OPTIMIERUNG VON ALGORITHMEN ZUR SCHÄTZUNG VON ROBUSTEN SPATIAL SMALL AREA MODELLEN

Philip Rosenthal

Schlüsselwörter: Small-Area-Statistik – robuste Methode – räumliche Korrelation – Newton-GMRES – Hybridalgorithmus

ZUSAMMENFASSUNG

Der Bedarf an regional differenzierten Daten steigt stetig an. Aus Kostengründen werden Stichproben oft nur auf aggregierter Ebene gezogen. Dadurch ist eine angemessene Präzision direkter Schätzer auf disaggregierter Ebene nicht gewährleistet. Als Lösung dieses Problems kann das robuste räumliche Small-Area-Modell verwendet werden. Aufgrund der hohen Komplexität des Modells ist eine geschlossene Lösung der auftretenden Gleichungen nicht mehr möglich. Für eine Anwendung in der Praxis ist es daher wichtig, einen Algorithmus zu finden, der in vielen Fällen brauchbare Ergebnisse liefert. Neben der Anwendung des Newton-GMRES-Algorithmus wird ein neues Hybridverfahren zur Berechnung des Modells vorgestellt. Anschließend werden die Verfahren anhand einer modellbasierten Simulation getestet.

Keywords: small area statistics – robust method – spatial correlation – Newton GMRES – hybrid algorithm

ABSTRACT

The demand for regional data is continuously increasing. For cost reasons, samples are often drawn on aggregated levels. Consequently, direct estimators may suffer from low precision on disaggregated levels. To solve this issue, the robust spatial small area model is a suitable approach. A closed form solution of the occurring equations is not possible due to the high complexity of the model. For use in practice it is therefore important to find an algorithm that provides useful results in many cases. The paper presents the Newton GMRES algorithm and a new hybrid algorithm for calculating the model. Then a model based simulation is conducted to test their performance.



Philip Rosenthal, M. Sc.

hat Wirtschaftsmathematik und Survey Statistics studiert und ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Wirtschafts- und Sozialstatistik an der Universität Trier. Für seine Masterarbeit zum Thema "Optimierung von Algorithmen zur Schätzung von robusten Spatial Small Area Modellen" wurde er mit dem Gerhard-Fürst-Preis 2015 in der Kategorie "Master-/Bachelorarbeiten" ausgezeichnet.

1

Einleitung

Angenommen, es soll der durchschnittliche Mietpreis in der Bundesrepublik Deutschland bestimmt werden. Aus praktischen und Kostengründen bietet sich hierzu eine Stichprobenziehung an. Der deutsche Mikrozensus, eine amtliche Erhebung, die jährlich durchgeführt wird und bei der ungefähr 1% der Bevölkerung befragt wird, könnte als Datengrundlage dienen. Nun ist aber nicht nur die durchschnittliche Miete in der gesamten Bundesrepublik Deutschland von Interesse, sondern es sollen auch verlässliche Schätzungen auf Kreisebene möglich sein. Wird nun die kleine Stichprobengröße von 1% auf die 295 Landkreise in Deutschland verteilt, kann es dazu kommen, dass der Teilstichprobenumfang in einzelnen Kreisen nicht mehr ausreicht, um eine verlässliche direkte Schätzung des Mietpreises durchzuführen. In der Statistik nennt man solche geografisch geordneten Gebiete mit unzureichendem Stichprobenumfang Small Areas. Die Small-Area-Statistik befasst sich mit Methoden und Modellen, die verwendet werden können, um die Präzision von Schätzungen in Small Areas zu verbessern. Eine Übersicht der Methoden ist in Münnich und andere (2013) zu finden. Welchen Einfluss das Stichprobendesign dabei hat, kann bei Münnich und Burgard (2012) nachgelesen werden.

Ein berühmtes Small-Area-Modell, das Hilfsinformationen auf aggregierter Area-Ebene verwendet, ist das sogenannte Fay-Herriot-Modell (Fay/Herriot, 1979). Articus (2013) wendete dieses Modell zur Lösung des eben beschriebenen Problems auf die Schätzung von Mietpreisen auf Kreisebene an. → Grafik 1 zeigt das Ergebnis dieser Small-Area-Schätzung. Je dunkler die Kreise eingefärbt sind, desto höher der dortige durchschnittliche Mietpreis. Es ist deutlich zu erkennen, dass ein räumlicher Zusammenhang der Mietpreise besteht. So ist zum Beispiel der Mietspiegel der direkten Nachbarkreise von Hamburg höher als von Kreisen, die weiter von dieser Großstadt entfernt sind.

Leider kann das Fay-Herriot-Modell keine räumlichen Zusammenhänge berichtigen. Jedoch lässt sich das Lineare Gemischte Modell um eine räumliche Modellierung erweitern (Molina und andere, 2009, Seite 4). Nun kann es sein, dass bestimmte Individuen in der Stich-

Grafik 1

Mit dem Fay-Herriot-Modell geschätzte durchschnittliche regionale Mietpreise 2010 EUR je m²



Datengrundlage: Mikrozensus-Zusatzerhebung zur Wohnsituation. Ohne Hessen, Baden-Württemberg und Bayern. Ouelle: Articus. 2014 2016-01-0465

probe gezogen wurden, deren Mietpreis deutlich vom durchschnittlichen Mietspiegel abweicht. So ist zum Beispiel die Miethöhe eines wohlhabenden Sängers, der seit Jahren in einem Fünf-Sterne-Luxushotel wohnt, nicht repräsentativ für den gesamten Kreis. Um bessere Schätzer zu erhalten, können solche extremen Abweichungen als Ausreißer interpretiert werden.

Auch bei Unternehmensdaten kann diese Problematik auftreten, wenn ein großes und viele kleine Unternehmen in einer Area gezogen wurden (Burgard und andere, 2014).

Schmid und Münnich (2014) haben das robuste Spatial-Small-Area-Modell entwickelt, welches unempfindlich gegenüber Ausreißern ist und zusätzlich räumliche Korrelationen berücksichtigen kann. Um die Parameter dieses Modells schätzen zu können, müssen einige komplizierte Gleichungen gelöst werden. Der bisher verwendete gewöhnliche Newton-Algorithmus liefert allerdings nicht in allen Fällen brauchbare Ergebnisse.

Das Hauptziel der hier vorgestellten Masterarbeit ist es deshalb, das robuste Spatial-Small-Area-Modell darzustellen und einen Algorithmus zu finden, der in möglichst vielen praktisch relevanten Fällen anwendbar ist. Deshalb wird das Modell in Kapitel 2 vorgestellt und dessen Herleitung skizziert. Kapitel 3 beschäftigt sich mit den mathematischen Hintergründen der verwendeten Algorithmen. Diese werden in Kapitel 4 in einer modellbasierten Simulation auf ihre Praxistauglichkeit getestet. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse erfolgt in einem abschließenden Fazit.

2

Das robuste Spatial-Small-Area-Modell

2.1 Das Generelle Lineare Gemischte Modell

Nach Jiang und Lahiri (2006, Seite 4) sind gemischte Modelle besonders gut für Small-Area-Schätzungen geeignet, da sie flexibel und effizient verschiedene Informationen und Fehlerquellen berichtigen können. Erweitert man das lineare Modell $y = X\beta + e$ um einen gebietsspezifischen Zufallseffekt (Area-Effekt), kann zusätzliche Variation zwischen den Gebieten (Areas), die nicht vom fixen Teil des linearen Modells erfasst wird, erklärt werden. Man erhält

Definition 2.1 (Generelles Lineares Gemischtes Modell): Das generelle lineare gemischte Modell ist definiert durch

(2.1)
$$y = X\beta + Z\upsilon + e,$$

 $\upsilon \sim N(0,G),$
 $e \sim N(0,R).$

Hier wird die abhängige Variable $y \in \mathbb{R}^n$ durch zwei Komponenten erklärt. Zunächst durch eine bekannte Matrix $X \in \mathbb{R}^{nxp}$ von Hilfsvariablen. Die unbekannten Regressionskoeffizienten werden in dem Vektor $\beta \in \mathbb{R}^p$ zusammengefasst. Die zweite Komponente ist die Matrix $Z \in \mathbb{R}^{n \times q}$. *Z* ist eine bekannte Modellmatrix, v der dazugehörende Vektor der Area-Effekte. $e \in \mathbb{R}^n$ hingegen ist ein Vektor von unbeobachtbaren Zufallsfehlern. Es wird angenommen, dass die Kovarianzmatrizen $G := G(\theta)$ und $R := R(\theta)$ von einem Varianzparametervektor $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_h)^T \in \mathbb{R}^h$ abhängen. Zusätzlich gelte, dass v und e multivariat normalverteilt sind. Somit ist auch y als die Summe normalverteilter Zufallsvariablen selbst wieder normalverteilt mit Erwartungswert $X \beta$ und Kovarianzmatrix $V := V(\theta) = R + ZGZ^T$. Es gilt also $y \sim N (X \beta, V)$.

2.2 Spatial-Small-Area-Schätzung

Das generelle lineare gemischte Modell mit bisher blockdiagonaler Kovarianzstruktur kann nun um eine räumliche Modellierung erweitert werden (Molina und andere, 2009, Seite 4). Dazu wird eine Nachbarschaftsmatrix *W* in der Korrelationsstruktur verwendet, die angibt, welche Regionen miteinander benachbart sind. Nach Pratesi und Salvati (2008, Seite 115) erhält man $G := \sigma_u^2 ((I - pW) (I - pW^T))^{-1}$ und $R := \sigma_e^2 I$. Da *W* nach Konstruktion zeilenstochastisch ist, geht die bisherige Blockdiagonalgestalt von *G* verloren. Da $(I_{DxD} - \rho\tilde{W})$ invertierbar ist, wenn $\rho \in (-1, 1)$ gilt, liegt eine Interpretation von ρ als räumlichen Korrelationskoeffizienten nahe (Pratesi/Salvati, 2008, Seite 116).

2.3 Robuste Small-Area-Schätzung

Die bisherigen Modelle basieren auf der Annahme, dass die Varianzkomponenten und somit auch *y* einer Normalverteilung folgen. Wie Schmid (2011, Seite 46) beschreibt, ist diese Normalverteilungsannahme in der Praxis oft nicht erfüllt. Diese Abweichungen vom zugrunde gelegten Modell können als Ausreißer in den Daten interpretiert werden, die schließlich ineffiziente Schätzer zur Folge haben.

Richardson und Welsh (1995, Seite 1431) schreiben, dass es besser ist, robuste Methoden zu verwenden, welche eine mögliche Verzerrung immer beschränken. Das heißt, dass diese Methoden zum einen angemessen effizient sein sollen, wenn die Normalverteilungsannahme hält. Zum anderen sollen sie effizienter sein als Methoden, die sich auf die Normalverteilungsannahme stützen, wenn diese nicht erfüllt ist.

Grafik 2

Huber-Funktion



Eine Möglichkeit der Robustifizierung wurde von Fellner (1986) vorgeschlagen, bei der die beobachteten Werte an die geschätzten Werte angenähert werden. Nach seiner Idee soll eine Funktion $\psi(x)$ verwendet werden, deren Absolutwert für große *x* kleiner ist als *x* selbst und gegen Null geht, wenn *x* sehr klein ist. Oft wird in diesem Zusammenhang die sogenannte Huber-Funktion verwendet (Huber und andere, 1964, Seite 94). Für die Wahl des Parameters *k* wird oft k = 1.345 verwendet (siehe zum Beispiel Chambers und andere, 2014, Seite 59). \Box Grafik 2

Sinha und Rao (2009, Seite 383 ff.) robustifizieren die Maximum-Likelihood-Gleichungen des linearen gemischten Modells (siehe Abschnitt 2.1), indem sie die Huber-Funktion auf die Residuen $y - X \beta$ anwenden.

2.4 Das robuste Spatial-Small-Area-Modell

Die Problematik von Ausreißern, die besonders bei kleinen Stichprobenumfängen für ineffiziente Schätzungen sorgen können, wurde bereits verdeutlicht. Dies gilt vor allem, da die Normalverteilungsannahme bei diesen kleinen Stichprobengrößen oft nicht erfüllt ist. Mit der Huber-Funktion kann der Einfluss von Ausreißern auf die Schätzgenauigkeit begrenzt werden. Gleichzeitig lassen sich oft geografische Informationen, welche räumliche Abhängigkeiten der Areas untereinander implizieren können, verwenden (Schmid/Münnich, 2014, Seite 653). Das Problem besteht darin, dass das räumliche Modell nicht robust gegenüber Ausreißern ist und das robuste Modell keine räumlichen Korrelationsstrukturen zulässt.

Deshalb haben Schmid und Münnich (2014) die Berichtigung von räumlichen Strukturen und die Robustheit gegenüber Ausreißern in einem Modell, dem robusten Spatial-Small-Area-Modell vereint.

Wie Sinha und Rao (2009) haben Schmid und Münnich (2014) die Maximum-Likelihood-Gleichungen robustifi-

(2.2)
$$\alpha(\beta) := \chi^T V^{-1} U^{\frac{1}{2}} \Psi_k(r) = 0$$

(2.3)
$$\Phi(\theta_l) := \Psi_k^T(r) U^{\frac{1}{2}} V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \theta_l} V^{-1} U^{\frac{1}{2}} \Psi_k(r) - spur(V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \theta_l} K) = 0, \text{ für } l = 1, 2$$

(2.4)
$$\Omega(\rho) := \Psi_k^T(r) U^{\frac{1}{2}} V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \rho} U^{\frac{1}{2}} \Psi_k(r) - spur(V^{-1} \frac{\partial V}{\partial \theta_l} K) = 0$$

ziert. Es resultieren die Gleichungen 2.2, 2.3 und 2.4 (Schmid/Münnich, 2014, Seite 659; Schmid, 2011, Seite 75).

Dabei ist *U* eine Diagonalmatrix mit denselben Diagonaleinträgen wie *V*, $r := U^{-\frac{1}{2}}$ ($y - X \beta$), $\Psi_k(r) := (\psi_k(r_1), \dots, \psi_k(r_n))^T$, $\theta = (\sigma_v^2, \sigma_e^2)^T$ und $K := E(\psi_k^2(\varepsilon))I_{nxn}$, wobei ε standardnormalverteilt ist.

Schmid und Münnich (2014, Seite 660) verwenden den Newton-Algorithmus, um die Gleichungen 2.2 bis 2.4 zu lösen.

Die so berechneten Werte $\hat{\beta}^{\psi,sp}$, $\hat{\theta}^{\psi,sp}$, $\hat{\rho}^{\psi,sp}$ und $\hat{v}^{\psi,sp}$ werden anschließend verwendet, um v zu schätzen. Dies geschieht durch die Lösung folgender Gleichung (Fellner, 1986; Schmid/Münnich, 2014):

(2.5)
$$Z^{T}R^{-\frac{1}{2}}\Psi_{k}\left(R^{-\frac{1}{2}}(y-X\beta-Z\nu)\right)-G^{-\frac{1}{2}}\Psi_{k}(G^{-\frac{1}{2}}\nu)\stackrel{!}{=}0$$

Auch für die Lösung von Gleichung 2.5 kann das Newton-Verfahren verwendet werden. Als Lösung erhält man $\hat{v}^{\psi,sp}$. Damit sind alle Parameterschätzungen vorhanden, um den Räumlichen Robusten Empirischen Besten Unverzerrten Prädiktor (SREBLUP) zum Beispiel für die Mittelwertschätzung berechnen zu können. Für diesen gilt $\hat{\mu}^{SREBLUP} = \hat{\mu}(\hat{\beta}^{\psi,sp}, \hat{\theta}^{\psi,sp}, \hat{\rho}^{\psi,sp})$.

Der Newton-Algorithmus, der in Schmid (2011) und Schmid und Münnich (2014) verwendet wird, löst die Gleichungen α , Θ und ρ jeweils nur in Abhängigkeit von einem Parameter. Wie sich zeigte, bereitet dieses Vorgehen in einigen Szenarien, in denen Ausreißer modelliert werden, Probleme. Der Algorithmus konvergiert nicht immer und kann somit nicht verlässlich für die Schätzung der Parameter im robusten Spatial-Small-Area-Modell verwendet werden. Dieses Problem wird im nächsten Kapitel numerisch betrachtet und analysiert. Anschließend wird ein alternativer Algorithmus vorgeschlagen und hergeleitet.

3

Numerische Betrachtung des robusten Spatial-Small-Area-Modells

3.1 Numerische Betrachtung der zu lösenden Gleichungen

So, wie die Gleichungen 2.2 bis 2.4 definiert wurden, könnte man auf den ersten Blick meinen, dass α nur von dem Regressionskoeffizientenvektor β , Φ nur vom Varianzparameter θ_l und Ω nur vom robusten Korrelationskoeffizienten ρ abhängt. Tatsächlich hängen jedoch alle Gleichungen von allen Parametern gleichzeitig ab. Berichtigt man diese Abhängigkeiten und fasst sie in einer Funktion zusammen, erhält man

(3.1)
$$F: \mathbb{R}^{p+3} \to \mathbb{R}^{p+3}, \\ \text{mit } F((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) := \begin{pmatrix} \alpha((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) \\ \Theta((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) \\ \varphi((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) \\ \Omega((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) \end{pmatrix}$$

Setzt man $\mathbb{R}^{p+3} \ni x := (\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T$, so muss das Gleichungssystem

(3.2)
$$F(x) = F((\sigma_e^2, \sigma_u^2, \rho, \beta)^T) = 0$$

gelöst werden. Nach Definition von *F* handelt es sich um ein nichtlineares Gleichungssystem. In den nachfolgenden Abschnitten werden Möglichkeiten aufgezeigt, wie dieses nichtlineare Gleichungssystem gelöst werden kann.

3.2 Das Newton-Verfahren

Bisher wurden die Nullstellen der einzelnen Funktionen α , Θ , γ , Ω des Gleichungssystems (3.2) nacheinander mit dem Newton-Verfahren gelöst. Im Falle einer eindimensionalen und stetig differenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ lässt sich das Newton-Verfahren für die Lösung von f(x) = 0 anschaulich wie folgt beschreiben (Schwarz/Köckler, 2009): Ausgehend vom Punkt x_i wird die Funktion f an dieser Stelle ausgewertet. Man berechnet anschließend die Nullstelle der Tangente an $f(x_i)$ mit der Abszisse des Koordinatensystems. Diese Nullstelle ist dann der neue Näherungswert x_{i+1} . \supseteq Grafik 3 veranschaulicht die Annäherung an die Nullstelle einer Funktion f mit dem Newton-Verfahren.

Das mehrdimensionale Newton-Verfahren für eine Funktion $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ zur Lösung von F(x) = 0 lässt sich durch

(3.3)
$$x_{i+1} = x_i - (F'(x_i))^{-1} F(x_i)$$
 für $i = 0, 1, 2, ...$

beschreiben. Schreibt man die Newton-Iterationsvorschrift (3.3) um, erhält man

(3.4)
$$F'(x_i)\underbrace{(x_{i+1}-x_i)}_{:=\Delta x_i} = -F(x_i).$$

Grafik 3 Beispiel des eindimensionalen Newton-Verfahrens

x₃ x₂ x₁ x₀ x₁

Anstatt der direkten Berechnung der Inversen von *F* in jeder Iteration kann also alternativ das lineare Gleichungssystem (3.4) gelöst werden.

Für die Anwendung des Newton-Algorithmus zur gleichzeitigen Lösung der robusten Spatial-Small-Area-Gleichungen ergeben sich folgende drei Probleme:

- 1. Die Jacobi-Matrix *F*' muss in jeder Iteration berechnet werden.
- 2. Das Gleichungssystem (3.4) muss effizient gelöst werden.
- 3. Das Newton-Verfahren konvergiert nur lokal.

Lösungen für diese Probleme werden in den nächsten Abschnitten kurz vorgestellt.

3.3 Newton-GMRES

Die exakte Berechnung des Newton-Schritts mittels Gleichung (3.4) mit einer direkten Methode, wie zum Beispiel dem Gauß-Algorithmus, kann sehr rechenintensiv sein, wenn die Anzahl der Unbekannten hoch ist (Dembo und andere, 1982, Seite 400). Hinzu kommt, dass für schlechte Startwerte x_0 , die weit von der Lösung x^* entfernt sind, eine exakte Berechnung nicht notwen-

> dig ist, da der Fehler noch zu groß ist, als dass der zusätzliche Rechenaufwand gerechtfertigt wäre. Es liegt also nahe, Gleichung (3.4) iterativ bis zu einer hinreichenden Präzision zu lösen.

Die erste Idee, diese Probleme zu lösen, ist der Newton-GMRES-Algorithmus. Diese Methode gehört zu den inexakten Newton-Verfahren, da die Jacobi-Matrix F' nicht exakt berechnet, sondern numerisch angenähert wird. Es genügt $||F'(x_i) \Delta x_i + F(x_i)|| \le \eta_i ||F(x_i)||$ für einen geeigneten Forcing-Term η_i zu berechnen. Setzt man in Gleichung (3.4) für ein fes $i \in \mathbb{N}_0 A := F'(x_i) \in \mathbb{R}^{n \times n},$ tes $x := \Delta x_i \in \mathbb{R}^n$ und $b := -F(x_i) \in \mathbb{R}^n$, muss in jeder Newton-Iteration das lineare Gleichungssystem Ax = b gelöst werden. Dieses lineare Gleichungssystem wird nun mit dem Generalized Minimum Residual Algorithmus (GMRES) gelöst werden, der von Saad und Schultz (Saad/Schultz, 1986) entwickelt wurde.

Der GMRES-Algorithmus minimiert in der k-ten Iteration die Norm des Residuums Ax - b für ein x aus der Menge $x_0 + K_k$, wobei mit K_k der Krylov-Unterraum $K_k := \langle \{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\} \rangle$ mit $r_0 = b - Ax_0$ gemeint ist. $|^1$

Die Besonderheit von GMRES liegt nun darin, dass der Lösungsraum des Minimierungsproblems auf einen Krylov-Unterraum eingeschränkt wird und somit nicht im gesamten \mathbb{R}^n berechnet werden muss. Durch eine effiziente Implementierung von GMRES durch Gram-Schmidt-Orthogonalisierung und Givens-Rotationen erhält man ein komplett matrixfreies Verfahren (Saad/Schultz, 1986).

Um die analytische Berechnung der Jacobi-Matrix $A = F'(x_i)$ zu vermeiden, kann diese stattdessen mittels finiter Differenzen approximiert werden. Dann allerdings müsste in jeder Newton-Iteration ein Matrix-Vektorprodukt der approximierten Jacobi-Matrix mit Δx berechnet werden. Eine Alternative dazu ist die Verwendung von

finiten Richtungsableitungen, die bei vielen Implementierungen zu finden ist (Kelley, 1995; Brown, 1982, Seite 101) und auch hier angewendet wurde. Eine geeignete Wahl der Forcing-Terme η_i , die auf Eisenstat und Walker (1996, Seite 21 und Seite 24) basiert und Kelley (1995, Seite 105) modifizierte, führt zu weiteren Effizienzsteigerungen. Schließlich kann durch die Ausnutzung von speziellen Matrixstrukturen und die Anwendung der Woodbury-Matrix-Identität (zum Beispiel Hager, 1989, Seite 221) die Rechenzeit für eine Funktionsauswertung gesenkt werden.

Die Startwerte für das Newton-GMRES-Verfahren werden mit der Henderson-Methode-III (Henderson, 1953) berechnet, die auf der ANOVA-Varianzanalyse basiert (siehe auch Đorđević/Lepojević, 2003).

Um schließlich das Problem der lokalen Konvergenz zumindest etwas abzuschwächen, wird zur Globalisierung eine gedämpfte Newton-Iteration verwendet. Statt dem vollen Newton-Schritt wird ein $alpha_i \in (0, 1]$ gewählt und statt $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$ wird $x_{i+1} = x_i + \alpha_i \Delta x_i$ berechnet. Um α_i zu bestimmen, wird das Minimierungsproblem

(3.5)
$$\min_{\alpha_i \in (0,1]} \|F(x_i + \alpha_i \Delta x_i)\|$$

approximativ durch eine Polynominterpolation 2. Grades gelöst.

Die gedämpfte Newton-Iteration erweitert den Konvergenzbereich gegenüber dem gewöhnlichen Newton-Ver-

Grafik 4

Beispiel: Konvergenzbereich des gewöhnlichen Newton-Verfahrens



¹ Für eine Menge Ω bezeichne $\langle \Omega \rangle := \{ \Sigma_{k=1}^n \alpha_k \omega_k : \alpha_k \in \mathbb{R}, \omega_k \in \Omega, n \in \mathbb{N} \}$ die lineare Hülle, das heißt die Menge aller endlichen Linearkombinationen von Vektoren aus Ω .

Grafik 5

Beispiel: Konvergenzbereich des gedämpften Newton-Verfahrens



2016 - 01 - 0468

fahren, allerdings ist ein Erfolg dieser Methode für Startwerte, die sehr weit von der Lösung entfernt sind, noch immer nicht garantiert. Die \supseteq Grafiken 4 und 5 zeigen beispielhaft den Konvergenzbereich des gewöhnlichen Newton-Verfahrens für die Nullstellensuche einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und den erweiterten Konvergenzbereich für die gedämpfte Newton-Iteration.

3.4 Newton-Fixpunkt-Hybridalgorithmus

Eine weitere Möglichkeit, nichtlineare Gleichungen zu lösen, ist das Fixpunktverfahren. Mit diesem können Fixpunktprobleme der Form G(x) = x iterativ durch $x_{i+1} = G(x_i)$ gelöst werden. Eine Möglichkeit, dieses Verfahren auf die Funktion (3.1) anwenden zu können, ist $G(x) := x + \alpha F(x)$ für ein beliebiges $\alpha \in \mathbb{R}/\{0\}$ zu setzen. Allerdings führt diese Strategie zu keinem Erfolg.

Chatrchi (2012, Seite 17 f.) verwendete eine alternative Herleitung einer Fixpunktgleichung nur für die Schätzung der Varianzparameter σ_u^2 und σ_e^2 im robusten Small-Area-Modell. Außerdem zeigte Chatrchi (2012, Seite 21 f.) anhand eines Beispiels, dass die Anwendung des Fixpunktalgorithmus auf diese alternative Fixpunktgleichung robuster ist als das Newton-Verfahren. Diese Fixpunktgleichung wurde in der Masterarbeit auf das räumliche robuste Small-Area-Modell erweitert (Rosenthal, 2015, Seite 92 ff.). Die Idee ist, Parameter ρ und β zunächst als konstant zu betrachten, sodass die Gleichungen für Θ und γ nur noch von $\theta := (\sigma_e^2, \sigma_u^2)^T$ abhängen. Diese beiden Gleichungen werden anschließend parallel mit dem Fixpunktalgorithmus gelöst. Als Ergebnis erhält man robust geschätzte Varianzparameter σ_u^2 und σ_e^2 .

Fixiert man nun die Parameter σ_u^2 und σ_e^2 , so sind die Gleichungen für α und Ω nur noch von ρ und β abhängig. Setzt man $z := (\rho, \beta)^T \in \mathbb{R}^{p+1}$ und

(3.6)
$$h: \mathbb{R}^{p+1} \to \mathbb{R}^{p+1}, \text{ mit } h(z): = \begin{pmatrix} \alpha(z) \\ \Omega(z) \end{pmatrix},$$

lässt sich die Gleichung h(z) = 0 mit dem modifizierten Newton-GMRES-Algorithmus aus Abschnitt 3.3 effizient lösen.

Der Newton-Fixpunkt-Hybridalgorithmus funktioniert nun so, dass pro äußerer Iteration des Verfahrens je eine innere Iteration mit dem Fixpunkt- beziehungsweise Newton-GMRES-Verfahren ausgeführt wird, bevor die äußere Iteration von Neuem startet. Dieser Newton-Fixpunkt-Hybridalgorithmus kann selbst wieder als inexaktes oder Quasi-Newton-Verfahren interpretiert werden (Rosenthal, 2015, Seite 96 ff.).

4

Anwendung der Algorithmen in modellbasierter Simulation

Um zu überprüfen, ob der modifizierte Newton-GMRES-Algorithmus beziehungsweise der Newton-GMRES-Fixpunkt-Hybridalgorithmus in möglichst vielen praktischen Anwendungsfällen konvergiert, müssen die Modellgleichungen nun konkret berechnet werden. Dafür wird zunächst ein Stichprobenvektor *y* benötigt.

Um viele Stichprobendaten zu erhalten, bietet sich eine modellbasierte Simulation an. Die Grundgesamtheit für diese wurde synthetisch auf Basis eines Linearen Gemischten Modells erzeugt, bei dem verschiedene Fälle von Ausreißern und räumlichen Korrelationen berücksichtigt wurden. Dies ist wichtig, da das robuste Spatial-Small-Area-Modell speziell entwickelt wurde, um auch bei Ausreißern noch verlässliche räumliche Schätzer liefern zu können. Um die Ergebnisse der neuen Verfahren mit den Ergebnissen des von Schmid (2011, Seite 82 ff.) bisher verwendeten Newton-Algorithmus vergleichen zu können, orientiert sich die Parameterwahl an seiner Arbeit.

4.1 Datenerzeugung

Die synthetische Grundgesamtheit besteht aus insgesamt N = 10000 Merkmalsträgern, die auf m = 100Areas verteilt sind. Jede Area habe einen Umfang von $N_i = 100$ für alle i = 1, ..., 100. Für jeden Merkmalsträger j aus Area i gibt es eine Ausprägung der Hilfsvariablen $(x_1)_{ij}$ und $(x_2)_{ij}$ zusammen mit den Angaben von Längen- und Breitengrad.

Es wird angenommen, dass die Merkmalsträger in einer Area zentriert sind. Das bedeutet, dass alle Merkmalsträger in einer Area die gleichen Koordinaten teilen. Somit werden 100 verschiedene Werte der Variablen *long(i)* und *lat(i)* für Längen- und Breitengrad benötigt. Diese werden gleichverteilt aus dem Intervall [0, 1] gezogen:

> $long(i) \sim U([0, 1]), \text{ für } i = 1, ..., 100$ $lat(i) \sim U([0, 1]), \text{ für } i = 1, ..., 100.$

Nun seien die Merkmalsträger der Grundgesamtheit ohne Beschränkung der Allgemeinheit so geordnet, dass die ersten 100 der ersten Area zugehörig sind, die nächsten 100 der zweiten, und so weiter.

Um ein Modell mit Achsenabschnitt zu erhalten, wird die erste Hilfsvariable $(x_1)_{ij} \equiv 1$ gesetzt. Die Hilfsvariable $(x_2)_{ij}$ hingegen sei normalverteilt mit Mittelwert $\mu_x = 1$ und Varianz $\sigma_x^2 = 1$:

$$(x_2)_{ij} \sim N(1, 1)$$

Tabelle 1 zeigt die Struktur der mit diesen Parametern erzeugten synthetischen Grundgesamtheit.

Tabelle 1

Synthetische Grundgesamtheit

χ^1	χ ²	Area	Merkmals- träger	Längengrad	Breitengrad	
1	0.1597	1	1	0.6031	0.9252	
1	2.1825	1	2	0.6031	0.9252	
1	1.2792	1	3	0.6031	0.9252	
:	:	:	:	:	:	
1	1.2305	1	99	0.6031	0.9252	
1	3.4532	1	100	0.6031	0.9252	
1	1.9361	2	101	0.7215	0.5553	
1	- 0.3643	2	102	0.7215	0.5553	
1	- 0.3011	2	103	0.7215	0.5553	
:	:	:	:	:	:	
1	1.9845	100	9 998	0.0683	0.4426	
1	1.3717	100	9 999	0.0683	0.4426	
1	0.8581	100	10 000	0.0683	0.4426	

Die Auswahl der Stichprobenelemente aus dieser Grundgesamtheit erfolgt durch eine nach den Areas geschichtete uneingeschränkte Zufallsstichprobe ohne Zurücklegen. Dabei werden aus jeder Area $n_i = 5$ Merkmalsträger gezogen, was einem Stichprobenumfang von n = 500 entspricht. Sowohl die synthetische Population als auch die aus der Grundgesamtheit gezogenen Stichprobenelemente werden im Laufe der Simulation wie bei Schmid (2011, Seite 83) nicht mehr geändert. Die Variabilität der abhängigen Variable entsteht allein durch die Verwendung des räumlichen Regressionsmodells (Schmid, 2011; Chambers und andere, 2014, Seite 83 beziehungsweise Seite 59)

(4.1) $y_{ij} = 100 + 4x_{ij} + v_i + e_{ij}$.

Grafik 6

Drei Stichprobenziehungen für die Szenarien 0 bis 6



Die Verteilungen von v_i und e_{ii} hängen vom betrachteten Szenario ab. Insgesamt wurden sieben verschiedene Fälle betrachtet. Diese unterscheiden sich darin. ob Ausreißer in den Daten vorhanden sind, ob diese symmetrisch oder asymmetrisch sind und ob sich die Ausreißer auf den Area-Effekt v oder den individuellen Fehlerterm e oder sogar auf beide beziehen. Sollte ein Szenario Ausreißer im individuellen Fehlerterm enthalten, wurden 5% der Daten zufällig kontaminiert. Um eine bessere Übersicht zu erhalten, wurden im Falle von Area-Effekt-Ausreißern nur die letzten fünf Areas kontaminiert. Für jedes dieser Szenarien wurden die Parameter v und e 100-mal neu gezogen. Anschließend wurde y nach Gleichung (4.1) berechnet und abgespeichert. Dadurch entstanden je Fall 100 verschiedene Stichprobendatensätze. Die Szenarien unterscheiden sich anhand der Verteilungen von $v = (v_1, \ldots, v_{100})^T$ und e_{ii} . Grafik 6 zeigt beispielhaft die Daten von drei Stichprobenziehungen für jedes der sieben Szenarien. Es werden jeweils die Streudiagramme der Wertepaare $((x_2)_{ii}, y_{ii})$ dargestellt. Man kann die individuellen Ausreißer in

4.2 Anwendung der Algorithmen

Das Newton-GMRES-Verfahren konvergiert schneller als der Hybrid-Algorithmus. Dies entspricht den Erwartungen, da das Newton-Verfahren in der Nähe der Lösung quadratisch konvergiert, während bei einem Fixpunkt-Algorithmus nur lineare Konvergenz zu erreichen ist. Leider zeigt sich jedoch, dass die Berechnung der Varianzparameter σ_e^2 und σ_u^2 dem modifizierten Newton-GMRES-Algorithmus erhebliche Probleme bereitet.

▶ Grafik 7 zeigt den Verlauf von $||F(x_i)||$ beider Verfahren. An dem Verlauf der Norm von $F(x_i)$ kann man erkennen, dass auch eine Erhöhung der hier verwendeten maximalen Iterationsanzahl von 20 keine Hoffnung auf Konvergenz aufkommen lässt. Tatsächlich wird die Matrix $G(\sigma_{u,\rho}^2,\rho)$, die für die Funktionsauswertung von *F* benötigt wird, nach vier Iterationen bereits singulär, da auch der räumliche Korrelationskoeffizient ρ immer größer wird. Zur Iterationsberechnung wurde Stichprobendatensatz 4 von Szenario 0 verwendet. Das heißt, dass noch keine

den Szenarien 1, 3, 4 und 6 deutlich erkennen. Außerdem sieht man die Asymmetrie der Ausreißer der Szenarien 4 bis 6 gegenüber den symmetrischen Ausreißern der Szenarien 1 bis 3. Die Area-Ausreißer in Szenario 2 sind aufgrund der Symmetrie etwas schwer zu erkennen. Beim direkten Vergleich der jeweils ersten Stichproben kann man jedoch wahrnehmen, dass die Punktewolke von Szenario 2 etwas dicker als beim Szenario 0 ohne Ausreißer ist. Die asymmetrischen Area-Ausreißer von Szenario 5 hingegen sind im Vergleich mit dem Referenzszenario 0, in dem es keine Ausreißer gab, deutlich ersichtlich.

Grafik 7





Tabelle 2											
Anteil erfolgreicher Konvergenzen der Algorithmen											
	Szenario 0	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 3	Szenario 4	Szenario 5	Szenario 6				
	%										
Newton	80,6	81,4	92,4	87,6	74,2	67,8	68				
NGMRES	37	1	37	2	0	4	0				
Hybrid	99	99	100	100	84	100	98				

vielen praktisch relevanten Fällen konvergiert.

Die erste Strategie bestand darin, die einzelnen Modellgleichungen zu einem einzigen Gleichungssystem zusammenzufassen und gleich-

Ausreißer in den Daten vorhanden waren, es aber trotzdem schon zu Konvergenzproblemen gekommen ist.

→ Tabelle 2 fasst die Konvergenzraten der Algorithmen in den einzelnen Szenarien zusammen und vergleicht diese mit dem von Schmid (2011, Seite 98 ff.) verwendeten gewöhnlichen Newton-Verfahren¹².

Wie zu sehen ist, schneidet das modifizierte Newton-GMRES-Verfahren trotz seiner zahlreichen Modifikationen bezüglich Globalisierung, Parameterwahl und Abbruchkriterium enttäuschend ab. Selbst wenn keine Ausreißer oder nur Ausreißer auf Area-Ebene vorhanden sind, kann das Verfahren mit einer Konvergenz in nur 37 % aller Fälle nicht überzeugen. Für den Einsatz in der Praxis ist es daher ungeeignet.

Der Newton-GMRES-Fixpunkt-Hybridalgorithmus schneidet hingegen in jedem Szenario deutlich besser als das gewöhnliche Newton-Verfahren ab. Der Algorithmus ist sehr robust und divergiert in nur 2,86 % aller Fälle. Hauptverantwortlich für die Divergenz ist das Szenario 4, bei dem asymmetrische Ausreißer im individuellen Fehlerterm in den Daten auftreten. In allen anderen Szenarien liegt die Konvergenzrate bei fast 100 %. Aufgrund dieser deutlichen Verbesserung gegenüber dem gewöhnlichen Newton-Verfahren wird die Verwendung des Newton-GMRES-Fixpunkt-Hybridalgorithmus in praktischen Anwendungen empfohlen.

5

Fazit

Hauptziel war es, neben der theoretischen Erläuterung einen robusten Algorithmus zur Lösung des robusten Spatial-Small-Area-Problems zu finden, der in möglichst

54

sucht wurden, resultierte das modifizierte Newton-GMRES-Verfahren, das als ableitungs- und matrixfreies Verfahren mithilfe einiger Verbesserungen zu vielversprechenden Ergebnissen führen sollte. Leider bestätigte sich diese Erwartung nicht. Es stellte sich in einer modellbasierten Simulation heraus, dass dieses Verfahren sogar noch schlechter konvergierte als das bisher verwendete gewöhnliche Newton-Verfahren, bei dem die Modellgleichungen einzeln gelöst werden. Die alleinige Verwendung des modifizierten Newton-GMRES-Verfahrens ist somit nicht zielführend zur Lösung des robuste Spatial-Small-Area-Problems.

zeitig zu lösen. Nachdem alle Abhängigkeiten unter-

Die zweite Strategie besteht aus der Verwendung des Fixpunktverfahrens zur Lösung der Varianzparameter, welches Chatrchi (2012) bereits für das robuste Small-Area-Modell verwendet hatte. Die Herleitung des Verfahrens wurde auf das robuste Spatial-Small-Area-Modell erweitert. Anschließend wurden die Modellgleichungen in zwei Teile aufgespalten. Einer dieser Teile wurde mit dem Fixpunktalgorithmus, der andere mit dem modifizierten Newton-GMRES-Algorithmus gelöst. Aus dieser Kombination resultierte das Newton-GMRES-Fixpunkt-Hybridverfahren, das deutlich besser als das gewöhnliche Newton-Verfahren und in den meisten untersuchten Szenarien zu fast 100% konvergiert. Lediglich im Falle asymmetrischer Ausreißer im individuellen Fehlerterm sank die Rate nach Korrektur unbrauchbarer Werte auf 84%, womit sie aber immer noch höher ist als die 74,2-prozentige Erfolgsrate des gewöhnlichen Newton-Verfahrens.

Das Ziel, einen besseren und robusteren Algorithmus zu finden, wurde damit erreicht. 11

² Anhand der dort aufgeführten Grafiken konnte der Anteil erfolgreicher Konvergenzen ermittelt werden.

LITERATURVERZEICHNIS

Articus, Charlotte. *Small Area-Verfahren zur Schätzung regionaler Mietpreise*. Diplomarbeit. Trier 2013.

Articus, Charlotte. *Small-Area-Verfahren zur Schätzung regionaler Mietpreise*. In: Wirtschaft und Statistik. Ausgabe 2/2014, Seite 113 ff.

Brown, Peter N. *A Local Convergence Theory for Combined Inexact-Newton/Finite-Difference Projection Methods*. In: SIAM Journal on Numerical Analysis. Jahrgang 24. Ausgabe 2. 1987, Seite 407 ff.

Burgard, Jan P./Münnich, Ralf/Zimmermann, Thomas. *The Impact of Sampling Designs on Small Area Estimates for Business Data*. In: Journal of Official Statistics. Jahrgang 30. Ausgabe 4. 2014, Seite 749 ff.

Chambers, Ray/Chandra, Hukum/Salvati, Nicola/Tzavidis, Nikos. *Outlier Robust Small Area Estimation*. In: Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology). Jahrgang 76. Ausgabe 1. 2014, Seite 47 ff.

Chatrchi, Golshid. *Robust Estimation of Variance Components in Small Area Estimation*. Master's thesis. Carleton University, Ottawa 2012.

Dembo, Ron S./Eisenstat, Stanley C./Steihaug, Trond. *Inexact Newton Methods*. In: SIAM Journal on Numerical Analysis. Jahrgang 19. Ausgabe 2. 1982, Seite 400 ff.

Eisenstat, Stanley C./Walker, Homer F. *Choosing the Forcing Terms in an Inexact Newton Method*. In: SIAM Journal on Scientific Computing. Jahrgang 17. Ausgabe 1. 1996, Seite 16 ff.

Fay, Robert E./Herriot, Roger A. *Estimates of Income for Small Places: An Application of James-Stein Procedures to Census Data*. In: Journal of the American Statistical Association. Jahrgang 74. Ausgabe 366a. 1979, Seite 269 ff.

Fellner, William H. *Robust Estimation of Variance Components*. In: Technometrics. Jahrgang 28. Ausgabe 1. 1986, Seite 51 ff.

Hager, William W. *Updating the Inverse of a Matrix*. In: SIAM Review. Jahrgang 31. Ausgabe 2. 1989, Seite 221 ff.

Henderson, Charles R. *Estimation of Variance and Covariance Components*. In: Biometrics. Jahrgang 9. Ausgabe 2. 1953, Seite 226 ff.

Huber, Peter J. *Robust Estimation of a Location Parameter*. In: The Annals of Mathematical Statistics. Jahrgang 35. Ausgabe 1. 1964, Seite 73 ff.

Jiang, Jiming/Lahiri, Partha. *Mixed Model Prediction and Small Area Estimation*. In: TEST. Jahrgang 15. Ausgabe 1. 2006, Seite 1 ff.

Kelley, C. T. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. Philadelphia 1995.

LITERATURVERZEICHNIS

Molina, Isabel/Salvati, Nicola/Pratesi, Monica. *Bootstrap for Estimating the MSE of the Spatial EBLUP*. In: Computational Statistics. Jahrgang 24. Ausgabe 3. 2009, Seite 441 ff.

Münnich, Ralf/Burgard, Jan P. *On the Influence of Sampling Design on Small Area Estimates*. In: Journal of the Indian Society of Agricultural Statistics. Jahrgang 66. Ausgabe 1. 2012, Seite 145 ff.

Münnich, Ralf/Burgard, Jan P./Vogt, Martin. *Small Area-Statistik: Methoden und Anwendungen*. In: AStA Wirtschafts- und Sozialstatistisches Archiv. Jahrgang 6. Ausgabe 3 – 4. 2013, Seite 149 ff.

Đorđević, Vera/Lepojević, Vinko. *Henderson's Approach to Variance Components Estimation for Unbalanced Data*. In: Facta Universitatis-Series: Economics and Organization. Jahrgang 2. Ausgabe 1. 2003, Seite 59 ff.

Pratesi, Monica/Salvati, Nicola. *Small Area Estimation: The EBLUP Estimator Based on Spatially Correlated Random Area Effects*. In: Statistical Methods and Applications. Jahrgang 17. Ausgabe 1. 2008, Seite 113 ff.

Richardson, Alice M./Welsh, Alan H. *Robust Restricted Maximum Likelihood in Mixed Linear Models*. In: Biometrics. Jahrgang 51. 1995, Seite 1429 ff.

Rosenthal, Philip. *Optimierung von Algorithmen zur Schätzung von robusten Spatial Small Area Modellen*. Master's thesis. Trier, 2015.

Saad, Yousef/Schultz, Martin H. *GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems*. In: SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing. Jahrgang 7. Ausgabe 3. 1986, Seite 856 ff.

Schmid, Timo. *Spatial Robust Small Area Estimation applied on Business Data*. Dissertation. Trier 2011.

Schmid, Timo/Münnich, Ralf. *Spatial Robust Small Area Estimation*. In: Statistical Papers. Jahrgang 55. Ausgabe 3. 2014, Seite 653 ff.

Schwarz, Hans Rudolf/Köckler, Norbert. *Numerische Mathematik*. 7. Auflage. Berlin 2009.

Sinha, Sanjoy/Rao, J. N. K. *Robust Small Area Estimation*. In: Canadian Journal of Statistics. Jahrgang 37. Ausgabe 3. 2009, Seite 381 ff.

Herausgeber Statistisches Bundesamt, Wiesbaden www.destatis.de

Schriftleitung Dieter Sarreither, Präsident des Statistischen Bundesamtes Redaktionsleitung: Kerstin Hänsel Redaktion: Ellen Römer

Ihr Kontakt zu uns www.destatis.de/kontakt

Erscheinungsfolge zweimonatlich, erschienen im Juni 2016 Das Archiv aller Ausgaben ab Januar 2001 finden Sie unter www.destatis.de/publikationen

Print

Einzelpreis: EUR 18,- (zzgl. Versand) Jahresbezugspreis: EUR 108,- (zzgl. Versand) Bestellnummer: 1010200-16003-1 ISSN 0043-6143 ISBN 978-3-8246-1045-7

Download (PDF) Artikelnummer: 1010200-16003-4, ISSN 1619-2907

Vertriebspartner IBRo Versandservice GmbH Bereich Statistisches Bundesamt Kastanienweg 1 D-18184 Roggentin Telefon: +49(0) 38204/66543 Telefax: +49(0) 38204/66919 destatis@ibro.de

Papier: Metapaper Smooth, FSC-zertifiziert, klimaneutral, zu 61% aus regenerativen Energien

© Statistisches Bundesamt, Wiesbaden 2016

Vervielfältigung und Verbreitung, auch auszugsweise, mit Quellenangabe gestattet.