbf{E}\left[\sum_{x_i \in Z} h(x_i)\right] = \int h(x)\Lambda(dx).$$

   Dies ist per Definition richtig für Indikatorfunktionen h, und wegen der Linearität auch für einfache Funktionen. Durch Betrachtung monotoner Limiten kann man es schliesslich auf alle nichtnegativen Funktionen ausdehnen.

3) $\lambda_2(x,y) = \lambda^2 + \lambda_0 \, \mathbf{E}\left[M_i(M_i-1)\right] \cdot \int f(x-u)f(y-u)du$. Die Begründung geht analog:

$$\begin{aligned} & \mathrm{P}\left[N(dx)=1, N(dy)=1 \mid x_1', M_1, x_2', M_2, \ldots\right] \\ = \; & \mathbf{E}\left[\sum_i M_i(M_i-1) f(x-x_i')f(y-x_i')dxdy\right] \\ + \; & \mathbf{E}\left[\sum_{i\neq j} M_i M_j f(x-x_i')f(y-x_j')dxdy\right]. \end{aligned}$$

(die erste Summe enthält die Fälle, wo die beiden Punkte an den Stellen x, bzw. y aus dem gleichen Cluster kommen, die zweite Summe die Fälle, wo sie aus verschiedenen Clustern kommen).

5.4.3 Inhibitionsmodelle

Das Ziel bei den Inhibitionsmodellen ist es, eine "hard-core-Distanz" r_0 einzuhalten: Zwei Punkte des Musters sollen mindestens den Abstand r_0 haben. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, dies zu erreichen.

Eine Möglichkeit ist, die Punkte sequentiell zu platzieren unter Beachtung des Minimalabstands r_0. Wir wählen also x_1 mit Verteilung $f(x)dx$, dann $x_2 \mid x_1$ mit Verteilung $c_1 \cdot f(x) \cdot 1_{[\|x-x_1\|>r_0]}dx$, dann $x_3 \mid x_2, x_1$ mit Verteilung $c_2 \cdot f(x) \cdot 1_{[\|x-x_1\|>r_0, \|x-x_2\|>r_0]}dx$, usw.. Das entstehende Punktmuster ist natürlich nicht stationär.

Eine andere Möglichkeit benutzt Elimination. Man geht aus von einem Poisson-Punktmuster $\{x_1', x_2', x_3', \ldots\}$ mit Parameter λ_0. Dann wird von zwei Punkten, deren Abstand kleiner als r_0 ist, einer eliminiert. Damit dieses Vorgehen eindeutige Resultate produziert, braucht es genaue Vorschriften, in welcher Reihenfolge die Punkte eliminiert werden. Wir können zum Beispiel alle Punkte x_i' mit iid uniformen Zufallszahlen U_i versehen und dann bei jedem Konflikt den Punkt mit kleinerem U_i markieren. Am Schluss werden dann alle markierten x_i' eliminiert.

Unter Umständen werden dabei mehr Punkte eliminiert, als unbedingt nötig wäre, wie man im folgenden Beispiel sieht: Es seien $\|x_1' - x_2'\| < r_0$ und $\|x_2' - x_3'\| < r_0$, während alle andern Abstände, an denen x_1', x_2' oder x_3' beteiligt ist, grösser als r_0 sein sollen. Dann muss man entweder nur x_2 oder die beiden Punkte x_1 und x_3 eliminieren. Wenn $U_1 < U_2 < U_3$, dann werden aber mit obigem Verfahren sowohl x_1 als auch x_2 eliminert.

Die ersten und zweiten Momente bei diesem Eliminationsmodell lassen sich berechnen. Die Intensität λ ist

$$\lambda = \frac{1 - \exp\left(-\lambda_0 V_0\right)}{V_0}$$

mit

$$V_0 = |\{\|x\| \leq r_0\}| = \omega_d r_0^d$$

(ω_d ist das Volumen der Einheitskugel im $\mathbb{R}^d$). Begründung:

$$\lambda \, dx = \mathrm{P}\left[\text{Punkt in } dx\right] = \lambda_0 \, dx \, \mathrm{P}\left[\text{Punkt überlebt}\right].$$

Weil die Punkte x_i' mit $U_i > u$ ein Poissonmuster mit Intensität $(1-u)\lambda_0$ bilden, folgt

$$\begin{aligned} \mathrm{P}\left[\text{Punkt } x_i' \text{ überlebt}\right] &= \mathrm{P}\left[\text{Kein anderer Punkt } x_j' \text{ mit grösserem U in } \left\{x \mid \left\|x - x_i'\right\| \leq r_0\right\}\right] \\ &= \int_0^1 \exp(-(1-u)\lambda_0 V_0)du = \frac{1-\exp(-\lambda_0 V_0)}{\lambda_0 V_0}. \end{aligned}$$

Im Grenzfall $\lambda_0 \longrightarrow \infty$ konvergiert λ gegen $\frac{1}{V_0}$. Mit dem entstehenden Muster erhält man eine nicht-überlappende Packung von Kugeln mit dem Radius $r_0/2$ im $\mathbb{R}^d$. Diese Packung ist aber nicht sehr dicht, der überdeckte Anteil ist nämlich

$$\frac{N(B)\omega_d(r_0/2)^d}{|B|} \sim \frac{\omega_d(r_0/2)^d}{\omega_d r_0^d} = 2^{-d}.$$

Zum Vergleich: beim kubischen Gitter ist der überdeckte Anteil $\omega_d 2^{-d}$, für $d = 2$ ergibt das hexagonale Gitter die dichteste Kugelpackung mit einem Überdeckungsanteil von $\omega_2/(2\sqrt{3}) = 0.2887\ \omega_2$, und für $d = 3$ hat das flächenzentrierte kubische Gitter den maximalen Überdeckungsanteil von $\omega_3/(4\sqrt{2}) = 0.1768\ \omega_3$.

Analog erhält man das zweite Moment (siehe z.B. Stoyan et al., p. 164): Für $\|x - x'\| \leq r_0$ ist $\lambda_2(x, x') = 0$, und für $\|x - x'\| \geq r_0$ gilt

$$\lambda_2(x, x') = \frac{2(2V_0 - \gamma_0)(1 - \exp(-\lambda_0 V_0)) - 2V_0(1 - \exp(-\lambda_0(2V_0 - \gamma_0)))}{V_0(V_0 - \gamma_0)(2V_0 - \gamma_0)}.$$

Dabei ist γ_0 das Volumen des Durchschnitts zweier Kugeln mit Radien r_0 und Zentren x, bzw. x':

$$\gamma_0 = \gamma_0(x, x') = \left|\left\{x'' \mid \left\|x'' - x\right\| \leq r_0\right\} \cap \left\{x'' \mid \left\|x'' - x'\right\| \leq r_0\right\}\right|$$

(γ_0 ist gleich 0 falls $\|x - x'\| \geq 2r_0$ ist).

5.4.4 Gibbs-Modelle

Gibbs-Modelle sind gegeben durch die Wahrscheinlichkeiten, dass an der Stelle x ein Punkt ist, gegeben das Muster auf $\mathbb{R}^d \setminus \{x\}$:

$$\lambda(x \mid z) = \frac{\mathrm{P}\left[N(dx) = 1 \mid Z \cap (\mathbb{R}^d \setminus \{x\}) = z\right]}{dx}.$$

Wie im Fall von Gibbs-Modellen auf einem Gitter kann man sich fragen, was für eine Form die bedingten Intensitäten $\lambda(x \mid z)$ haben müssen, damit ein zugehöriges Punktmuster existiert, und wie dieses Punktmuster dann aussieht.

Wir betrachten Gibbs-Modelle nur auf einer beschränkten Menge $B \subset \mathbb{R}^d$. Dann besteht Z nur aus endlich vielen Punkten. Ferner kann man die Verteilung von Z angeben durch die Wahrscheinlichkeiten $\beta_n = \mathrm{P}[N(B) = n]$ sowie die bedingten Dichten f_n auf B^n von $(x_1, \ldots, x_n)$ gegeben $N(B) = n$, vergleiche die Konstruktion des Poisson-Punktmusters. Dabei muss f_n natürlich symmetrisch sein bezüglich einer Permutation der Argumente. Mit diesen Grössen berechnet sich die bedingte Intensität wie folgt

$$\lambda(x \mid Z = \{x_1, \ldots, x_n\}) = \frac{\beta_{n+1}(n+1)! f_{n+1}(x, x_1, \ldots, x_n)}{\beta_n n! f_n(x_1, \ldots, x_n)}.$$

Umgekehrt kann man aus den bedingten Intensitäten alle β_n und alle f_n berechnen. Für $n = 0$ hat man

$$\lambda(x \mid Z = \emptyset) = \frac{\beta_1}{\beta_0} f_1(x).$$

Daraus folgt durch Integration über x der Quotient β_1/β_0 und damit auch f_1. Jetzt geht man rekursiv weiter und berechnet so alle Dichten f_n und alle Quotienten β_{n+1}/β_n. Wenn

$\sum_n \beta_n/\beta_0 < \infty$ gilt, dann kann man schliesslich auch die β_n selber erhalten. Ist dies nicht erfüllt, dann definieren die bedingten Intensitäten kein gültiges Modell.

Analog zum Satz von Hammersley-Clifford kann man bedingte Intensitäten mit Hilfe von Potentialen darstellen:

$$\lambda(x \mid x_1, \dots x_n) = \exp\left(-\phi_1(x) - \sum_{k=1}^{n} \sum_{i_1 < \dots i_k \le n} \phi_{k+1}(x, x_{i_1}, \dots x_{i_k})\right).$$

Die Potentiale ϕ_k sind dabei symmetrische Funktionen der k Argumente.

Das einfachste Beispiel ist $\phi_k(x) \equiv 0$ für alle $k > 1$. Dann ist das zugehörige Gibbs-Punktmuster einfach ein Poisson-Punktmuster mit Intensität $\exp(-\phi_1(x))$. Das einfachste nichttriviale Beispiel ist das sogenannte Strauss-Punktmuster. Dort ist $\phi_1(x) \equiv a$, $\phi_2(x, y) = b1_{\{\|x-y\| \le r\}}$ und $\phi_k(x) \equiv 0$ für $k > 2$. Für $b > 0$ hat man Abstossung: Je mehr Punkte im Abstand $\le r$ von x schon vorhanden sind, desto kleiner ist die Wahrscheinlichkeit für einen weiteren Punkt an der Stelle x. Für $b = +\infty$ erhält man ein Inhibitionsmodell. Für $b < 0$ hat man umgekehrt Anziehung. Allerdings gibt es im Fall $b < 0$ gar kein zugehöriges Gibbs-Modell, weil die Normierung unendlich ist. Man behilft sich dann damit, dass man das Modell bedingt auf $N(B) = n$ betrachtet: Dann muss man nur die gemeinsame Dichte f_n der n Punkte angeben, welche für das Strauss-Modell proportional ist zu

$$\exp\left(-b \sum_{i<j} 1_{\{\|x_i - x_j\| \le r\}}\right).$$

Eine andere Lösung ist, dass man

$$\phi_2(x, y) = \begin{cases} b_1 > 0 & \|x - y\| < r_0 \\ b_2 < 0 & r_0 \le \|x - y\| < r \\ 0 & \|x - y\| \ge r \end{cases}$$

setzt, d.h. in einer kleinen Distanz eine Abstossung einführt.

5.4.5 Schätzung in parametrischen Modellen

Die Maximum-Likelihood-Schätzung ist im Allgemeinen schwierig zu berechnen, da sie für die hier besprochenen Modelle typischerweise ein sehr kompliziertes Integral enthält(im stetigen Fall), bzw. eine komplizierte Summe (im diskreten Fall). Einfacher ist die Momentenschätzung:

$$\widehat{\theta} = \arg\min_{\theta} \int_{r_1}^{r_2} \left| \widehat{K}(r)^{\alpha} - K_{\theta}(r)^{\alpha} \right| w(r) dr,$$

wobei man den Bereich $[r_1, r_2]$ und den Exponenten α im Prinzip frei wählen kann. Oft verwendet man $\alpha = 1/2$, weil dann die Varianz von $\widehat{K}(r)$ für alle r etwa gleich ist. Diese Methode bedeutet einfach, dass die nichtparametrische Schätzung $\widehat{K}$ möglichst gut mit der Funktion K im angepassten Modell übereinstimmen soll. Oft führt man die Minimierung noch unter der Nebenbedingung durch, dass die Intensitäten $\widehat{\lambda}$ und $\lambda_{\widehat{\theta}}$ gleich sein sollen.

5.5 Zufällige Mengen

Sei Z eine zufällige, abgeschlossene Teilmenge des $\mathbb{R}^d$. Deren Konstruktion ist masstheoretisch anspruchsvoll, wir gehen jedoch nicht darauf ein. Stationarität einer zufälligen Menge bedeutet, dass Z und $Z + x$ die gleichen Verteilungen haben sollen. Wie bei den Punktmustern kann man zufällige Mengen charakterisieren durch Kennzahlen. Die folgenden Definitionen und Formeln gelten für den stationären Fall.

- Der Volumenanteil p beschreibt, wie gross der Anteil "weiss/schwarz" im Bild ist:

$$p = \mathrm{P}\left[x \in Z\right] = \frac{\mathbf{E}\left[|Z \cap B|\right]}{|B|}.$$

- Die Kovarianzfunktion ist

$$C(h) = \mathrm{P}\left[\{x \in Z\} \cap \{x + h \in Z\}\right].$$

- Kontakt-Verteilungen $H_B(\cdot)$ messen, wie stark die beiden Phasen "ineinander verzahnt" sind,

$$H_B(r) = 1 - \frac{\mathrm{P}\left[Z \cap rB = \emptyset\right]}{1 - p},$$

  wo B eine Testmenge, wie z.B. ein Kreis, Kreissegment, Polygon, etc. ist. Diese Definition wird klarer, wenn wir die Zufallsvariable

$$R = \inf\{s \mid Z \cap sB \neq \emptyset\},$$

  betrachten. Da $R = 0$ bedeutet "$0 \in Z$", hat R im Allgemeinen eine Punktmasse bei 0. Wegen

$$\mathrm{P}\left[R > r \mid R > 0\right] = \frac{\mathrm{P}\left[Z \cap rB = \emptyset\right]}{1 - p} = 1 - H_B(r)$$

  ist H_B also die bedingte Verteilungsfunktion von R, gegeben dass $R > 0$.

5.5.1 Modelle für zufällige Mengen

Am einfachsten zu behandeln sind Boole'sche Modelle

$$Z = \bigcup_{i=1}^{\infty} \{Z_i + x_i\},$$

wo $\{x_1, x_2, x_3, \ldots\}$ ein homogenes Poisson-Punktmuster mit Parameter λ ist und $Z_1, Z_2, \ldots$ eine iid Folge von zufälligen, kompakten Mengen, unabhängig vom Punktmuster. Man kann z.B. Kugeln mit zufälligem Radius nehmen: $Z_i = B(0, R_i)$ mit R_i iid, oder Segmente von zufälliger Länge und Richtung. Für beliebiges, kompaktes K gilt (ohne Beweis)

$$\mathrm{P}\left[Z \cap K = \emptyset\right] = \exp\left(-\lambda \cdot \mathbf{E}\left[\left|Z_i \oplus \check{K}\right|\right]\right),$$

wo $\check{K} = \{x| - x \in K\}$ der Spiegelung von K in 0 entspricht, und $A \oplus B = \{x + x' | x \in A, x' \in B\}$. Wählt man $K = \{0\}$, so folgt daraus, dass der Volumenanteil gleich

$$1 - \exp\left(-\lambda \cdot \mathbf{E}\left[|Z_i|\right]\right)$$

ist. Analog kann man auch die Kovarianzfunktion berechnen.

Leider sind die Boole'schen Modelle häufig nicht realistisch, denn die wahren zufälligen Mengen sind keine Vereinigungen von Kreisen oder sonstigen "einfachen" Körpern. Eine Möglichkeit, realistischere Modelle zu erhalten, ist darum ein "Verschmieren" von Boole'schen Modellen mit den Öffnungs- bzw. Abschluss-Operationen der mathematischen Morphologie.

Kapitel 6

Hinweise zur Literatur

Das Buch Cressie (1993) versucht, die ganze räumliche Statistik abzudecken. Entsprechend ist es 900 Seiten dick, und trotzdem hilft es oft nicht weiter, wenn man etwas genau wissen will. Die 70 Seiten Literatur sind aber auf jeden Fall nützlich. Das Buch Ripley (1981) ist relativ leicht zu lesen, aber das Gebiet hat sich in den vergangenen Jahren natürlich sehr stark weiterentwickelt. Das Buch Ripley (1988) behandelt 5 weit auseinander liegende Themen auf unterschiedlichem Niveau. Zwei der Themen betreffen Bildanalyse.

Für die Geostatistik ist Chilès and Delfiner (1999) das Standardwerk. Es ist sehr ausführlich, aber angenehm zu lesen. Daneben möchte ich noch das Buch von Stein (1999) erwähnen, das mehr theoretische Aspekte behandelt.

Über Markovfelder und Anwendungen in der Bildanalyse gibt es inzwischen auch sehr viel Literatur. Guyon (1995) behandelt Gauss- und Markovfelder nebeneinander, auf einem etwas technischen und trockenen Niveau. Winkler (2003) ist eine gut lesbare Einführung vom Standpunkt eines Mathematikers/Statistikers. Li (1995) zeigt den Standpunkt eines Ingenieurs.

Für Punktmuster und zufällige Mengen ist Stoyan, Kendall and Mecke (1995) das Standardwerk. Ohser and Mücklich (2000) befasst sich spezieller mit zufälligen Mengen und enthält ebenfalls viel nützliche Information. Eine Einführung in Punktmuster ist Diggle (2003), welches ursprünglich 1983 erschienen ist und dann nach 20 Jahren überarbeitet und neu aufgelegt wurde. Das Buch Møller and Waagepetersen (2004) setzt den Schwerpunkt auf die statistische Analyse von Punktmustern mit Hilfe von Simulationen und geht daher in vielen Punkten weiter als die Vorlesung.

Literaturverzeichnis

Chilès, J.-P. and Delfiner, P. (1999). *Geostatistics. Modeling Spatial Uncertainty*, Wiley Series in Probability and Statistics, Wiley, N.Y.

Cressie, N. A. C. (1993). *Statistics for Spatial Data*, Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics, 2nd edn, Wiley, N. Y.

Diggle, P. J. (2003). *Statistical Analysis of Spatial Point Patterns*, 2nd edn, Arnold, London.

Guyon, X. (1995). *Random Fields on a Network. Modeling, Statistics, and Applications*, Springer, New York.

Li, S. Z. (1995). *Markov Random Field Modeling in Computer Vision*, Springer, Tokyo.

Møller, J. and Waagepetersen, R. P. (2004). *Statistical Inference and Simulation for Spatial Point Processes*, Monographs on Statistics and Applied Probability 100, Chapman & Hall.

Ohser, J. and Mücklich, F. (2000). *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*, Statistics in Practice, Wiley.

Ripley, B. D. (1981). *Spatial Statistics*, Wiley, N. Y.

Ripley, B. D. (1988). *Statistical Inference for Spatial Processes*, Cambridge University Press, Cambridge.

Stein, M. L. (1999). *Interpolation of Spatial Data: Some Theory for Kriging*, Springer, New York.

Stoyan, D., Kendall, W. S. and Mecke, J. (1995). *Stochastic Geometry and its Applications*, Wiley Series in Probability and Statistics, 2nd edn, Wiley.

Winkler, G. (2003). *Image Analysis, Random Fields and Markov Chain Monte Carlo Methods : A Mathematical Introduction*, Applications of Mathematics, 2nd edn, Springer, New York.