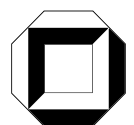


Dipl.-Ing. Stephan Kupferer

Anwendung der Total-Least-Squares- Technik bei geodätischen Problemstellungen



Stephan Kupferer

**Anwendung der Total-Least-Squares-Technik bei geodätischen
Problemstellungen**

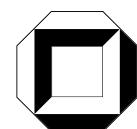
Universität Karlsruhe (TH)

Schriftenreihe des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik

2005, 1

Anwendung der Total-Least-Squares-Technik bei geodätischen Problemstellungen

von
Stephan Kupferer



universitätsverlag karlsruhe

Dissertation, genehmigt von der
Fakultät für Bauingenieur-, Geo und Umweltwissenschaften
der Universität Friderciana zu Karlsruhe (TH), 2005
Referenten: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E. h. G. Schmitt, Prof. Dr. rer. nat. G. Alefeld

Impressum

Universitätsverlag Karlsruhe
c/o Universitätsbibliothek
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe
www.uvka.de



Dieses Werk ist unter folgender Creative Commons-Lizenz
lizenziert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.0/de/>

Universitätsverlag Karlsruhe 2005
Print on Demand

ISSN 1612-9733
ISBN 3-937300-67-8

Anwendung der Total-Least-Squares-Technik bei geodätischen Problemstellungen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der Fakultät für

Bauingenieur- und Vermessungswesen
der Universität Fridericiana zu Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Ing. Stephan Kupferer
aus Ulm/Donau

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Mai 2005
Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E. h. G. Schmitt
Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. G. Alefeld
Karlsruhe 2005

Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E. H. Günter Schmitt für die Betreuung dieser Arbeit und für die Unterstützung, die er mir zukommen ließ. In gleicher Weise danke ich Herrn Prof. Dr. rer. nat. G. Alefeld für die Übernahme des Koreferats.

Ebenso möchte ich mich bei allen Kolleginnen und Kollegen des Geodätischen Instituts der Universität Karlsruhe (TH) bedanken, die in unterschiedlicher Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Dies gilt insbesondere für Herrn Dr.-Ing. Georg Dinter, der wertvolle Anregungen zu Beginn der Arbeit beisteuerte.

Ein ganz besonderer Dank gebührt selbstverständlich meiner Familie, die mich während der Arbeit unterstützt hat.

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wird die Ausgleichung nach dem Total-Least-Squares-Prinzip vorgestellt und auf geodätische Problemstellungen angewandt. Total Least Squares ist ein relativ junges Verfahren im Bereich der Parameterschätzung. Für Geodäten stellt sich die Frage, ob sich Total Least Squares auch bei gängigen Problemstellungen der Geodäsie verwenden lässt und ob sich durch die Ausgleichung nach Total Least Squares im Vergleich zu den traditionellen Verfahren neue Erkenntnisse gewinnen lassen. Um die Arbeitsweise dieses Schätzers nachvollziehen zu können, werden zunächst genau die mathematischen Grundlagen vorgestellt, die in diesem Kontext eine Rolle spielen. Auf Basis dieser Grundlagen wird sowohl die klassische Berechnung einer Ausgleichung nach TLS als auch die eines gemischten TLS-LS-Problems erklärt. Weiterhin wird aufgezeigt, wie ein TLS-Problem in ein Gauß-Helmert-Problem umgewandelt werden kann, um den Kreis der möglichen Anwendungen zu erweitern. Eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten konventionellen Modelle erleichtert die Einordnung von TLS, die auch die Entwicklung des mehrdimensionalen Beobachtungstests für Gauß-Helmert-Modelle beinhaltet. An unterschiedlichen Fallbeispielen wird untersucht, wie die Voraussetzungen für die Anwendung von TLS geschaffen werden können und welche Vorteile sich durch die Ausgleichung nach TLS ergeben.

Abstract

This work presents the adjustment in the total least squares sense and describes the application of total least squares in common geodetic problems. The total least squares adjustment is a relatively new technique in parameter estimation. It has been investigated by mathematic scientists since the early 80's and applied to various problems in different disciplines. Now for geodesists the question arises whether or not total least squares is applicable to problems in their domain. The first chapters provide an overview over the mathematical basics, the reader is supposed to master in order to understand the mode of operation of TLS. Hereon the classical TLS and the mixed TLS LS approach is introduced and analysed. Additionally a way is shown to transform any TLS model to a Gauß-Helmert model, which expands the range of applicable problems. The presentation of TLS is followed by a brief summary of the most important modelling techniques in linear adjustment. This is accompanied by a strategy for testing multidimensional observations in a Gauß-Helmert model developed as part of this work. After having dealt with all the necessary fundamentals, various examples from different parts of practical estimation problems in geodesy are presented. The main concern is with the preparation of models to guarantee optimal characteristics in the total least squares sense and the interpretation of the results TLS gives.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	1
2	Einführung	2
3	Erfolgreiche Anwendungen	8
4	Mathematische Grundlagen	11
4.1	Normen von Vektoren und Matrizen	12
4.2	Kondition einer Matrix	15
4.3	QR-Zerlegungen	16
4.4	Berechnung von QR-Zerlegungen	18
4.5	Singulärwertzerlegung	22
4.6	Gezielte Reduzierung des Ranges einer Matrix	25
5	Konventionelle Modelle in der Geodäsie	25
5.1	Gauß-Markov-Modell	27
5.1.1	Standardmodell	27
5.1.2	Modellbildung mit Restriktionen	28
5.1.3	Statistische Tests	29
5.1.4	Weitere Bemerkungen	37
5.2	Gauß-Helmert-Modell	38
5.2.1	Grundmodell	38
5.2.2	Modell mit Restriktionen	39
5.2.3	Statistische Tests	40
6	Total Least Squares	47
6.1	Classical Total Least Squares	47
6.1.1	Motivation und Formulierung des Problems	47
6.1.2	Berechnung der Lösung	49
6.1.3	Geometrische Interpretation	51
6.1.4	Alternative TLS-Probleme	53
6.2	Erweiterungen des Classical TLS	57
6.2.1	Mehrdeutige Lösung	58

6.2.2	Spezifische Probleme	62
6.2.3	Gemischte LS-TLS-Probleme	66
6.2.4	Einheitliche Berechnung aller Sonderfälle	68
6.3	Statistische Eigenschaften von TLS	72
6.3.1	TLS- und LS-Modell	72
6.3.2	Konsistenz des Schätzverfahrens	73
6.3.3	Verteilung des Parametervektors	75
6.4	Skalierung von originären TLS-Problemen	76
6.5	Frei skalierbare TLS-Probleme	79
7	Verwendung von TLS in geodätischen Problemen	83
7.1	Perspektiven von TLS	83
7.2	Fallbeispiel 1	84
7.2.1	Gauß-Helmert-Modell	85
7.2.2	TLS-Modell	86
7.2.3	Vergleich	86
7.2.4	Beurteilung	90
7.3	Fallbeispiel 2	90
7.4	Fallbeispiel 3	95
7.4.1	Modell	95
7.4.2	Testrechnungen	96
7.4.3	Beurteilung	100
7.5	Fallbeispiel 4	100
7.5.1	Modell	100
7.5.2	Beurteilung	102
7.6	Fallbeispiel 5	103
7.6.1	Testrechnungen	107
7.6.2	Beurteilung	112
7.7	Erkenntnisse aus den Fallbeispielen	112
8	Zusammenfassung	118

A Technische Daten **122**
A.1 Hardware 122
A.2 Software 122

Abkürzungsverzeichnis

$ a $	Betrag der Variablen a
α	Signifikanzniveau/Sicherheitswahrscheinlichkeit eines Tests
β	Güte eines Tests
$\chi^2(m, \lambda)$	nichtzentrale χ^2 -Verteilung mit m Freiheitsgraden
Δ	Signalisierung einer kleinen Größe auf stochastischer Basis
$\hat{\sigma}^2$	Varianzfaktor a posteriori
\hat{a}	Schätzung für einen unbekanntem Wert oder Vektor a
\hat{x}_{LS}	Schätzung für die Unbekannten nach LS-Prinzip
\hat{x}_{TLS}	Schätzung für die Unbekannten nach TLS-Prinzip
$\kappa_p(M)$	Konditionszahl einer Matrix M auf Basis der l_p -Norm
λ	Nichtzentralitätsparameter
λ_i	i -ter Eigenwert einer Matrix
∇e	grober Fehler
∇l	Anteile grober Fehler im Beobachtungsvektor l
∇	Signalisierung einer kleinen Größe auf Basis eines groben Fehlers
$\ M\ _{1,2,\infty,F}$	1-, 2-, ∞ - bzw. Frobenius-Norm der Matrix M
$\ x\ _M$	M -Norm des Vektors x , Halbnorm bei singulärem M
$\ x\ _p$	Hölder-Norm (l_p -Norm) des Vektors x
$\mathcal{N}(M)$	Nullraum der Matrix M
Ω	(gewichtete) Quadratsumme eines Vektors
\mathfrak{R}^n	Raum der reellen Zahlen mit der Dimension n
σ	Standardabweichung
σ_0^2	Varianzfaktor a priori
ζ_i	i -ter Singulärwert einer Matrix
$\mathcal{S}(M)$	Spaltenraum der Matrix M
\tilde{a}	wahrer, aber unbekannter Wert oder Vektor a
$\varphi(x)$	Dichtefunktion der Variable x
$\mathcal{Z}(M)$	Zeilenraum der Matrix M
\mathcal{F}	Zielfunktion der Minimierung bei konventionellen Modellen
A	Designmatrix, resultierend aus dem mathematischen Modell
b	Vektor der Beobachtungen in mathematischer Literatur
C_l	Varianz-Kovarianz-Matrix des Vektors l
$diag(a, \dots, z)$	Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen a bis z
$E(x)$	Erwartungswert von x
$F_{m,n;\lambda}$	nichtzentrale Fisherverteilung mit m, n Freiheitsgraden
H_0	Nullhypothese
H_a	Alternativhypothese
J	Jakobi-Matrix
k	Korrelaten aus der Laplace-Gleichung, kritischer Wert bei

	statistischen Tests
L	Lösungsraum der TLS-Berechnung
l	Vektor der Beobachtungen in geodätischer Literatur
M^+	MPB-Inverse der Matrix M
M^-	allgemeine g-Inverse der Matrix M
$N(\mu, C)$	Normalverteilung eines Vektors mit dem Erwartungswert μ und der VK-Matrix C
$N_r(\mu, C)$	singuläre Normalverteilung eines Vektors mit dem Erwartungswert μ und der rangdefekten VK-Matrix C
$P(H : x)$	Wahrscheinlichkeit für x unter der Voraussetzung, dass H gilt
Q_l	Kofaktormatrix des Vektors l
R	Matrix der linearisierten Restriktionen
r	Redundanz des Modells
$sign(a)$	Vorzeichen der Zahl a
T	statistischer Testwert
$t_n(\delta)$	nichtzentrale (δ) Studentverteilung mit n Freiheitsgraden
U, V	Transformationsmatrizen der Singulärwertzerlegung
u_i	i -ter linker Singulärvektor
v	Vektor der Verbesserungen für die Beobachtungen
v_i	i -ter rechter Singulärvektor
w	Vektor der Widersprüche
x	Vektor der Unbekannten
GH	Gauß-Helmert
GM	Gauß-Markov
GUI	Graphical User Interface -> graphische Oberfläche
LS	Least Squares
mixed TLS	Total Least Squares unter Berücksichtigung fehlerfreier Spalten
MPB	Moore-Penrose-Bjerhammar
N	Normalgleichungsmatrix
SVD	Singulärwertzerlegung
TLS	Total Least Squares
TLS-GH	Total-Least-Squares-Berechnung über Rückführung auf ein Gauß-Helmert-Modell
TLS-SVD	Total-Least-Squares-Berechnung über eine Singulärwertzerlegung
VKM	Varianz-Kovarianz-Matrix

Abbildungsverzeichnis

2.1	Least-Squares-Lösung unter der Annahme fehlerfreier a_i	7
2.2	Least-Squares-Lösung unter der Annahme fehlerfreier b_i	7
2.3	Orthogonale Regression aufgrund der Annahme fehlerhafter a_i und b_i -> TLS-Lösung	8
4.1	Geometrische Bedeutung der Householder-Transformation	20
6.1	Vergleich von LS und TLS aus der Sicht des Spaltenraumes	52
6.2	Vergleich von LS und TLS aus der Sicht des Zeilenraumes	53
6.3	Zusammenfassung der Spezialfälle	68
7.1	Modell und Ausgleichsprinzip des Beispiels	85
7.2	Geradenschätzung bei falschem Modell	92
7.3	Verfahrensschritte beim Gauß-Helmert-Ansatz	92
7.4	Topologische Darstellung des Netzes	95
7.5	Freie Stationierung	101
7.6	Parameter der ausgleichenden Kugel	104

Tabellenverzeichnis

1	Unterschiede im unverrauschten Fall	87
2	Unterschiede im verrauschten Fall	88
3	Unterschiede ohne Rauschen mit grobem Fehler	89
4	Unterschiede mit Rauschen und grobem Fehler	89
5	Ergebnisse TLS <-> GH	91
6	Ergebnisse des Standardbeispiels	91
7	Lösungen nach der ersten Iteration	93
8	Taylor- respektive Gleichungsrestglieder	93
9	Lösungen nach der zweiten Iteration	94
10	Ab-Matrix für Höhennetz, Variante A	97
11	Delta-Matrix für Höhennetz, Variante A	97
12	Ab-Matrix für Höhennetz, Variante B	98
13	Delta-Matrix für Höhennetz, Variante B	98
14	Delta-Matrix für Höhennetz, Variante C	99

15	Delta-Matrix für Höhennetz, Variante D	99
16	Delta-Matrix (korrektes Modell, Rauschen, keine groben Fehler) .	108
17	Delta-Matrix (korrektes Modell, Rauschen, grober Fehler im ersten Punkt)	109
18	Punkte, Verbesserungen und statistische Tests der Punkte	109
19	Kennzahlen der Simulationsreihe	110
20	Delta-Matrix (falsches Modell)	111
21	Delta-Matrix (richtiges Modell, sehr starker Rausch)	111

1 Vorwort

In der Geodäsie, insbesondere in der Ausgleichsrechnung, hat die Methode der kleinsten Quadrate (engl. Least Squares) eine lange und wohl begründete Tradition. Zahlreiche theoretische Untersuchungen und die überaus erfolgreiche Anwendung in der täglichen Praxis belegen die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes bei der Schätzung der unbekannt Parameter eines Modells. Selbstverständlich wird das Problem der Parameterschätzung aus mathematischer Sicht laufend weiterentwickelt. So existieren seit geraumer Zeit Erweiterungen des klassischen Ansatzes mit dem Ziel, verschiedenen Schwächen wirksam zu begegnen. Darüber hinaus entstehen völlig neue Konzepte, die zwar nach wie vor dasselbe Ziel (Schätzung der wahren, aber nicht beobachtbaren Parameter) verfolgen, sich aber in der Lösungsstrategie und damit in der praktischen Durchführung deutlich von der klassischen Methode abgrenzen.

Eines dieser neuen Verfahren ist die Total-Least-Squares-Methode. Die theoretischen Hintergründe sind schon seit längerem hinreichend beschrieben, vor allem was den grundlegenden Algorithmus betrifft. Jedoch bereitete die praktische Umsetzung anfangs Probleme, weil die durchzuführenden Berechnungen deutlich umfangreicher sind, als dies bei der Lösung über Normalgleichungen der Fall ist. Im Zeitalter der Computertechnik stellt dies jedoch kein Hindernis mehr dar, so dass nun die Eignung zur Lösung verschiedener Probleme im Unterschied zur bisherigen Vorgehensweise untersucht werden kann. Total Least Squares werden einige aus praktischer wie theoretischer Sicht interessante Eigenschaften zugeschrieben. So ist in einschlägiger Literatur häufig von einer Steigerung der Genauigkeit der Ergebnisse im Bereich von 10-15 Prozent im Vergleich zur Least-Squares-Technik die Rede [49]. Total Least Squares ist darüber hinaus auch in der Lage, Aussagen über die Qualität der Designmatrix und damit über die Modellbildung zu treffen [8, 49]. Auch die fehlende Notwendigkeit der Berechnung von Näherungslösungen für die Parameter ist gerade im Bereich der Formanalyse interessant, wo diese Näherungen meist nur in aufwändigen Vorverarbeitungsschritten ermittelt werden können [9].

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Anwendung der Total-Least-Squares-Methode bei Problemen, die für die Geodäsie typisch sind. Es wird untersucht, in welchem Maße und unter welchen Voraussetzungen die angesprochenen Genauigkeitssteigerungen realisierbar sind und welcher Nutzen sich aus der Qualitätsanalyse der Designmatrix im Hinblick auf die Angemessenheit der Modellbildung ziehen lässt. Dabei werden auch die statistischen Eigenschaften der Total-Least-Squares-Methode betrachtet, da dieser Bereich aus gutem Grund eine hohe Aufmerksamkeit innerhalb der Geodäsie erfährt.

Auch wenn die Grundlagen der Ausgleichung in knappen Worten erläutert werden, sollte der Leser bereits ein gewisses Maß an Erfahrung in diesem Bereich aufweisen. In Bezug auf mathematische Grundlagen wird davon ausgegangen,

dass die Lösung von überbestimmten Gleichungssystemen über Normalgleichungen bekannt ist. Alle weitergehenden Hilfsmittel, die vor allem bei der Herleitung der Total-Least-Squares-(TLS-)Methode nötig sind, werden in ausreichendem Umfang beschrieben, so dass der interessierte Geodät die einzelnen Schritte nachvollziehen kann.

Zunächst wird der Leser in einer Einleitung über vertraute Problemstellungen an die TLS-Thematik herangeführt. Ein weiteres Kapitel beantwortet die Frage nach bereits erfolgreichen Anwendungen der Total-Least-Squares-Methode in verschiedenen anderen Fachdisziplinen und stellt diese Anwendungen in kurzer, aber nachvollziehbarer Weise vor. Bevor im Detail auf die TLS-Theorie eingegangen werden kann, muss eine Darstellung verschiedener mathematischer und numerischer Sachverhalte erfolgen, deren Kenntnis durch den Leser nicht vorausgesetzt werden kann. Dabei werden genau die Theorien dargelegt, die für das Verständnis der Methode nötig sind. Nachdem diese Grundlagen geschaffen sind, kann zunächst der klassische Total-Least-Squares-Ansatz vorgestellt werden, der von der Existenz einer eindeutigen Lösung ausgeht und alle Spalten der Designmatrix als verbesserungswürdig betrachtet. Dann wird eine Erweiterung des klassischen Ansatzes erläutert, durch die man in der Lage ist, frei wählbare Spalten von der Verbesserung auszuklammern und zusätzlich mit Problemen umzugehen, die keine eindeutige oder keine Lösung besitzen. Anschließend wird die wichtige Frage der statistischen Eigenschaften der Total-Least-Squares-Methode geklärt, da in der geodätischen Praxis, wie bereits erwähnt, statistische und mathematische Modellbildung untrennbar verbunden sind. Im Anschluss an diese Analyse werden die wesentlichen Erkenntnisse aus der TLS-Theorie und aus den bisherigen Anwendungen anderer Fachgebiete subsummiert und Erfolg versprechende Ansätze für die geodätische Praxis identifiziert. Nach einem kurzen Abriss konventioneller Ausgleichungsmodelle sind beide Verfahren präsent, und die Verwendung von Total Least Squares in für den Fachbereich typischen Problemstellungen kann untersucht werden. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse aus den durchgeführten Berechnungen.

2 Einführung

Die Schätzung von Modellparametern ist fester Bestandteil zahlreicher Disziplinen der Wissenschaft wie Signalverarbeitung, Medizin, Biologie, Physik, Wirtschaftswissenschaften, Statistik und in besonderem Maße der Geodäsie.

Das Problem der Parameterschätzung entsteht durch die Notwendigkeit, die wahren Werte von wesentlichen Größen eines Modells bestimmen zu müssen, ohne sie direkt beobachten zu können. Man beobachtet deshalb andere Größen, die zwar nicht gesucht sind, die aber in einem direkten, praktischerweise linearen mathematischen Zusammenhang mit den gesuchten Kenngrößen stehen. Ist ein line-

rer Zusammenhang nicht gegeben, so kann mittels geeigneter Techniken (z. B. Taylor-Linearisierung) eine nichtlineare Beziehung in lineare Form gebracht werden, wobei dann grobe Informationen über die Werte der unbekannt Parameter vorliegen müssen, damit das linearisierte Modell im Bereich der Lösung ausreichend nahe an der nichtlinearen Modellierung liegt. Nun kann durch Algorithmen, die den numerischen Eigenschaften des Modells entsprechend gewählt werden müssen, aus den beobachteten Größen auf die Unbekannten geschlossen werden [8]. Liegen statistische Informationen über die Beobachtungen vor, so können zusätzlich Genauigkeitsaussagen über die errechneten Parameter getroffen werden. Fließen mehr Beobachtungen in die Berechnung ein, als zur Bestimmung der Parameter nötig wären, dann ist das Identifizieren von Ausreißern (Messfehlern) und eine Überprüfung der Genauigkeitsaussagen bezüglich der Beobachtungen möglich.

Während man in zahlreichen wissenschaftlichen Disziplinen überwiegend an Werten für die Unbekannten interessiert ist, wird in der Geodäsie ein ungleich höherer Aufwand im Umgang mit linearen Modellen betrieben. Üblicherweise werden hier wesentlich mehr Beobachtungen erhoben, als es die Zahl der Unbekannten erfordern würde. Dadurch ist eine Überprüfung des a priori eingeführten Genauigkeitsniveaus der Messelemente auf globaler Ebene möglich. Zudem lassen sich so grobe Fehler in den Messungen identifizieren, deren Eliminierung zur Schätzung der wahren Werte der Parameter unerlässlich ist. Über die Qualität der errechneten Parameter lassen sich bei einer ausreichenden Zahl an Überbestimmungen zuverlässige Aussagen treffen. In eingeschränktem Maße ist auch eine Kontrolle des Modells an sich möglich: Man kann das Modell insgesamt (mathematische und stochastische Annahme) durch einen einfachen Globaltest evaluieren. Liegt ein Verdacht auf Inkonsistenz auf der Ebene der Beobachtungen vor und lässt sich diese Annahme formulieren, so kann diese Alternative gegenüber der ursprünglichen Annahme auf statistische Weise getestet werden [52]. Hier wird bereits deutlich, dass man in der Geodäsie grundsätzlich neben der Schätzung des wahren Wertes der Parameter auch an zuverlässigen Genauigkeitsaussagen interessiert ist. Die alleinige Ermittlung der eigentlichen Lösungen, zum Beispiel der Koordinaten eines Netzes, Kennzahlen einer Kalibrierung, Transformationsparametern, Parametern einer Ersatzfläche etc. ist nicht ausreichend, da eine Beurteilung der Qualität dieser Kenngrößen ohne hinreichende statistische Informationen nicht möglich ist und daher die Frage nach einer geeigneten Weiterverwendung nicht beantwortet werden kann. Aus diesem Grund nimmt die Ausgleichsrechnung in der Geodäsie eine herausragende Rolle ein und wird sicherlich auf einem sehr hohen Niveau betrieben. Deshalb ist der Umgang mit Bedingungen zwischen Beobachtungen oder Unbekannten, mit singulären und mit großen Systemen weitreichend erforscht und die gemeinsame Verwendung von mathematischer und stochastischer Modellierung wird seit langer Zeit sehr erfolgreich in der Praxis angewendet.

Ein Problem stellt jedoch nach wie vor die Beurteilung der Adäquatheit des zu-

grunde gelegten mathematischen Zusammenhangs zwischen den Beobachtungen und den zu schätzenden Parametern dar. Dieser Zusammenhang ist nicht immer per se gegeben, sondern entsteht überwiegend durch die Abbildung eines Phänomens der Realwelt in eine überschau- und verarbeitbare Modellwelt. Typischerweise wird das Modell so gewählt, dass es für bestimmte Fragestellungen wesentliche Merkmale der Realwelt enthält, der besseren Handhabbarkeit wegen andere, irrelevante Eigenschaften des realen Phänomens aber nicht abbildet. Aus diesem Grund stellt ein Modell immer eine Vereinfachung der wirklichen Situation dar, was somit auch auf den mathematischen Zusammenhang der Modellgrößen zutrifft.

Eine zentrale Frage ist nun, ob der wesentliche Kern des realen Komplexes vollständig in ein Modell überführt wurde. Wenn nur unwesentliche Merkmale nicht abgebildet wurden, so ist keine signifikante Verfälschung bei der Schätzung von Werten für die gesuchten Merkmale zu erwarten. Anderenfalls wird die Tatsache, dass die nicht abgebildeten Merkmale sehr wohl die gemessenen Beobachtungen beeinflussen, zu einer deutlichen Verzerrung bei der Bestimmung der gesuchten Parameter beitragen. Ein passendes Beispiel ist die Bestimmung von Koordinaten von Lagepunkten durch die Messung von Richtungen und Strecken zwischen diesen Punkten mit unterschiedlichen Streckenmessgeräten. Aufgrund der Tatsache, dass jedes Streckenmessgerät bauartbedingt zum Zeitpunkt der Messung einen eigenen Maßstabsfaktor aufweisen wird, ist es angebracht, die Streckenbeobachtungen dem Instrumentarium entsprechend zu gruppieren und für jede Gruppe besagten Maßstab schätzen zu lassen. Unterbleibt dies und lag tatsächlich ein bedeutender Unterschied zwischen den Faktoren vor, so würde die einheitliche Modellierung einer globalen Streckengruppe zur Berechnung von verzerrten Koordinaten führen. In Falle bekannter Problemstellungen sind bei einem hinreichend erfahrenen Bearbeiter Modellierungsfehler dieser Art auszuschließen. Handelt es sich jedoch um neu zu formulierende Phänomene, so verbleibt immer eine gewisse Restunsicherheit bezüglich der Angemessenheit der Modellierung.

Eine weitere Fehlerquelle in diesem Zusammenhang stellt die falsche Klassifizierung des realen Phänomens und damit verbunden eine grundsätzlich falsche Modellbildung dar. Dieser Fehler kann durchaus auch Fachleuten unterlaufen. Ein Beispiel: Bei der Vermessung geometrischer Objekte wie einer Fassade werden Ersatzformen für Objekte gesucht, die in hinreichender Zahl durch diskrete Messpunkte repräsentiert werden. Die Entscheidung, welche Ersatzform adäquat ist, ist jedoch nicht immer trivial. So kann es leicht vorkommen, dass ein Fensterbogen eines älteren Bauwerkes durch einen Kreisbogen modelliert wird, obwohl es sich in Wirklichkeit um zwei Kreisbögen gleichen Radius, aber unterschiedlicher Lage des Mittelpunktes handelt. Oder eine Wand kann durch eine Ebene repräsentiert werden, obwohl sie leicht deformiert ist und demzufolge eine B-Spline-Fläche angemessen gewesen wäre.

Dieser Unsicherheit über die Modellierung kann durch die Lösung des Problems

über den Least-Squares-Ansatz nicht wirkungsvoll begegnet werden. Zwar liefert der bekannte Globaltest eine Aussage über das Zusammenspiel von Beobachtungen und Unbekannten im Kontext der mathematischen und stochastischen Annahmen. Seine Güte ist jedoch nicht sehr ausgeprägt, so dass er nur bei einem hohen Redundanzniveau aussagekräftig sein kann. Zudem kann er im Fall eines Fehlers keinen Hinweis auf dessen Quelle liefern. Auch die Überprüfung lokaler Modellfehler kann diese Unsicherheit nicht beseitigen, da diese möglichen Fehler vorab präzise formuliert werden müssen, bevor sie getestet werden können. Somit bleibt immer die Frage, ob Fehler vorhanden waren, die nicht modelliert und getestet wurden.

Die Ursache für diesen Sachverhalt liegt in der Philosophie der Least-Squares-Methode. Betrachtet man den mathematischen Zusammenhang zwischen den Unbekannten x und den Beobachtungen b , so lässt sich dieser in der Form

$$Ax \approx b \tag{2.1}$$

darstellen. Das Ungefährzeichen rührt daher, dass die Ermittlung der Beobachtungen nie exakt erfolgen kann, weshalb das inhomogene lineare Gleichungssystem keine Lösung hat. Um dennoch eine Lösung zu erhalten, muss das Gleichungssystem modifiziert werden. Im Least-Squares-Ansatz wird, ausgehend von dem Gedanken, dass die Beobachtungen mit Fehlern behaftet sind, der Vektor b modifiziert. Man erhält dann ein Gleichungssystem der Form

$$Ax = b + v \tag{2.2}$$

wobei b in die beiden zueinander senkrechten Komponenten v im Nullraum $\mathcal{N}(A^T)$ und Ax im Spaltenraum $\mathcal{S}(A)$ zerlegt wird. Die Matrix A hingegen, in der der mathematische Zusammenhang zwischen dem Beobachtungsvektor b und den Unbekannten x modelliert wurde, wird als fehlerfrei erachtet und erfährt dementsprechend keine Verbesserungen.

Soll die Designmatrix auch ein Kandidat für Verbesserungen sein, so wird in mathematischer Literatur die Total-Least-Squares-Methode vorgeschlagen [3, Seite 177].

Ein einfaches Beispiel soll den Unterschied zwischen Total Least Squares (TLS) und Least Squares (LS) illustrieren [49]. Es sei das Modell

$$\alpha x = \beta \tag{2.3}$$

gegeben. Es handelt sich dabei um die denkbar einfachste Variante der Parameterschätzung, weil nur ein Parameter geschätzt werden soll. Zur Ermittlung des gesuchten Wertes werden m Messungen der Variablen α und β durchgeführt

$$\begin{aligned} a_i &= a_i^0 + \Delta a_i \\ b_i &= b_i^0 + \Delta b_i \end{aligned} \quad i = 1, \dots, m \tag{2.4}$$

Die LS-Lösung geht nun davon aus, dass α fehlerfrei bestimmt wurde ($\Delta a_i = 0$, $i = 1, \dots, m$) und dass nur Fehler in den Messungen von β auftreten können. Folglich wird der Beobachtungsvektor b mit möglichst kleinem Aufwand in den Vektor $\hat{b} = b + v$ überführt, so dass das Gleichungssystem $A\hat{x} = \hat{b}$ lösbar ist und eine Schätzung \hat{x} für den Parameter x bestimmt werden kann. Unter minimalem Aufwand wird die minimale Summe der Quadrate der Verbesserungen verstanden, also

$$\sum_{i=1}^m v_i^2 = \sum_{i=1}^m (a_i \hat{x} - b_i)^2 \quad (2.5)$$

Die optimale Schätzung des gesuchten Parameters ergibt sich also durch

$$\hat{x} = \frac{\sum_{i=1}^m a_i b_i}{\sum_{i=1}^m a_i^2} \quad (2.6)$$

Liegt der Fall vor, dass β fehlerfrei gemessen werden konnte, hingegen die Bestimmung von α fehlerhaft ist, so führt die Umstellung des mathematischen Zusammenhangs zu

$$\frac{\beta}{x} = \alpha \quad \Leftrightarrow \quad \beta x^{-1} = \alpha \quad (2.7)$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich nun analog zu obiger Variante mittels LS lösen, wobei für die Schätzung des Parameters x

$$\hat{x} = \frac{\sum_{i=1}^m b_i^2}{\sum_{i=1}^m a_i b_i} \quad (2.8)$$

gilt.

Wenn sowohl α als auch β nicht fehlerfrei bestimmt werden konnten, also $\Delta a_i \neq 0$ und $\Delta b_i \neq 0$ gilt, dann würde ein alleiniges Verbessern des Beobachtungsvektors diesen Umständen nicht angemessen Rechnung tragen. In diesem Fall wird eine optimale Schätzung \hat{x} für den Parameter x ermittelt, indem eine ausgleichende Gerade gewählt wird, so dass die orthogonalen Abstände der Punkte (a_i, b_i) zur Geraden möglichst klein sind. Dies wird wiederum an der Summe der Quadrate der Abstände gemessen, also $\sum_{i=1}^m (b_i - a_i \hat{x}) / (1 + \hat{x}^2) \rightarrow \min$. Die Abbildungen 2.1, 2.2 und 2.3 stellen die verschiedenen Lösungen dar. Die ausgleichende Gerade ist gestrichelt gezeichnet, wobei jeweils die Summe der Quadrate der roten Elemente minimiert wurde.

Das Ergebnis der orthogonalen Regression ist nun genau *die* Lösung, die man erhält, wenn man die Total-Least-Squares-Methode auf das Problem der ausgleichenden Gerade anwendet ([18], [49], [3], [12]).

Obwohl der hier gezeigte univariate Fall von recht einfacher Natur ist und für die orthogonale Regression auch Lösungen auf der Basis von Least Squares in hinreichender Qualität existieren, so zeigt das Beispiel doch recht anschaulich

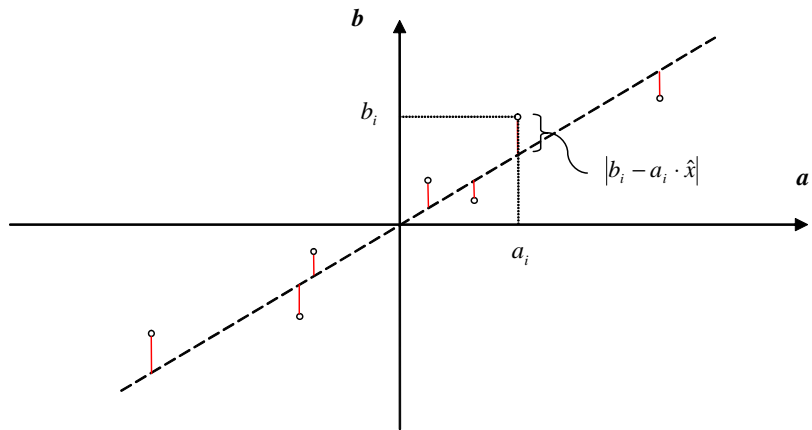


Abbildung 2.1: Least-Squares-Lösung unter der Annahme fehlerfreier a_i

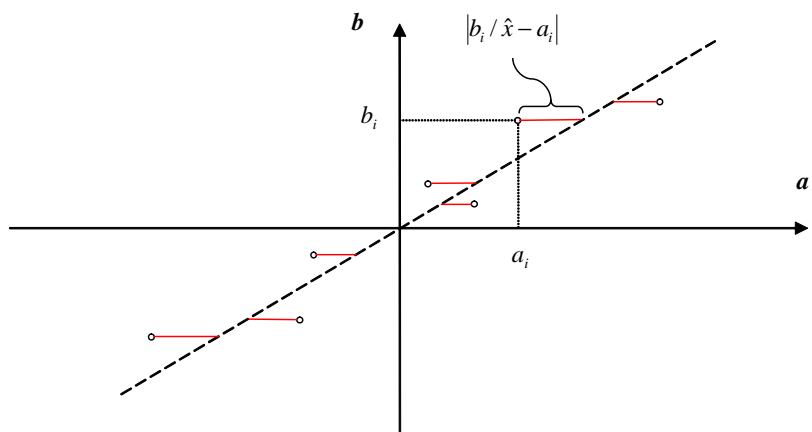


Abbildung 2.2: Least-Squares-Lösung unter der Annahme fehlerfreier b_i

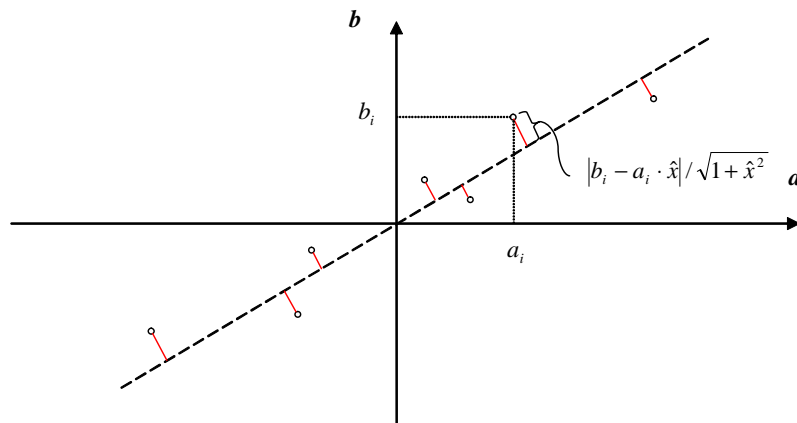


Abbildung 2.3: Orthogonale Regression aufgrund der Annahme fehlerhafter a_i und b_i -> TLS-Lösung

die unterschiedlichen Arbeitsweisen der beiden Ansätze. Während beim Least-Squares-Ansatz immer nur *ein* Vektor als fehlerbehaftet angesehen werden kann und dementsprechend verbessert wird, so betrachtet man im Falle der Total-Least-Squares-Methode das gesamte Gleichungssystem als verbesserungswürdig.

3 Erfolgreiche Anwendungen

Im medizinischen Bereich wurde TLS erfolgreich bei der Bestimmung des Rückhaltevermögens von Nieren angewendet [50]. Um die entsprechende Funktion zu bestimmen, wurde Patienten intravenös eine Indikatorsubstanz verabreicht, die von den Nieren wieder ausgeschieden wird. Anschließend wurde über einen bestimmten Zeitraum die Radioaktivität sowohl der Nieren als auch der entsprechenden Arterie gemessen. Das Problem der Bestimmung der Rückhaltefunktion wurde durch Dekonvolution gelöst. Traditionell kommt dabei das Gaußsche Eliminationsverfahren zum Einsatz, welches bekanntlich bei schlecht konditionierten Problemen sehr empfindlich auf kleine Störungen in den Daten reagiert. Deshalb musste bisher die resultierende Funktion immer nachbearbeitet werden, um eine der Erwartung entsprechende glatte Kurve zu erhalten. Wendet man nun statt des Eliminationsverfahrens die TLS-Methode an, so ist aufgrund des numerisch wesentlich stabileren Rechenweges keine Nachbearbeitung der Rückhaltefunktion nötig. TLS erzeugt dabei gerade bei genähert singulären Problemen eine deutlich verlässlichere Lösung und kann zudem mit tatsächlich singulären Problemen umgehen, wo das Eliminationsverfahren versagt.

Auch in der Signalverarbeitung bedient man sich der TLS-Technik. Bei Radar-

oder Sonarsystemen ist die Richtung des ankommenden Signals (Direction of Arrival) von Interesse. Roy und Kailath erstellten neben ihrer LS-Version des Programms ESPRIT eine Version, die auf TLS basierte. Es zeigte sich, dass bei schwierigen Verhältnissen, also wenn das Signal-Rausch-Verhältnis kritisch ist, die TLS-Lösung bessere Schätzungen der Parameter ermitteln kann als der LS-Ansatz [38].

Ein weiteres Beispiel kommt aus dem Bereich der Geologie. Bei der Analyse von metamorphen mineralischen Proben geht es häufig um das Bestimmen von Proben, die Gleichgewichtszustände repräsentieren. Dabei wird eine Matrix erstellt, die die Zusammensetzung repräsentiert. Aus der Analyse des Rangs, des Raums und des Nullraums der Matrix kann auf metamorphe Grade oder Variationen bei der Zerlegung größerer Mengen geschlossen werden. TLS erwies sich hier als stabiler und einfacher in der Handhabung als die Verwendung von nichtlinearen Least-Squares-Lösungen [13].

Auch in der Analyse von relativen Orientierungen von Bewegtbildanalysen wurde die TLS-Methode erfolgreich angewandt. Da es sich um ein der Geodäsie verwandtes Fachgebiet handelt, wird dieses Beispiel etwas detaillierter als die vorigen ausgeführt. Für gewöhnlich kommt bei der Bestimmung des gesuchten Zusammenhangs zweier Bilder der $8 + n$ -Punkte-Algorithmus zum Einsatz. Es seien

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ 1 \end{pmatrix}, v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

die homogenen Koordinaten eines Objektpunktes bezüglich der Bilder U und V . Sind u und v fehlerfrei bestimmt worden, so wird der Zusammenhang für beliebige Vektorenpaare durch die Gleichung

$$v^T F u = 0 \quad (3.2)$$

beschrieben. Die (3×3) -Matrix F , die auch Fundamentalmatrix genannt wird, enthält in Form der Matrixelemente die gesuchten Größen des Problems; die homogenen Koordinaten sind durch Messung gegeben. Da es sich um eine relative Orientierung zweier Objekte handelt, ist die Matrix F notwendigerweise singulär: der Rang der Matrix beträgt 2. Um die Matrixelemente $f_{i,j}$ von F zu berechnen, wird F zunächst vektorisiert.

$$F \rightarrow f = (f_{11}, f_{12}, f_{13}, f_{21}, f_{22}, f_{23}, f_{31}, f_{32}, f_{33})^T = (f_1, \dots, f_9)^T \quad (3.3)$$

Damit kann Gleichung (3.2) folgendermaßen formuliert werden:

$$a^T f = 0 \text{ mit } a^T = (v_1 u_1, v_1 u_2, v_1, v_2 u_1, v_2 u_2, v_2, u_1, u_2, 1)^T \quad (3.4)$$

Jedes Paar homogener Koordinaten ergibt eine Gleichung der Form (3.4), so dass n Objektpunktmessungen ein lineares Gleichungssystem der Form

$$A_0 f = 0 \quad (3.5)$$

erzeugen, in dem die a_i^T , $i = 1, \dots, n$ die Zeilenvektoren darstellen und unter A_0 die unverfälschte Matrix verstanden wird. Unter Ausschluss von Messfehlern hat die Matrix A_0 den Rang 8. Dementsprechend benötigt man mindestens 8 Paare homogener Koordinaten, um die Elemente der Matrix F zu bestimmen (f ergibt sich aus dem Nullraum von A). Da in der Realität Messfehler unvermeidbar sind, hat A effektiv den Rang 9. Also gibt es zunächst kein $f \neq 0$, das die Gleichung zu lösen vermag. Deshalb wird in einem ersten Schritt ein Einheitsvektor f gesucht, für den $A_0 f \approx 0$ gilt, was auf eine Minimierung von $|Af|^2$ unter der Zwangsbedingung $|f|^2 = f^T f = 1$ führt. Die Lösung ist der Eigenvektor zum kleinsten Eigenwert von $A^T A$. Erzeugt man aus dem Vektor f die gesuchte Matrix F , so ist diese in einem zweiten Schritt zu verändern, um den gewünschten Rang 2 zu erhalten. Dies wird typischerweise über eine dyadische Dekomposition gelöst, wobei die Komponente des kleinsten Singulärwertes eliminiert wird. Mühlich und Meister erörtern in [36, 37], dass es sich dabei im Wesentlichen um ein TLS-Problem handelt. TLS erweist sich bei angemessener Berücksichtigung stochastischer Vorinformationen als robuste und verlässliche Methode zur Bestimmung der relativen Orientierung zweier Bilder.

Weitere Anwendungen von TLS sind in der digitalen Bildauswertung bekannt. Um ein Bild in Kanten, Ecken und sonstige Bereiche zu unterteilen, bedient man sich des Grauwertstruktur-Tensors (GST). Der Grauwertstruktur-Tensor ist eine gewichtete Mittelung über die Ableitungstensoren in einer Umgebung des gerade betrachteten Punktes. Betrachtet man die Eigenwerte des GST, so kann man Auskunft darüber erhalten, ob der Punkt auf einer Kante, an einer Ecke oder in einem strukturlosen Bereich liegt. Man unterscheidet dabei folgende Fälle:

- Liegt der Fall einer (geraden) Kante vor, gibt es einen recht großen Eigenwert und einen, der nahe bei null liegt. Dies ist leicht einzusehen, da sich der Grauwert entlang einer Kante kaum ändert. In einer Richtung senkrecht zur Kante wird man jedoch einen starken Grauwertunterschied auf einem relativ kurzen Wegstück, also einen großen Gradienten ausmachen.
- Im Falle einer Ecke findet man einen großen Eigenwert und einen kleinen, aber deutlich von null verschiedenen Eigenwert vor.
- In strukturschwachen Bereichen kann kein ausgeprägter Gradient in einer speziellen Richtung gefunden werden; deshalb sind beide Eigenwerte klein.

Nagel und Middendorf stellen in [32] unterschiedliche Anpassungsregeln, Parametrisierungen und Konvergenzkriterien gegenüber und wenden sie zur Berechnung des GST in Bildern unterschiedlicher Kategorien an. Dabei wird auch ein alternativer Ansatz gewählt, der auf TLS basiert. Dieser Ansatz erzielt dabei nach Abgleich mit den bekannten Sollwerten sehr gute Ergebnisse.

Mota, Stuke und Barth entwickeln in [34] für den Bereich der Computer Vision und der Mustererkennung theoretische Grundlagen, um Mehrfachbewegungen zu detektieren. Mehrfachbewegungen können zum Beispiel in der medizinischen Bildverarbeitung auftreten, wenn verschiedene Gewebeschichten unterschiedliche Bewegungen aufweisen. Die Autoren verweisen auf den Gebrauch von TLS zur einfachen Lösung von Teilproblemen.

Spies und Garbe beschreiben in [46] die Ableitung von Parameterfeldern aus einer vorangegangenen TLS-Schätzung. TLS wird dabei zur Bestimmung des Subraums verwendet, in dem die Lösung liegen muss. Das Beispiel stammt aus dem Bereich „Optical Flow“. Die Autoren bringen jedoch zum Ausdruck, dass sich diese Technik generell für die Schätzung von Parameterfeldern eignet, die dynamische Prozesse beschreiben, welche sich durch lineare partielle Differentialgleichungen darstellen lassen.

Im Kontext der gleichzeitigen Schätzung von optical flow und Helligkeitsänderungen beschreibt [15] die Anwendung eines TLS-Ansatzes mit fehlerfreien Spalten, bekannt als mixed TLS. Der gemischte Ansatz empfiehlt sich hier, weil bei der gleichzeitigen Modellierung beider Teilbereiche eine Designmatrix entsteht, die sich in zwei Spaltenbereiche unterteilen lässt. Die den Parametern des optical flow zugeordneten Spalten sind fehlerbehaftet. Die Änderung der Helligkeit wird jedoch meist linear angesetzt, so dass die entsprechenden Koeffizienten in der Matrix konstant und damit fehlerfrei sind. Dieser Tatsache wird durch die Anwendung des gemischten TLS-Ansatzes Rechnung getragen, da es hier möglich ist, einzelne Spalten entsprechend der Modellannahme von der Berechnung von Verbesserungen auszuklammern. Durch Untersuchung anhand verschiedener Testfelder konnte nachgewiesen werden, dass der gemischte TLS-Ansatz signifikant bessere Parameter schätzt als der einfache TLS- oder LS-Ansatz.

Felus und Schaffrin verwenden in [12] einen TLS-Ansatz, um Semi-Variogramme zu berechnen, und vergleichen die Ergebnisse mit denen aus einem gewichteten LS-Ansatz. Anhand der angegebenen Beispiele zeigt sich, dass die TLS-Methode besonders im Bereich des Ursprungs bessere Werte für das Variogramm als der gewichtete LS-Ansatz bereitstellt. Die Autoren weisen darauf hin, dass das Problem der exakten Gewichtung der Abszissenwerte noch genauer untersucht werden muss.

Weitere Anwendungsbeispiele sind [1], [20], [22], [23], [31], [35].

4 Mathematische Grundlagen

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird das eine oder andere numerische Grundwissen vonnöten sein, um die Eigenschaften von TLS zu verstehen und korrekt beurteilen zu können.

In dem vorliegenden Kapitel werden deshalb einige für das Verständnis der Arbeit wichtige Sachverhalte hergeleitet und erläutert.

4.1 Normen von Vektoren und Matrizen

Die TLS-Methode verändert im Gegensatz zur Least-Squares-Methode eine ganze Matrix statt nur einen Vektor. In diesem Zusammenhang werden unter anderem bestimmte Normen von Vektoren und Matrizen benötigt, mit deren Hilfe Kriterien für die Minimierung der Verbesserungsanteile definiert werden müssen.

Der typische Leser dieser Arbeit wird lediglich mit der 2-Norm von Vektoren vertraut sein. Aus diesem Grund wird in diesem Kapitel der Begriff der Norm in knappen Ausführungen erläutert, und verschiedene Normen für Vektoren und Matrizen werden vorgestellt. Als weiterführende Literatur empfehlen sich insbesondere Björk [3], Hämmerlin und Hoffmann [21], Higham [24], Schwarz [45], Datta [6] oder [25], [47].

Satz 4.1 (Normen auf Vektorräumen). Es sei X ein Vektorraum über dem Raum \mathfrak{R} der reellen Zahlen. Dann versteht man unter einer Vektornorm eine Abbildung $\|\cdot\| : X \rightarrow \mathfrak{R}, x \rightarrow \|x\|$ für alle $x, y \in X$, die die Normbedingungen

$$\begin{aligned} \|x\| &> 0 \forall x \neq 0 \\ \|\alpha x\| &= |\alpha| \|x\| \forall \alpha \in \mathfrak{R} \\ \|x + y\| &\leq \|x\| + \|y\| \end{aligned} \quad (4.1)$$

erfüllt [5, Seite 60].

Die gebräuchlichsten Normen sind die Hölder-Normen, auch l_p -Normen genannt:

$$\begin{aligned} \|x\|_p &= (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, 1 \leq p \leq \infty \\ &= (\sum_{i=1}^n |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Die drei wichtigsten l_p -Normen sind die Fälle $p = 1, 2, \infty$.

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= |x_1| + \dots + |x_n| \\ \|x\|_2 &= (|x_1|^2 + \dots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x^T x} \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \end{aligned} \quad (4.3)$$

Die 1-Norm ergibt die Komponentenbetragssumme, die ∞ -Norm den Maximalbetrag der Komponenten des Vektors x . Die 2-Norm ist bekannt als die euklidische Länge des Vektors x [5, Seite 60]. Eine wichtige Eigenschaft der 2-Norm ist die Invarianz gegenüber orthogonalen Transformationen:

$$\|Qx\|_2^2 = x^T Q^T Q x = x^T x = \|x\|_2^2 \quad (4.4)$$

Vor allem bei der teilweisen QR-Zerlegung im Verlauf der TLS-Berechnung mit fehlerfreien Spalten spielt diese Eigenschaft eine zentrale Rolle.

Eine weitere wichtige Vektornorm ist die M-Norm von x

$$\|x\|_M = \sqrt{x^T M x} \quad (4.5)$$

mit symmetrischer, positiv definitiver Matrix M . Ist M nur positiv semidefinit, dann spricht man bei obiger Definition von einer Halbnorm, weil lediglich $\|x\| \geq 0 \forall x \in X$ gilt. [5, Seite 60].

Satz 4.2 (Norm einer Matrix). Unter einer Matrixnorm $\|A\|$ versteht man eine Funktion $\|\cdot\| : \mathfrak{R}^{m \times n} \rightarrow \mathfrak{R}$, die die drei Eigenschaften einer Vektornorm (siehe Satz 4.1) in analoger Weise erfüllt.

Eine Matrixnorm kann unter Zuhilfenahme einer beliebigen Vektornorm aus

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| \quad (4.6)$$

konstruiert werden. Wie bei den Vektornormen sind die Matrixnormen zu den Hölder-p-Normen besonders wichtig. Allerdings sind die Formeln für die entsprechenden Matrixnormen lediglich für die Fälle $p = 1, 2, \infty$ bekannt. Für alle anderen Fälle ist die Berechnung der zugehörigen Matrixnorm sehr schwierig [24]. Es gelten folgende Formeln:

$$\begin{aligned} \|A\|_1 &= \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{i,j}| \\ \|A\|_2 &= \zeta_1(A) \\ \|A\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{i,j}| \end{aligned} \quad (4.7)$$

Anders ausgedrückt ist die 1-Norm für Matrizen die maximale Spaltensumme der Matrix, die ∞ -Norm entspricht der maximalen Zeilensumme. Die 2-Norm ist gleich dem größten Singulärwert der Matrix; man nennt sie auch Spektralnorm einer Matrix [5, Seite 61].

Eine bedeutende Rolle für die TLS-Methode spielt die Frobenius-Norm [25]. Sie ist definiert durch

$$\begin{aligned} \|A\|_F &= \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{i,j}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{\text{spur}(A^T A)} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \zeta_i^2(A)} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Sie entsteht durch die Betrachtung einer Matrix als mn -dimensionalen Vektorraum und das entsprechende Anwenden der 2-Norm für Vektoren auf diesen gedachten Vektorraum. Die Frobenius-Norm ist die einzige bedeutende Norm, die aus diesem Gedankengang entstanden ist. Anwendungen anderer Normen, beispielsweise der 1-Norm oder der ∞ -Norm, haben keinen größeren Bekanntheitsgrad erlangt.

Wenn

$$\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|, \quad x \in \mathfrak{R}^n \quad (4.9)$$

dann heißt eine Matrixnorm verträglich mit der Vektornorm [5, Seite 61]. Das gilt für jede Matrixnorm und ihre zugrunde liegende Vektornorm. Außerdem ist die Frobenius-Norm kompatibel mit der 2-Norm von Vektoren [21]:

$$\begin{aligned} \|Ax\|_2^2 &= \sum_{i=1}^m \left| \sum_{j=1}^n a_{i,j}x_j \right|^2 \\ &\leq \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n |a_{i,j}|^2 \sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right) \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{i,j}|^2 \sum_{j=1}^n |x_j|^2 \\ &= \|A\|_F^2 \|x\|_2^2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Allerdings ist sie wegen $\|I\|_F = \sqrt{n} > \|I\|_2 = 1$ nicht nach Gleichung (4.6) aus der 2-Norm entstanden.

Wenn das Produkt AB definiert ist und

$$\|AB\| \leq \|A\|\|B\| \quad (4.11)$$

gilt, dann sagt man, die Matrixnorm sei multiplikativ [5, Seite 61]. Das trifft für alle nach Gleichung (4.6) aus einer Vektornorm entstandenen Normen und für die Frobenius-Norm zu.

Bezüglich der Frobenius-Norm und der 2-Norm von Matrizen gilt der folgende wichtige

Satz 4.3. Die Frobenius-Norm und die 2-Norm sind invariant gegenüber orthogonalen Transformationen mit den Matrizen P und Q [3, 21]. Es gilt

$$\|QAP^T\|_{F,2} = \|A\|_{F,2} \quad (4.12)$$

Bei speziellen Anwendungen der TLS-Methode muss die Gleichungsmatrix $[A; b]$ entsprechend äußeren Bedingungen durch Multiplikation mit orthogonalen Matrizen teilweise in die obere Dreiecksform gebracht werden. Ohne die Eigenschaften

von Satz 4.3 könnte dann aber die ursprüngliche Minimumsbedingung nicht eingehalten werden, wie später noch gezeigt wird.

Analog zu den Vektornormen gelten auch für die Matrixnormen bestimmte Relationen,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_\infty &\leq \|A\|_2 \leq \sqrt{m}\|A\|_\infty \\ \|A\|_2 &\leq \|A\|_F \leq \sqrt{n}\|A\|_2 \\ \frac{1}{\sqrt{m}}\|A\|_1 &\leq \|A\|_2 \leq \sqrt{n}\|A\|_1 \\ \|A\|_2 &\leq \sqrt{\|A\|_1\|A\|_\infty} \end{aligned}, \quad A \in \mathfrak{R}^{m \times n} \quad (4.13)$$

die in der numerischen Praxis häufig benötigt werden.

Beispiel: Die Berechnung der 2-Norm einer Matrix ist sehr aufwändig, weil letztlich der maximale Singulärwert bestimmt werden muss. Demgegenüber sind die 1-Norm und die ∞ -Norm einfach zu ermitteln. Ist nur eine obere Schranke für die 2-Norm einer Matrix gesucht, so kann diese statt über die explizite Berechnung leichter aus $\|A\|_2 \leq (\|A\|_1\|A\|_\infty)^{\frac{1}{2}}$ ermittelt werden (siehe z. B. [3]).

4.2 Kondition einer Matrix

Geht es um die Abschätzung des Fehlers in der Berechnung der Parameter x in dem linearen Gleichungssystem $Ax = b$ unter der Annahme gestörter Beobachtungen b , dann spielt die Kondition der Matrix A eine Rolle.

Definition 4.1. Die Konditionszahl κ der regulären $(n \times n)$ -Matrix A ist durch $\kappa(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$ definiert.

Stellt man die Störungen des Beobachtungsvektors b durch $b' = b + \Delta b$ dar, so ergibt sich für das Gleichungssystem der Zusammenhang

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b, \quad \Delta b \in \mathfrak{R}^n, \quad A \in \mathfrak{R}^{n \times n} \quad (4.14)$$

Dann gilt

$$\Delta x = A^{-1}\Delta b \quad (4.15)$$

Nach (4.9) folgt

$$\|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\|\|\Delta b\| \quad (4.16)$$

für beliebige Vektornormen nach (4.1) und dazu kompatible Matrixnormen. Da außerdem $\|b\| \leq \|A\|\|x\|$ abgeschätzt werden kann, erhält man schließlich für den relativen Fehler der Lösung

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A^{-1}\|\|A\| \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \quad (4.17)$$

Nach (4.17) ist leicht ersichtlich, dass Störungen auf der Beobachtungsseite um so mehr Einfluss auf die Berechnung der Parameter nehmen können, je größer $\|A^{-1}\|\|A\|$ ist. Deshalb heißt die Zahl $\kappa(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$ Kondition der Matrix A . Da die Konditionszahl von der verwendeten Norm abhängt [5, Seite 65], wird diese durch einen entsprechenden Index angezeigt, z. B.

$$\kappa_2(A) = \|A^{-1}\|_2 \|A\|_2 \quad (4.18)$$

Es bestehen folgende wichtige Zusammenhänge für verschiedene Konditionszahlen von Matrizen:

$$\begin{aligned} \kappa(A) &\geq 1 \\ \kappa(A^T A) &= (\kappa(A))^2 \\ \kappa(A) &= \kappa(A^T) \\ \kappa(AB) &\leq \kappa(A) \cdot \kappa(B) \\ \kappa(\alpha A) &= \kappa(A), \quad \alpha \neq 0 \in \mathfrak{R} \\ \kappa_2(Q) &= 1, \quad Q \text{ orthogonal} \\ \kappa_2(A) &= \frac{\zeta_{max}}{\zeta_{min}} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Ist nun die Matrix A gestört, so kann man ebenfalls eine sinnvolle Abschätzung für den relativen Fehler der Lösung angeben [21].

Satz 4.4. Es seien A und ΔA Matrizen aus $\mathfrak{R}^{n \times n}$ und x bzw. $(x + \Delta x)$ die Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ bzw. $(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b$ und $\kappa(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} < 1$. Dann gilt:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \quad (4.20)$$

Für weitergehende Studien dieses Themas empfehlen sich Hämmerlin und Hoffmann [21], Björk [3], Golub und van Loan [18] oder Higham [24].

4.3 QR-Zerlegungen

In der gängigen Literatur zu Matrizen existieren ganz unterschiedliche Zerlegungen von Matrizen. Von zentraler Bedeutung ist sicherlich die QR-Zerlegung. Das Ziel dieser Zerlegung ist, eine beliebige $(m \times n)$ -Matrix A in das Produkt $A = QR$ zu zerlegen. Dabei ist Q eine orthogonale $(m \times m)$ -Matrix und R eine obere Dreiecksmatrix der Dimension $(m \times n)$.

Diese Technik wird bei der Lösung linearer Gleichungssysteme gegenüber der Aufstellung von Normalgleichungen bevorzugt [3, 8, 11, 18, 21, 24, 30]. Im Allgemeinen sind überbestimmte Gleichungssysteme der Art $Ax = b$ nicht direkt

lösbar, da b in den seltensten Fällen im Spaltenraum von A liegt. Deshalb wird der Vektor b modifiziert, so dass das System lösbar wird. Da es unendlich viele Möglichkeiten gibt, dies zu tun, ist ein Kriterium für die „beste“ Möglichkeit notwendig. In den Natur- und Ingenieurwissenschaften zielt man darauf ab, die Funktion

$$\|b - Ax\|_2 \quad (4.21)$$

zu minimieren. Die angegebene Funktion ist die 2-Norm oder Wurzel der Summe der Quadrate der Verbesserungen. (In anderen Wissenschaften wie den Wirtschaftswissenschaften wird die 2-Norm gerne durch die 1-Norm $\|b - Ax\|_1 = \sum_{i=1}^m |(b - Ax)_i|$ ersetzt. Eine weitere bekannte Norm ist die ∞ -Norm $\|b - Ax\|_\infty = \max_{i \in \{1, \dots, m\}} |(b - Ax)_i|$, was zur Tschebyscheffschen Ausgleichsrechnung führt.) Eine bekannte und gut interpretierbare Lösung dieses Minimierungsproblems ist die Aufstellung der Normalgleichungen

$$A^T Ax = A^T b \quad (4.22)$$

Der Vektor x , der die Gleichung (4.22) erfüllt, löst das Minimierungsproblem (4.21). Geometrisch bedeutet dies, dass der Residuenvektor $b - Ax$ orthogonal zum Spaltenraum von A ist. Wenn die Kondition der Matrix $A^T A$ groß ist, können leichte Störungen in b jedoch relativ große Fehler in x verursachen. Bei der Berechnung von $A^T A$ und $A^T b$ sind zudem Rundungsfehler nicht zu vermeiden. Die Konditionszahl des Problems (4.22) ist bekanntlich $\kappa(A^T A) = \|A^T A\| \|(A^T A)^{-1}\|$ (vorausgesetzt A ist spaltenregulär). Allerdings kann man zeigen, dass diese Verhältnisse für das eigentliche Problem (4.21) nicht gelten. Vielmehr verstärken sich die relativen Datenfehler hier nur mit dem Faktor $\sqrt{\kappa(A^T A)}$ [11]. Man geht also auf ein im Allgemeinen wesentlich schlechter konditioniertes Problem über, indem man das ursprüngliche Problem (4.21) durch das System der Normalgleichungen (4.22) ersetzt. Deshalb sollte man die Anwendung der Normalgleichungen zur numerischen Lösung von (4.21) vermeiden und sich besser der QR-Zerlegung bedienen.

Durch Berechnung von QR-Zerlegungen kann das Minimierungsproblem bei allgemeinen Matrizen von vollem Rang direkt gelöst werden. Denn für $m \geq n$, $\text{Rang}(A) = n$ gilt

$$A = QR, \text{ mit } R = \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix}, R_0 \in \mathfrak{R}^{n \times n} \text{ regulär} \quad (4.23)$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2^2 &= \|QRx - QQ^Tb\|_2^2 \\
&= \|Q(Rx - Q^Tb)\|_2^2 \\
&= \|Rx - Q^Tb\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \|R_0x - f_1\|_2^2 + \|f_2\|_2^2
\end{aligned} \tag{4.24}$$

mit $f = Q^Tb = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$, $f_1 \in \mathfrak{R}^n$, $f_2 \in \mathfrak{R}^{m-n}$. Wählt man \hat{x} als Lösung des Gleichungssystems $R_0x = f_1$, dann wird die 2-Norm der Residuen minimal, denn es gilt

$$\|A\hat{x} - b\|_2 = \|f_2\|_2 \tag{4.25}$$

Da R_0 in oberer Dreiecksform vorliegt, gelangt man durch Rückwärtseinsetzen sehr einfach zur Lösung.

Die Berechnung der Parameter des Gleichungssystems $Ax = b$ wird damit in die Schritte $Q^Tb = f$ und $Rx = f$ zerlegt.

Der Vorteil des Verfahrens liegt in der Tatsache, dass keine Verschlechterung der Kondition durch den Übergang zum Rechtsdreieckssystem auftritt; die Vorgehensweise ist also numerisch stabiler als das Aufstellen der Normalgleichungen. Man betrachte hierzu den Fall $m = n$. Hat A vollen Rang, dann gilt

$$\begin{aligned}
\|A\| &= \|QR\| \\
&= \max_{x \neq 0} \frac{\|QRx\|}{\|x\|} \\
&= \max_{x \neq 0} \frac{\|Rx\|}{\|x\|} \\
&= \|R\|
\end{aligned} \tag{4.26}$$

und entsprechend für A^{-1} . Also ist $\kappa(A) = \kappa(R)$, d.h. die Quadrierung der Kondition findet nicht statt.

4.4 Berechnung von QR-Zerlegungen

Bei der Berechnung der QR-Zerlegung von A bestimmt man eine endliche Folge orthogonaler Matrizen S_1, S_2, \dots, S_n und multipliziert A schrittweise mit diesen Matrizen

$$\begin{aligned}
A \xrightarrow{S_1} A_1 = S_1A, \quad A_1 \xrightarrow{S_2} A_2 = S_2A_1, \quad \dots, \quad A_{n-1} \xrightarrow{S_n} A_n = S_nA_{n-1} \\
\text{so dass } A_n = \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad R_0 \text{ in oberer Dreiecksform}
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Also gilt

$$A = (S_n \dots S_1)^T A_n = S_1^T \dots S_n^T A_n = Q \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Da die Matrizen S_1 bis S_n orthogonal sind, ist die Matrix Q als Produkt dieser Matrizen ebenfalls orthogonal.

Zur Berechnung dieser Matrizen verwendet man Verfahren, die auf Orthogonaltransformationen basieren, also Givens-, Fast-Givens- und Householder-Transformationen. (Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass man auch nach Gram-Schmidt eine QR-Zerlegung berechnen kann. Allerdings lässt sich hier die Matrix Q nicht in faktorisierte Form darstellen, weshalb sie für das Verständnis der vorliegenden Arbeit keine Rolle spielt.)

Die Givens-Transformation basiert auf einer Folge von Rotationen, wobei jeweils ein Element der Matrix durch eine Drehung auf den Wert 0 gebracht wird. Weist die Matrix A viele Nulleinträge auf, so ist die QR-Zerlegung mit Hilfe von Givens-Transformationen rechentechnisch günstig. Bei beliebig besetzten Matrizen ist jedoch die Verwendung von Householder-Transformationen angebracht, weil hier der Aufwand in etwa die Hälfte der Givens-Lösung beträgt.

Deshalb wird hier nur die Erstellung der Zerlegung von A über das Householder-Verfahren beschrieben.

Satz 4.5. Mit einem Vektor $v \in \mathfrak{R}^m$, $v \neq 0$ ist die Matrix

$$S := I - 2 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} \in \mathfrak{R}^{m \times m} \quad (4.29)$$

symmetrisch ($S^T = S$), orthogonal ($S^T S = I$) und involutorisch ($S^2 = I$).

Das Produkt $vv^T \in \mathfrak{R}^{m \times m}$ ist das dyadische Produkt des Vektors v , nicht zu verwechseln mit dem skalaren Produkt $v^T v = \|v\|_2^2$.

Beweis.

$$\begin{aligned} S^T &= \left(I - 2 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} \right)^T \\ &= I - 2 \frac{(vv^T)^T}{\|v\|_2^2} \\ &= I - 2 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} \\ &= S \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned}
S^T S &= S^2 = I - 4 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} + 4 \frac{(vv^T)(vv^T)}{\|v\|_2^4} \\
&= I - 4 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} + 4 \frac{v(v^T v)v^T}{\|v\|_2^4} \\
&= I - 4 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} + 4 \frac{vv^T}{\|v\|_2^2} \\
&= I
\end{aligned} \tag{4.31}$$

□

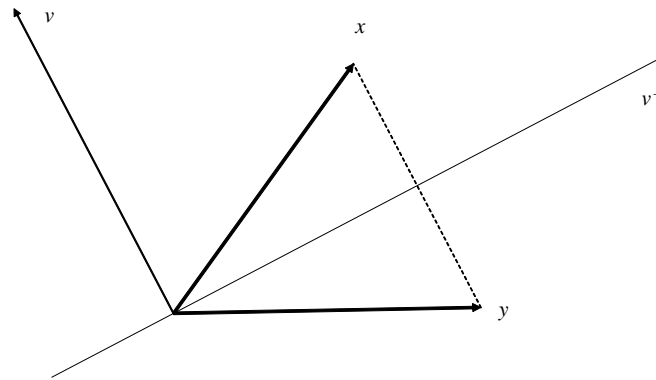


Abbildung 4.1: Geometrische Bedeutung der Householder-Transformation

Im ersten Schritt der QR-Zerlegung bestimmt man einen Spiegelungsvektor v so, dass ein vorgegebener Vektor x (die erste Spalte der Designmatrix) auf die $e^{(1)}$ -Achse gespiegelt wird.

Satz 4.6. Die Multiplikation von S mit einem beliebigen Vektor $x \neq 0$ bewirkt eine Spiegelung von x an v^\perp (siehe Abbildung 4.1). Insbesondere erhält man $Sx = \alpha e^{(1)}$ für $v = x - \alpha e^{(1)}$.

Beweis. Es seien $x \in \mathbb{R}^n$, $v = x - \alpha e^{(1)}$, $\alpha = \|x\|_2$ und x_1 die erste Komponente des Vektors x . Dann gilt

$$\begin{aligned}
\|v\|_2^2 &= 2\alpha^2 - 2\alpha(e^{(1)T} x) \\
&= 2\alpha(\alpha - x_1)
\end{aligned} \tag{4.32}$$

$$\begin{aligned}
(x^T v) &= \alpha^2 - \alpha x_1 \\
&= \alpha(\alpha - x_1)
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
Sx &= x - 2 \frac{(vv^T)x}{\|v\|_2^2} \\
&= x - 2 \frac{(x^T v)}{\|v\|_2^2} v \\
&= x - 2 \frac{\alpha(\alpha - x_1)}{2\alpha(\alpha - x_1)} (x - \alpha e^{(1)}) \\
&= \alpha e^{(1)}
\end{aligned} \tag{4.34}$$

□

Zu beachten ist, dass die erste Komponente von v durch die Differenz $x_1 - \alpha$ gebildet wird. Um eine Auslöschung auszuschließen, wählt man das Vorzeichen von α so, dass immer eine Addition der Beträge stattfindet: $\alpha = -\text{sign}(x_1)\|x\|_2$. Die Berechnung von Q und damit R gestaltet sich nun in einfacher Weise. Es seien a_k , $k = 1, \dots, n$ die Spalten der Matrix $A \in \mathfrak{R}^{m \times n}$. Dann wird im ersten Schritt

$$S_1 = I - 2 \frac{v_1 v_1^T}{\|v_1\|_2^2}, \quad v_1 := a_1 - \alpha_1 e^{(1)} \tag{4.35}$$

gewählt, so dass $S_1 a_1 = \alpha_1 e^{(1)}$. Zur Vermeidung einer Auslöschung wählt man wie bereits erläutert das Vorzeichen von α_1 entsprechend dem Vorzeichen von $a_{1,1}$. Man erhält

$$S_1 A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \star \\ (0) & A^{(2)} \end{pmatrix}, \quad A^{(2)} \in \mathfrak{R}^{(m-1) \times (n-1)} \tag{4.36}$$

Damit ist die erste Spalte bereits in der gewünschten Form. Analog wählt man im i -ten Schritt

$$S_i = \begin{pmatrix} I & (0) \\ (0) & I - 2 \frac{v_i v_i^T}{\|v_i\|_2^2} \end{pmatrix} \tag{4.37}$$

wobei sich v_i aus $A^{(i)}$ ergibt.

Durch sukzessive Anwendung dieser n Schritte erhält man schließlich

$$\begin{aligned}
R &= A^{(n)} = S_n \dots S_1 A = Q^T A, \quad m > n \\
R &= \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ (0) & & r_{nn} \\ & (0) & \end{pmatrix}, \quad R \in \mathfrak{R}^{m \times n}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Wichtig für den weiteren Verlauf der Arbeit ist, dass man die QR-Zerlegung auch unvollständig ausführen kann. Soll die TLS-Methode mit der Option fehlerfreier

Spalten angewendet werden, so ist es in einem Zwischenschritt nötig, eine vollbesetzte $(m \times n)$ -Matrix D (die Matrix wird später genauer spezifiziert) in eine Form zu transformieren, in der lediglich die ersten $k \leq n$ Spalten in eine obere Dreiecksform gebracht werden, die restlichen $n - k$ Spalten jedoch voll besetzt bleiben. Dazu multipliziert man D lediglich mit den ersten k Householdermatrizen

$$D' = S_k \dots S_1 D = Q_k^T D \quad (4.39)$$

und erhält D' in der gewünschten Form. Die Vorgehensweise bedarf keines Beweises, sie ergibt sich aus den vorangegangenen Ausführungen zur Theorie der Householdermatrizen und zur Berechnung der QR-Zerlegung.

An dieser Stelle wird nicht weiter auf die Technik der Orthogonalzerlegungen eingegangen. Wesentlich tiefer gehende Informationen bieten die Quellen „Numerical Methods for Least Squares Problems“ von Björk [3], „Matrix Computations“ von Golub und van Loan [18] oder „Accuracy and Stability of Numerical Algorithms“ von Higham [24].

4.5 Singulärwertzerlegung

Die Singulärwertzerlegung ist für das theoretische Verständnis und die praktische Durchführung einer TLS-Berechnung sehr wichtig.

Satz 4.7. Gegeben sei eine Matrix $C \in \mathfrak{R}^{m \times n}$. Dann existieren die orthogonalen Matrizen $U \in \mathfrak{R}^{m \times m}$ und $V \in \mathfrak{R}^{n \times n}$, so dass

$$U^T C V = S = \text{diag}(\zeta_1, \dots, \zeta_p) \in \mathfrak{R}^{m \times n}, \quad \zeta_1 \geq \dots \geq \zeta_p \geq 0 \quad (4.40)$$

wobei $p = \min\{m, n\}$

[5, Seite 45]

Bemerkung. Von praktischer Relevanz für die Ausgleichsrechnung ist der Fall $m > n$, weshalb ab hier von $p = n$ ausgegangen wird.

Die ζ_i werden als Singulärwerte von C bezeichnet, die Menge der Singulärwerte von ζ_1 bis ζ_n bilden das Singulärwert-Spektrum der Matrix C . Den Vektor u_i (i -te Spalte von U) nennt man den i -ten linken Singulärvektor, entsprechend ist v_i (i -te Spalte von V) der i -te rechte Singulärvektor. Aus

$$\begin{aligned} C^T C &= V S^T S V^T \Rightarrow C^T C V = V S^T S = \text{diag}(\zeta_1^2, \dots, \zeta_n^2) V \\ C C^T &= U S S^T U^T \Rightarrow C C^T U = U S S^T = \text{diag}(\zeta_1^2, \dots, \zeta_n^2, 0, \dots, 0) U \end{aligned} \quad (4.41)$$

folgt, dass die Vektoren u_i Eigenvektoren von $C C^T$ und die Vektoren v_i Eigenvektoren von $C^T C$ sind. Die passenden Eigenwerte ergeben sich einfach aus den Quadraten der Singulärwerte von C .

Das Tripel (u_i, ζ_i, v_i) nennt man das singuläre Tripel.

Aus Gleichung (4.40) lässt sich leicht

$$\begin{aligned} C v_i &= \zeta_i u_i \\ C^T u_i &= \zeta_i v_i \end{aligned} \tag{4.42}$$

herleiten.

Ist $\text{Rang}(C) = r \leq n$, dann gilt

$$\begin{aligned} \zeta_1 &\geq \dots \geq \zeta_r > \zeta_{r+1} = \dots = 0 \\ \mathcal{S}(C) &= \mathcal{S}([u_1, \dots, u_r]) \\ \mathcal{N}(C) &= \mathcal{S}([v_{r+1}, \dots, v_n]) \\ \mathcal{S}(C^T) &= \mathcal{S}([v_1, \dots, v_r]) \\ \mathcal{N}(C^T) &= \mathcal{S}([u_{r+1}, \dots, u_m]) \end{aligned} \tag{4.43}$$

Außerdem kann man die Matrix C mit Hilfe der Singulärwertzerlegung durch eine Summe von Matrizen vom Rang 1 darstellen:

$$\begin{aligned} C &= U_r S_r V_r^T = \sum_{i=1}^r \zeta_i u_i v_i^T \\ & (= USV^T = \sum_{i=1}^n \zeta_i u_i v_i^T) \end{aligned} \tag{4.44}$$

Des Weiteren ergibt sich aus der SVD für die 2-Norm und die Frobenius-Norm

$$\begin{aligned} \|C\|_F^2 &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{i,j}^2 = \zeta_1^2 + \dots + \zeta_n^2 \\ \|C\|_2 &= \max_{y \neq 0} \frac{\|Cy\|_2}{\|y\|_2} = \zeta_1 \end{aligned} \tag{4.45}$$

Bemerkung. Wie bereits erwähnt wird $m > n$ vorausgesetzt!

Die Singulärwerte einer Matrix sind immer eindeutig. Die zugehörigen Singulärvektoren v_j , $j \leq r$ sind nur dann eindeutig, wenn ein ζ_j^2 einfacher Eigenwert von $C^T C$ ist. Wenn die v_j , $j \leq r$ festgelegt wurden, dann sind über Gleichung (4.42) die Vektoren u_j , $j \leq r$ ebenfalls eindeutig festgelegt.

Die Singulärwertzerlegung legt die wesentlichen Strukturen einer Matrix offen und ist beim Umgang mit Matrizen ausgesprochen hilfreich. Der Nachteil der Singulärwertzerlegung ist der relativ hohe Rechenbedarf gegenüber anderen Orthogonalzerlegungen wie zum Beispiel der QR-Zerlegung.

Aufgrund der Aussagen aus Gleichung (4.42) liegt es nahe, zur Berechnung der Singulärwertzerlegung von C zuerst eine Eigenwertzerlegung von $C^T C$ auszuführen und dann die Singulärwerte und Singulärvektoren aus den Ergebnissen der Eigenwertzerlegung abzuleiten. Dies ist jedoch aus numerischen Gründen nicht empfehlenswert, wie folgendes Beispiel aus [3] zeigt.

Beispiel 1. Es seien $a_1, a_2 \in \mathfrak{R}^m$ die Spalten einer Matrix $A = (a_1, a_2)$. Außerdem sei $\|a_1\|_2 = \|a_2\|_2 = 1$, und beide Vektoren seien nicht kollinear. Für den Winkel γ zwischen beiden Vektoren gilt bekanntlich

$$a_1^T a_2 = \cos(\gamma) \quad (4.46)$$

γ sei hier positiv. Die Eigenwertzerlegung ergibt

$$\begin{aligned} A^T A &= \begin{pmatrix} 1 & \cos(\gamma) \\ \cos(\gamma) & 1 \end{pmatrix} \\ \lambda_1 &= 2\cos^2\left(\frac{\gamma}{2}\right), \quad \lambda_2 = 2\sin^2\left(\frac{\gamma}{2}\right) \\ v_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Die Singulärwerte erhält man durch die Wurzel der Eigenwerte, die Singulärvektoren u_1 und u_2 können schließlich nach Gleichung (4.40) bestimmt werden.

Nun sei der Winkel γ kleiner als die Wurzel der Rechengenauigkeit. Dann folgt aus $\cos(\gamma) \approx 1 - \frac{\gamma^2}{2}$, dass die Werte für $\cos(\gamma)$ in $C^T C$ gleich 1 sind. Für $A^T A$ würden die Eigenwerte 2 und 0 berechnet, so dass der kleinere Singulärwert $\frac{\gamma}{\sqrt{2}}$ nicht ermittelt wird, obwohl er selbst größer als die Rechengenauigkeit ist.

Bezüglich der Singulärwerte gilt folgender wichtige

Satz 4.8. Es sei C eine $(m \times n)$ -Matrix mit den Singulärwerten $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_n$ und D eine $(p \times q)$ -Submatrix von C mit den Singulärwerten $\delta_1 \geq \dots \geq \delta_q$ und $m > n$ bzw. $p > q$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \gamma_i &\geq \delta_i, & 1 \leq i \leq q \\ \delta_i &\geq \gamma_{i+(m-p)+(n-q)}, & 1 \leq i \leq p + q - m \end{aligned} \quad (4.48)$$

(siehe [48]). Daraus lässt sich folgender, für TLS wichtige Spezialfall ableiten:

Satz 4.9. Es sei C eine $(m \times n)$ -Matrix mit den Singulärwerten $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_n$ und D eine $(m \times (n-1))$ -Matrix mit den Singulärwerten $\delta_1 \geq \dots \geq \delta_{n-1}$, die aus C durch das Streichen einer Spalte entstanden ist. Dann gilt für die Singulärwerte von C und D [3, Seite 178]

$$\gamma_1 \geq \delta_1 \geq \gamma_2 \geq \delta_2 \geq \dots \geq \delta_{n-1} \geq \gamma_n \geq 0, \quad m > n \quad (4.49)$$

4.6 Gezielte Reduzierung des Ranges einer Matrix

Die Singulärwertzerlegung ist sehr interessant, wenn es darum geht, eine Matrix durch eine andere Matrix mit kleinerem Rang möglichst gut anzunähern. Wie später noch gezeigt wird, ist das ein zentraler Gedanke der TLS-Methode.

Satz 4.10 (Eckart-Young-Mirsky Theorem). Gegeben sei eine beliebige Matrix $C \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ und ihre Singulärwertzerlegung durch $C = \sum_{i=1}^r \zeta_i u_i v_i^T$, $r = \text{Rang}(C)$. Außerdem sei C_k definiert durch $C_k = \sum_{i=1}^k \zeta_i u_i v_i^T$, $k < r$. Dann gilt:

$$\min_{\text{Rang}(D)=k} \|C - D\|_2 = \|C - C_k\|_2 = \zeta_{k+1} \quad (4.50)$$

und

$$\min_{\text{Rang}(D)=k} \|C - D\|_F = \|C - C_k\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^n \zeta_i^2}, \quad m > n \quad (4.51)$$

(siehe [16],[37]). Gleichungen (4.50) und (4.51) besagen mit anderen Worten, dass eine optimale Reduzierung des Ranges von C von r auf k mit minimalem Aufwand vorgenommen werden kann, indem man aus der dyadischen Dekomposition die singulären Tripel für $i = k + 1, \dots, r$ entfernt. Das entspricht der Vorgehensweise, die Singulärwerte ζ_i ab dem Index $k + 1$ auf null zu setzen.

Aus Gleichung (4.50) kann man erkennen, dass der Unterschied zwischen den beiden Matrizen C und D dem Singulärwert ζ_{k+1} von C entspricht, wenn man die 2-Norm zugrunde legt. Verwendet man die Frobenius-Norm als Maß für den Unterschied beider Matrizen, so ist die Differenz zwischen originaler und reduzierter Matrix nach (4.51) gleich der Wurzel der Quadratsumme der Singulärwerte ζ_i , $i = k + 1, \dots, r$.

Existiert bereits eine Singulärwertzerlegung einer Matrix A , so kann man durch Anwendung dieses Satzes den Rang der Matrix unter der Randbedingung des minimalen Aufwands sehr einfach verringern. Zudem kann sofort ein Maß für diesen Aufwand angegeben werden.

Das Theorem wurde ursprünglich von Eckart und Young in [10] für die Frobenius-Norm bewiesen. Mirsky entwickelte in [33] die Aussagen bezüglich der 2-Norm.

5 Konventionelle Modelle in der Geodäsie

Im Zuge dieser Arbeit soll anhand von verschiedenen Beispielen ein Vergleich der TLS-Technik mit konventionellen Ausgleichungsansätzen erfolgen, wie sie in der Geodäsie üblich sind. Um die Gemeinsamkeiten und Unterschiede beurteilen zu können, wird in dem vorliegenden Kapitel auf die Modellierung und die mathematischen Hintergründe dieser Ansätze eingegangen. Die folgenden Ausführungen

werden wesentlich straffer ausfallen als die zur Vorstellung der TLS-Technik. Um dem Leser die Lektüre zu erleichtern, wird sich die Notation hier an die in der Geodäsie verbreiteten Darstellungsweisen halten, die sich von der in der Mathematik üblichen Schreibweise unterscheidet.

Als gängige Ausgleichungsansätze sind vor allem zu nennen:

- Gauß-Markov-Modell ohne/mit Restriktionen
- Gauß-Helmert-Modell ohne/mit Restriktionen
- Bedingtes Modell
- Kollokation

Das Gauß-Markov-Modell ist ein relativ einfaches Modell, das bei Problemstellungen angewendet wird, in deren mathematischer Formulierung Beobachtungen und Unbekannte bereits in getrennten Summanden vorliegen. Es ist trotz dieser Einschränkung sehr weit verbreitet.

Das Gauß-Helmert-Modell ist geeignet, wenn bei der Formulierung der mathematischen Zusammenhänge Beobachtungen und Unbekannte nicht generell in getrennten Summanden vorliegen. Es ist eine Obermenge des Gauß-Markov-Modells.

Das bedingte Modell ist eine mathematisch äquivalente Darstellung des Gauß-Markov-Modells. Es ermöglicht relativ kompakte Formulierungen des zu betrachtenden Problems, weil man hier im Gegensatz zum Gauß-Markov-Modell nicht von dem Zusammenhang der Beobachtungen mit den Unbekannten, sondern von den Widersprüchen der Beobachtungen untereinander ausgeht. Problematisch ist allerdings, dass bei der mathematischen Formulierung streng darauf geachtet werden muss, dass kein Widerspruch übersehen wird und dass die erkannten Widersprüche nicht voneinander abhängig sind. Dadurch ist das bedingte Modell zur Automatisierung wesentlich schlechter geeignet als das gleichbedeutende Gauß-Markov-Modell und spielt in der Praxis eine untergeordnete Rolle. Aus diesem Grund wird auf das bedingte Modell in den folgenden Ausführungen der Arbeit nicht weiter eingegangen.

Das Modell der Kollokation ermöglicht neben der Ausgleichung der eingeführten Beobachtungen auch eine Prädiktion für hypothetische Beobachtungen und eine Filterung des Beobachtungsmaterials. Sie bietet damit mehr Möglichkeiten als das Gauß-Helmert-Modell. Allerdings erreicht sie in der Praxis nicht dessen Bekanntheitsgrad, weil eine Prädiktion und Filterung in unmittelbarem Zusammenhang mit der eigentlichen Ausgleichung bei vielen Problemen nicht gefordert wird. Wenn eine Prädiktion erforderlich ist, geht man oft zweistufig vor: Zunächst wird eine Ausgleichung unter Zuhilfenahme eines Gauß-Markov- oder eines Gauß-Helmert-Modells durchgeführt, und die berechneten Ergebnisse werden mit ihren

Kovarianzmatrizen gespeichert. Man kann dann anschließend auf Grundlage der Ausgleichungsergebnisse eine Prädiktion durchführen. Der Vorteil dieses Verfahrens ist der, dass man sich zum Zeitpunkt der Ausgleichung noch nicht auf die vorherzusagenden Werte festlegen muss, sondern diese bei Bedarf jederzeit neu bestimmen kann. Weil es sich eher um ein Randgebiet handelt, wird auf die Kollimation nicht weiter eingegangen.

Allen oben aufgezählten Ausgleichungsansätzen ist gemein, dass die zu minimierende Zielfunktion eine allgemeine Vektornorm ist (siehe Gleichung (4.1)). Es liegt also generell der Least-Squares-Ansatz zugrunde. Dies steht im Gegensatz zum TLS-Ansatz, bei dem keine Vektornorm, sondern eine Matrixnorm (genauer: die Frobenius-Norm der Verbesserungsmatrix) minimiert wird.

Es folgt nun eine kurze Zusammenfassung der wesentlichen Merkmale des Gauß-Markov- und des Gauß-Helmert-Modells.

5.1 Gauß-Markov-Modell

5.1.1 Standardmodell

Die Klasse der Gauß-Markov-Modelle ist eine Untermenge der Gauß-Helmert-Modelle. Der mathematische Ansatz genügt der Form

$$l + v = A\hat{x} \quad (5.1)$$

$$C_l = \sigma_0^2 Q_l = \sigma_0^2 P^{-1} \quad (5.2)$$

Der Vektor der Unbekannten x umfasst die Parameter des Problems. Unter l subsummiert man die Menge der Beobachtungen. Der Vektor v beschreibt die Modifikationen, die anzubringen sind, um das Gleichungssystem konsistent zu machen. Die Designmatrix A stellt den Zusammenhang zwischen Unbekannten und Beobachtungen dar. Die Matrix C_l enthält die Varianzen und Kovarianzen der Beobachtungen (siehe [5, Seite 199 ff.]).

Gleichung (5.1) stellt den linearisierten Zusammenhang zwischen Beobachtungen und Unbekannten dar und wird deshalb als mathematisches Modell bezeichnet. Gleichung (5.2) gibt Aufschluss über die statistischen Eigenschaften der Beobachtungen; man spricht demnach vom stochastischen Modell.

Die Forderung nach minimaler gewichteter Quadratsumme der Verbesserungen $\mathcal{F} = v^T P v \rightarrow \min$ (siehe [4, Seite 389]) führt zu dem linearen Gleichungssystem $N\hat{x} = n$, wobei die einzelnen Matrizen die Gestalt

$$(A^T P A)\hat{x} = (A^T P l) \quad (5.3)$$

annehmen. Man bezeichnet dies auch als System der Normalgleichungen. Sofern die Matrix N regulär ist, erhält man die Unbekannten \hat{x} nach einer Inversion von N . Die Inverse von N ist gleichzeitig auch die Kofaktor-Matrix der Unbekannten $Q_{\hat{x}} = N^{-1}$.

Der Grad der Überbestimmung des Gleichungssystems, die Redundanz r , ergibt sich aus der Differenz der Anzahl der Beobachtungen m und der Anzahl der Unbekannten n .

5.1.2 Modellbildung mit Restriktionen

Möchte man, dass die aus der Ausgleichung resultierenden Schätzwerte bestimmten Zwängen unterliegen (um ein ohne die Zwangsbedingungen singuläres Problem zu regularisieren oder um bekannte Beziehungen zwischen den Unbekannten auszudrücken), so kann man diese Zwänge durch das (lineare) Gleichungssystem

$$R\hat{x} + b = 0 \quad (5.4)$$

ausdrücken. Das funktionale Modell (5.1) wird um (5.4) erweitert, um die Zwangsbedingungen zu integrieren. Die zu minimierende Zielfunktion lautet dann nach Lagrange

$$\mathcal{F} = v^T P v + 2k^T (R\hat{x} + b) \rightarrow \min \quad (5.5)$$

(Minimierung der gewichteten Quadratsumme der Verbesserungen unter Berücksichtigung der Zusatzbedingungen, k wird als Vektor der Korrelaten bezeichnet), was zum Normalgleichungssystem

$$\begin{bmatrix} A^T P A & R^T \\ R & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^T P l \\ -b \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

führt.

Für die Angabe der Redundanz r gilt nun, dass die Anzahl g der Restriktionsgleichungen zu der Differenz $m - n$ hinzuzufügen ist, weil jede Restriktionsgleichung hinsichtlich des Beitrags zur Parameterschätzung dieselbe Bedeutung hat wie eine Beobachtungsgleichung.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass man ein Gauß-Markov-Modell mit Restriktionen auch in zwei Stufen berechnen kann. Dazu wird zunächst ein Modell ohne Restriktionen nach Kapitel (5.1.1) berechnet, so dass man die vorläufigen Unbekannten \hat{x}' erhält. Diese Zwischenlösung wird einer erneuten, nun aber bedingten Ausgleichung unterzogen, die sich aus den Bedingungsgleichungen ergibt. Dieses Verfahren hat den Nachteil, dass das mathematische Modell (5.1) bereits ohne Berücksichtigung der Restriktionen regulär sein muss. Ansonsten kann der erste Schritt der zweistufigen Ausgleichung nicht berechnet werden. Aus diesem Grund sollte man standardmäßig eine geschlossene Ausgleichung durchführen,

wenn man ein Gauß-Markov-Modell mit Restriktionen lösen muss. Das zweistufige Verfahren bietet sich vor allem dann an, wenn man erst nachträglich Kenntnis von einer Restriktion zwischen den Unbekannten erhält und die komplette Ausgleichung nicht erneut durchführen möchte.

Eine weitere Anmerkung bezieht sich auf die Modellierung der Restriktionen. In dem oben dargestellten Ansatz werden die Zusatzbedingungen über eine Erweiterung des Grundmodells mathematisch exakt formuliert. Man wird feststellen, dass die betroffenen Unbekannten nach der Ausgleichung den angelegten Zwängen (im Rahmen der Rechenschärfe) genau entsprechen. Allerdings sind die Ausreißertests (siehe Kapitel 5.1.3) auf Basis des Grundmodells definiert und deshalb nicht ohne weiteres auf das Modell mit Restriktionen ((5.1)+(5.4), (5.2)) übertragbar. Aus diesem Grund werden Restriktionen in der Praxis oft als Beobachtungen eingeführt. Indem man der „Restriktionsbeobachtung“ eine im Vergleich zu den gewöhnlichen Beobachtungen sehr kleine Standardabweichung zuweist, sorgt man dafür, dass die Verbesserung für diese „Beobachtung“ sehr klein ausfallen wird. Man kann also auf diese Weise erreichen, dass die Unbekannten die Restriktion so gut wie, aber nicht exakt einhalten. Der Vorteil dabei ist, dass man sich immer im Rahmen des Grundmodells bewegt. Man spricht bei Verwendung von Modell ((5.1)+(5.4), (5.2)) von „harten“ Restriktionen und bei der Modellierung als Beobachtungen von „weichen“ Restriktionen.

5.1.3 Statistische Tests

Den statistischen Testverfahren bei der Parameterschätzung liegt die Stichprobentheorie zugrunde (siehe [28, Kapitel 14 und 15]). Generell wird eine Annahme (Hypothese) getroffen und anschließend mit der vorhandenen Stichprobe abgeglichen, um zu entscheiden, ob die Annahme richtig oder falsch war. Es gibt zwei Klassifizierungen von Hypothesen ([52, Seite 1], [5, Seite 222]):

- Hypothesen über unbekannte Parameter, die mit Parametertests überprüft werden
- Hypothesen über eine unbekannte Verteilung, die man mit Verteilungstests überprüft

Bei einem Verteilungstest [28, Seite 229 ff.] stellt man die vorliegende Stichprobe der vermuteten Verteilung gegenüber und entscheidet, ob die Unterschiede zwischen den Stichprobenwerten und der Verteilung signifikant oder marginal sind. Bei Parametertests [28, Seite 204 ff.] betrachtet man den ermittelten Wert des Parameters und vergleicht ihn mit seinem Erwartungswert. Es geht dann um die Frage, ob die nicht zu vermeidende Abweichung durch die Ungenauigkeit des Wertes zu erklären ist oder nicht. Dazu sind zwei Hypothesen notwendig: Die

Nullhypothese H_0 und die Alternativhypothese H_a . Zunächst wird die Nullhypothese aufgestellt, dass der Erwartungswert des aktuellen Parameterwerts der Sollwert ist

$$H_0 : E(p_{ist}) = p_{soll} \quad (5.7)$$

Anschließend muss man sich entscheiden, ob die Differenz $\Delta = |p_{soll} - p_{ist}|$ unter Berücksichtigung der Standardabweichung σ_p zu groß ist oder nicht. Diese Entscheidung ist nicht zweifelsfrei zu treffen, weil diese Differenz zwar mit großer Wahrscheinlichkeit 0 ist, nach den Grundsätzen der Statistik aber jeden beliebigen Wert annehmen kann, auch wenn $E(p_{ist}) = p_{soll}$ gilt. Die Ablehnung von H_0 ist also mit einem gewissen Risiko verbunden. Man muss sich in Bezug auf die Differenz für eine bestimmte Grenze k entscheiden, ab dem sie als zu groß erachtet, die Nullhypothese also verworfen wird. Wenn die Nullhypothese die richtige Annahme war, aber verworfen wurde, dann spricht man von einem Fehler 1. Art [52, Seite 2], [28, Seite 208], [5, Seite 222]. Die Wahrscheinlichkeit, dass Δ unter korrekter Annahme H_0 größer als der kritische Wert k ist, wird als Signifikanzniveau oder Irrtumswahrscheinlichkeit α bezeichnet.

$$P(H_0 : \Delta > k) = \alpha \quad (5.8)$$

Wählt man ein kleines k , so wird man sich oft für eine Ablehnung der Nullhypothese entscheiden, muss aber in Kauf nehmen, dass die Wahrscheinlichkeit für einen Irrtum relativ groß ist. Ein großes k wiederum lässt den Tester sehr lange an der Nullhypothese festhalten und diese nur dann verwerfen, wenn ein Irrtum fast ausgeschlossen ist.

Allerdings kann auch die Annahme der Nullhypothese H_0 falsch sein. Entscheidet man sich für H_0 , aber H_0 trifft nicht zu, so begeht man einen Fehler 2. Art [52, Seite 2], [28, Seite 209]. Bevor man eine Wahrscheinlichkeit für einen Fehler 2. Art angeben kann, muss man zuerst definieren, was gelten soll, wenn die Nullhypothese abgelehnt wird. Man muss also eine Alternativhypothese H_a formulieren. Damit wird automatisch auch die Verteilungsfunktion der Alternativhypothese festgelegt. Die Wahrscheinlichkeit, dass Δ bei richtiger Alternativhypothese H_a größer als der kritische Wert k ist, wird mit β bezeichnet [52, Seite 4], [28, Seite 209].

$$P(H_a : \Delta > k) = \beta \quad (5.9)$$

Folglich ist $1 - \beta$ die Wahrscheinlichkeit für eine fälschliche Annahme von H_0 , also einen Fehler 2. Art. Die Wahrscheinlichkeit β ist die Güte oder Macht des Tests, sie ist abhängig von der Irrtumswahrscheinlichkeit des Tests und der Verteilung der Teststatistik unter der Alternativhypothese. Ist β klein, so liegen die Dichtefunktionen von Nullhypothese und Alternativhypothese dicht beieinander; die beiden Annahmen unterscheiden sich kaum. Dementsprechend kann die Trennschärfe des Tests nicht groß sein. β wird größer, je unterschiedlicher die beiden Annahmen getroffen wurden.

Wichtige Testverteilungen für die Nullhypothese H_0 im Zusammenhang mit statistischen Tests sind

- Standardnormalverteilung $N(0, 1)$
- Student-Verteilung t_n
- Fisher-Verteilung $F_{m,n}$
- Chi-Quadrat-Verteilung $\chi^2(m)$

Für die Alternativhypothese H_a gelten entsprechend

- Standardnormalverteilung $N(\delta, 1)$
- Student-Verteilung $t_n(\delta)$
- Fisher-Verteilung $F_{m,n;\lambda}$
- Chi-Quadrat-Verteilung $\chi^2(m, \lambda)$

[52, Seite 4], [28, Seiten 126 ff. und 157 ff.] Die Parameter λ bzw. δ bezeichnet man als Nichtzentralitätsparameter des Tests. Sie ergeben sich direkt aus der Dichte der Alternativhypothese, der Irrtumswahrscheinlichkeit α und der Güte β .

Im Zusammenhang mit der Suche nach groben Fehlern spricht man bei dem Gleichungssystem (5.1), (5.2) aus Kapitel (5.1.1) von der Nullhypothese H_0 , weil die Abwesenheit von Fehlertermen die Annahme widerspiegelt, dass keine groben Fehler vorhanden sind.

Zur Vertiefung der Grundlagen zur Statistik eignen sich besonders [28] und [27].

Globaltest Man kann das funktionale Modell (5.1) und das stochastische Modell (5.2) auf globaler Ebene durch den Globaltest überprüfen [52, Seite 5], [28, Seite 250 ff.], [5, Seite 290]. Hinter dem Globaltest steckt die berechtigte Vermutung, dass unter der Voraussetzung, dass der vermutete funktionale Zusammenhang richtig war und die Stochastik der Beobachtungen durch die angenommenen statistischen Parameter wahrheitsgemäß ausgedrückt wurde, die Verbesserungen der Beobachtungen im Rahmen ihrer Genauigkeiten bleiben müssen. Zur Durchführung des Globaltests berechnet man nach der Auflösung der Normalgleichungen (5.3) über die ermittelten Parameter \hat{x} den Vektor der Verbesserungen

$$v = A\hat{x} - l \quad (5.10)$$

Dann wird die Funktion $L = v^T P v$ dem a-priori-Varianzfaktor σ_0^2 gegenübergestellt:

$$T_{glob} = \frac{v^T P v}{\sigma_0^2} \quad (5.11)$$

Die so definierte Testgröße T_{glob} besitzt unter der Nullhypothese H_0 , also unter der Annahme, dass kein Fehler vorliegt, die χ^2 -Verteilung mit r Freiheitsgraden. Der Erwartungswert einer $\chi^2(r)$ -Verteilung ist bekanntlich r , so dass gilt

$$E(T_{glob}) = E\left(\frac{v^T P v}{\sigma_0^2}\right) = r \quad (5.12)$$

Stellt man Gleichung (5.12) um,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{v^T P v}{r} \quad (5.13)$$

so erhält man $\hat{\sigma}^2$ als erwartungstreuen Schätzer des Varianzfaktors σ_0^2 . Im Zuge des Globaltests wird also eine nach der Ausgleichung erhältliche Schätzung (die a posteriori-Varianz $\hat{\sigma}^2$) mit ihrer ursprünglichen Annahme (der a priori-Varianz σ_0^2) verglichen.

Man muss sich nun für eine Irrtumswahrscheinlichkeit α entscheiden und erhält den kritischen Wert k in Abhängigkeit von α .

$$P(\chi^2(r) > k) = \alpha \quad (5.14)$$

Im Falle von $T > k$ verwirft man die Nullhypothese [28, Seite 251].

Das bedeutet zunächst lediglich, dass wahrscheinlich ein Fehler in den Annahmen (5.1) oder (5.2) vorliegt. Dafür kommen verschiedene Ursachen in Frage. Es ist beispielsweise möglich, dass die Beobachtungen im stochastischen Modell genauer beurteilt werden, als sie wirklich sind. Ein weiterer Grund kann im funktionalen Modell liegen, bei dessen Formulierung wesentliche Eigenschaften des realen Problems nicht adäquat nachvollzogen wurden. Ein Beispiel dafür ist die Vernachlässigung eines vorliegenden Maßstabsfaktors bei einer Streckengruppe in einem Lagenetz. Das funktionale Modell kann auch komplett falsch gewählt worden sein. Dies kann in der Formanalyse auftreten, wenn man sich über die real vorliegende Form im Unklaren ist und eine abweichende Zielfunktion wählt, die dieser Form im lokalen Bereich lediglich ähnelt. Beiden Beispielen ist gemein, dass die berechneten Verbesserungen größer ausfallen müssen als die wahren Verbesserungen (also die Differenzen der Beobachtungen zu den wahren Werten), weil die wahren Werte aufgrund der Verzerrungen durch die ungenügende Modellierung gar nicht erreicht werden können. Möglicherweise liegt auch kein Fehler vor, und die erhöhte Verbesserungsquadratsumme resultiert auf natürliche Weise aus der Stochastizität der Beobachtungen, die große Werte für einzelne Verbesserungen ja nicht ausschließt, sondern nur deren Wahrscheinlichkeit als gering betrachtet. Man begeht dann einen Fehler 1. Art. (Die Wahrscheinlichkeit für diese Fehlinterpretation kann verkleinert werden, indem möglichst viele zusätzliche Beobachtungen gemessen und in die Ausgleichung eingeführt werden, was allerdings dem Gedanken der Wirtschaftlichkeit widerspricht.) Ein Anschlag

des Globaltests besagt also nur, dass irgend etwas nicht in Ordnung sein könnte, gibt aber keinerlei Hinweis auf die Natur dieses Fehlers. Es ist anzumerken, dass die Anwendung des Globaltests nur möglich ist, wenn der a-priori-Varianzfaktor σ_0^2 bekannt ist [52].

In der Praxis wird dem Globaltest aus den angeführten Gründen keine herausragende Bedeutung zugestanden. Schlägt der Globaltest nicht an, so wird man dies lediglich als Hinweis auf einen vermutlich korrekten Ansatz werten. Da aufgrund der unterschiedlichen Trennschärfe ein Einzeltest trotz zufriedensstellendem Globaltest signifikant sein kann, wird man immer sein Augenmerk auf diese spezifischeren Tests richten. Auch ein Anschlag des Globaltests führt direkt auf eine Betrachtung der Einzeltests, weil nur damit ein vorliegender Fehler weiter eingekreist werden kann.

Ausreißertest in Gauß-Markov-Modellen Um einzelne Beobachtungen oder Beobachtungsgruppen statistisch zu überprüfen, stellt man die Alternativhypothese auf, dass ein grober Fehler vorliegt. Um diesen groben Fehler zu modellieren, wird der Ansatz nach Gleichung (5.1) erweitert [52]:

$$l + v' = Ax + Ky \quad (5.15)$$

Der Vektor y enthält die groben Fehler und ist zu ermitteln. Die Matrix K regelt, wie sich die einzelnen groben Fehler aus dem Vektor y auf die Beobachtungen auswirken.

Die neu eingeführten Parameter y kann man ausgehend von dem Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} A^T P A & A^T P K \\ K^T P A & K^T P K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^T P l \\ K^T P l \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

über

$$\begin{aligned} (K^T Q_\epsilon K)y &= -K^T \epsilon \\ \text{mit} & \\ Q_\epsilon &= P Q_v P \\ \epsilon &= P v \end{aligned} \quad (5.17)$$

mit den Verbesserungen aus der Nullhypothese berechnen ([52, Seite 9], [29]). Die Verbesserungen v' der Alternativhypothese müssen zur Schätzung des groben Fehlers nicht vorliegen. Die Kofaktormatrix der Fehler y ist durch

$$Q_{yy} = (K^T Q_\epsilon K)^{-1} \quad (5.18)$$

gegeben.

Wenn man zum Beispiel einen Lagepunkt, also eine zweidimensionale Beobachtung, testen will, dann formuliert man die Alternativhypothese wie folgt:

$$\nabla l = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \nabla l_i \\ \nabla l_j \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = Ky = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_x \\ \nabla_y \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

(Die Notation ∇ steht im Allgemeinen für eine kleine Größe und wird in der Ausgleichung für die Darstellung eines groben Fehlers verwendet.)

Durch Ansatz (5.19) nimmt die Bestimmungsgleichung für den groben Fehler (5.17) die Gestalt

$$\begin{pmatrix} q_{\epsilon_i} & q_{\epsilon_i \epsilon_j} \\ q_{\epsilon_j \epsilon_i} & q_{\epsilon_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_x \\ \nabla_y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \epsilon_i \\ \epsilon_j \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

an. Wenn der Varianzfaktor bekannt ist, dann kann man die Richtigkeit der Annahme eines groben Fehlers in dem Punkt mit der Testgröße

$$T_{Punkt} = \frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} \nabla_x \\ \nabla_y \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} q_{\epsilon_i} & q_{\epsilon_i \epsilon_j} \\ q_{\epsilon_j \epsilon_i} & q_{\epsilon_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_x \\ \nabla_y \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

$$\sim \chi^2(2)$$

prüfen. Wie in Kapitel 5.1.3 beschrieben, entscheidet man sich nun für eine Irrtumswahrscheinlichkeit α , was den kritischen Wert $k(\alpha)$ festlegt. k ist also der Wert der χ^2 -Verteilung mit dem der Punktdimension entsprechenden Freiheitsgrad, für den gilt, dass Werte über dem Wert k nur mit der Wahrscheinlichkeit α zu erwarten sind. Ist die Testgröße T_{Punkt} größer als der kritische Wert, dann kann der Modellansatz (5.15), also die Alternativhypothese, mit großer Wahrscheinlichkeit als richtig angenommen werden. Es liegt demnach ein grober Fehler vor. Wenn die Testgröße kleiner als der kritische Wert ist, dann ist der Schätzwert für den groben Fehler im Verhältnis zu seiner Genauigkeit zu klein, so dass die Existenz eines groben Fehlers aus statistischer Sicht bezweifelt werden muss ([52, Seite 18]; [29]; [5]; [28, Kapitel 10]).

Für dreidimensionale Tests (zum Beispiel für 3D-Punkte) ändern sich die Dimensionen und Belegungen der Matrizen in entsprechender Weise.

Der eindimensionale Test ist trivial, denn durch die Dimension 1 vereinfacht sich die Formel (5.17) zu

$$y = \nabla l_i = \frac{-\epsilon_i}{q_{\epsilon_i}} \quad (5.22)$$

Diese Fehlerabschätzung kann man mit

$$\begin{aligned} T_{l_i} &= \frac{\epsilon_i^2}{\sigma_{\epsilon_i}^2} \\ &\sim \chi^2(1) \end{aligned} \tag{5.23}$$

nach dem oben beschriebenen Schema testen. Da es sich um eine χ^2 -Verteilung mit nur einem Freiheitsgrad handelt, kann man auch die Wurzel des Testwerts verwenden. Der neue Testwert folgt bekanntlich der Normalverteilung:

$$\begin{aligned} T_{l_i} &= \frac{\epsilon_i}{\sigma \sqrt{q_{\epsilon_i}}} \\ &\sim N(0, 1) \end{aligned} \tag{5.24}$$

Bemerkung: Die in der Praxis oft anzutreffende Formel

$$\begin{aligned} T_{l_i} &= \frac{v_i}{\sigma_{v_i}} \\ &\sim N(0, 1) \end{aligned} \tag{5.25}$$

gilt nur für unkorrelierte Beobachtungen ([52]; [29]; [5]; [28, Kapitel 14])!

Besonders hervorzuheben ist, dass die Berechnung der groben Fehler y unter der Verwendung der Verbesserungen aus der Nullhypothese erfolgen kann. Im Hinblick auf die späteren Ausführungen zu Ausreißertests in Gauß-Helmert-Modellen beachte man des Weiteren, dass die Matrix Q_{ϵ_i} bereits die Inverse der Matrix Q_{∇_i} ist.

Vergleich der Trennschärfe von Globaltest und Ausreißertest Die Verbesserungsquadratsumme $\Omega_{H_0} = v^T P v$ unter der Nullhypothese lässt sich durch die Verbesserungsquadratsumme der Alternativhypothese $\Omega_{H_a} = v'^T P v'$ und die Quadratsumme der Fehler $\Omega_y = y^T (K^T Q_{\epsilon} K) y$ nach

$$\Omega_{H_0} = \Omega_{H_a} + \Omega_y \tag{5.26}$$

ausdrücken [52, Seite 9 ff.]. Dieser Zusammenhang lässt sich durch eine stufenweise Ausgleichung herleiten, indem man zunächst das Modell der Alternativhypothese $l + v' = A x + K y$ berechnet, woraus die Verbesserungsquadratsumme Ω_{H_a} entsteht. Anschließend führt man die Parameter der Alternativhypothese einer bedingten Ausgleichung $E(y) = 0$ zu. Die Verbesserungsquadratsumme dieser zweiten Stufe ist dann bekanntlich $\Omega_y = y^T (K^T Q_{\epsilon} K) y$, da die Matrix $K^T Q_{\epsilon} K$ die Gewichtsmatrix der Parameter ist. Aus dem Verfahren der stufenweisen Ausgleichung folgt, dass die beiden Verbesserungsquadratsummen Ω_{H_a} und Ω_y sto-

chastisch unabhängig sind. Ausgehend von diesen beiden Verbesserungsquadratsummen kann man jeweils eine Schätzung des Varianzfaktors vornehmen:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{H_a}^2 &= \frac{\Omega_{H_a}}{m - n - q} \\ \hat{\sigma}_y^2 &= \frac{\Omega_y}{q}\end{aligned}\tag{5.27}$$

q ist die Dimension des Vektors y . Mit diesen beiden Schätzungen für den Varianzfaktor kann man den Globaltest formulieren [28, Seite 250]:

$$T_{Glob} = \frac{\hat{\sigma}_y^2}{\hat{\sigma}_{H_a}^2}\tag{5.28}$$

Um Aussagen zur Trennschärfe des Tests treffen zu können, muss die Alternativhypothese (5.15) betrachtet werden. Unter H_a folgt der Globaltest einer nicht-zentralen χ^2 -Verteilung mit r Freiheitsgraden. Die Nichtzentralität ist definiert durch

$$\lambda = \frac{\nabla l^T Q_\epsilon \nabla l}{\sigma_0^2} = \frac{y^T K^T Q_\epsilon K y}{\sigma_0^2}\tag{5.29}$$

[52, Seite 6] Unter H_a gilt demnach

$$\begin{aligned}H_a : T_{Glob} &= \frac{\hat{\sigma}_y^2}{\hat{\sigma}_{H_a}^2} \sim F_{q, r-q; \lambda} \\ H_a : T_q &= \frac{\Omega_y}{\sigma_0^2} \sim \chi_{q; \lambda}^2\end{aligned}\tag{5.30}$$

für den Globaltest und den Ausreißertest. Aus den beiden Dichtefunktionen lässt sich nun schließen, dass die Trennschärfe des Tests T_q bei gleicher Irrtumswahrscheinlichkeit größer ist als die Trennschärfe des Globaltests. Anders ausgedrückt ist bei gleicher Irrtumswahrscheinlichkeit eine Entscheidung gegen die Nullhypothese aufgrund eines signifikanten Ausreißertests T_q sicherer als aufgrund eines anschlagnenden Globaltests ([52],[28]). Man kann aber auch die Irrtumswahrscheinlichkeiten von Globaltest und Ausreißertest so aufeinander abstimmen, dass die Trennschärfe bei beiden Tests gleich ist.

$$\lambda(\alpha_{Glob}, \beta, r) = \lambda(\alpha_q, \beta, r)\tag{5.31}$$

Diese Abstimmung wird von Baarda [2] empfohlen. Dabei muss man allerdings in Kauf nehmen, dass die Irrtumswahrscheinlichkeit α_{Glob} des Globaltests bedeutend größer wird als die des Ausreißertests α_q . Das heißt, dass die Wahrscheinlichkeit für einen Fehler 1. Art, also eine Ablehnung der Nullhypothese H_0 , obwohl sie richtig ist, beim Globaltest steigt. Diese Zusammenhänge sind der Grund für die oben beschriebenen Aussagen zur praktischen Verwendung des Globaltests.

5.1.4 Weitere Bemerkungen

Wenn der funktionale Zusammenhang $F(\tilde{x}) = \tilde{l}$ nicht bereits in linearer Form gegeben ist, dann wird er nach Taylor linearisiert ([5, Seite 199] o. ä.). Es entsteht ein Gleichungssystem der Art

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_l \Delta x \approx (l - F(\hat{x})) \quad (5.32)$$

Die partiellen Ableitungen von F kann man in einer Matrix A zusammenfassen, ebenso die Differenz zwischen dem ursprünglichen Beobachtungsvektor l und dem Funktionswert an der Stelle der Näherungen $F(\hat{x})$ zu einem neuen Beobachtungsvektor Δl . Verzichtet man auf die Δ -Notation, so ergibt sich ein Gleichungssystem, das zum Gleichungssystem (5.1) äquivalent ist. Die weitere Berechnung erfolgt dann wie in Kapitel 5.1.1 oder 5.1.2 beschrieben.

Für die Stelle der Linearisierung ist eine möglichst gute Näherung \hat{x} für die Unbekannten zu wählen, die zum Beispiel aus einer konsistenten Teilmenge des Gleichungssystems oder aus Rechenroutinen für robuste Schätzer stammen kann. Es sei angemerkt, dass in geodätischer Literatur für die erste Schätzung gewöhnlich die Notation x_0 verwendet wird, alle weiteren Schätzungen der Parameter, namentlich die aus einer Ausgleichung, werden dann mit \hat{x} bezeichnet. Es wird in den weiteren Ausführungen auf die spezielle Symbolisierung x_0 verzichtet, weil es sich auch bei der ersten Näherung um eine Parameterschätzung \hat{x} handelt. Bei der Implementierung der einzelnen Berechnungsroutinen wie auch mathematisch gesehen spielt es letztlich keine Rolle, ob die Parameterwerte, an deren Stelle der funktionale Zusammenhang linearisiert wird, nun aus einer ersten Näherung oder aus einer vorangegangenen Iteration resultieren. Es besteht daher kein Grund für eine besondere Hervorhebung des ersten Parametersatzes. Hingegen kann durch dessen Verzicht eine einfachere und damit besser lesbare Formulierung erreicht werden.

Wie bereits erwähnt, kann das Gauß-Markov-Modell immer dann angewendet werden, wenn nach der mathematischen Formulierung des Problems Beobachtungen und Unbekannte grundsätzlich in getrennten Summanden aufzufinden sind. Das ist bei einer überraschend großen Anzahl von Problemen der Fall, wie zum Beispiel bei Lagenetzen, Höhennetzen oder gewöhnlichen Regressionsfunktionen. Deshalb wird im späteren Verlauf der Arbeit anhand von geeigneten Beispielen Bezug auf obige Ausführungen genommen.

5.2 Gauß-Helmert-Modell

5.2.1 Grundmodell

Bei der Klasse der Gauß-Helmert-Modelle handelt es sich um Gleichungssysteme, bei denen die Unbekannten und die Beobachtungen nicht generell in getrennten Summanden vorzufinden sind. Demzufolge führt die notwendige Linearisierung auf einen Ansatz der Art [5, Seite 198]

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{\hat{x},l} d\hat{x} + \left(\frac{\partial F}{\partial l}\right)_{\hat{x},l} v + F(l, \hat{x}) = 0 \quad (5.33)$$

bzw.

$$A d\hat{x} + Bv + w = 0$$

$$C_l = \sigma_0^2 Q_l = \sigma_0^2 P^{-1} \quad (5.34)$$

Analog zum Gauß-Markov-Modell enthält der Vektor x die Parameter des Modells. l sind die Beobachtungen, und der Vektor v enthält die Modifikationen der Beobachtungen, mit denen der Beobachtungsvektor in den Modellraum projiziert wird. Die Designmatrix A entsteht durch die Ableitung des funktionalen Zusammenhangs nach den Parametern x , die Matrix der Bedingungsgleichungen B aus den Ableitungen nach den Beobachtungen l . Der Vektor w wird im Allgemeinen als Vektor der Widersprüche bezeichnet und folgt aus dem Funktionswert F an der Stelle der geschätzten Unbekannten.

Mit der gleichen Begründung wie beim Gauß-Markov-Modell spricht man beim Gleichungssystem (5.33) vom funktionalen Modell und beim Gleichungssystem (5.2.1) vom stochastischen Modell.

Die zu minimierende Zielfunktion lautet

$$\mathcal{F} = v^T P v - 2k^T (Bv + A\hat{x} + w) \rightarrow \min \quad (5.35)$$

(siehe [4, Seite 389]) und führt zu dem linearen Gleichungssystem $Nz = n$, wobei die einzelnen Matrizen die Gestalt

$$\begin{pmatrix} BQ_l B^T & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ d\hat{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -w \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

annehmen.

Die gesuchten Zuschläge zu den Näherungswerten der Unbekannten erhält man nach der Inversion der Normalgleichungsmatrix aus dem entsprechenden Teil des Vektors z .

$$z = N^{-1}n \quad (5.37)$$

Üblicherweise muss mehrfach iteriert werden, bis die Zuschläge $d\hat{x}$ zu den Unbekannten verschwindend gering werden und damit das lokale Minimum der Funktion $v^T P v$ unter den formulierten Nebenbedingungen gefunden wird.

Die Redundanz des Problems ist durch $r = m - u$ gegeben, wobei u hier wie beim Gauß-Markov-Modell die Anzahl der Unbekannten x , m jedoch die Anzahl der unabhängigen Bedingungsgleichungen ist. Die Redundanz entspricht im Übrigen in den seltensten Fällen der Anzahl der Beobachtungen!

5.2.2 Modell mit Restriktionen

Sind Restriktionen bezüglich der Parameter anzubringen, so sind diese zunächst in Form von Bedingungsgleichungen (beliebige Funktion der Unbekannten) zu formulieren. Die Anzahl der Bedingungsgleichungen ist g . Diese Bedingungsgleichungen sind bei Bedarf an der Stelle der Näherungswerte der Unbekannten zu linearisieren, so dass ein Gleichungssystem der Art $Rd\hat{x} + b = 0$ entsteht [5, Seite 203]. Das funktionale und das stochastische Modell lauten dann:

$$\begin{aligned} Ad\hat{x} + Bv + w &= 0 \\ Rd\hat{x} + b &= 0 \end{aligned} \quad (5.38)$$

$$C_l = \sigma_0^2 Q_l = \sigma_0^2 P^{-1} \quad (5.39)$$

Die zu minimierende Zielfunktion [4, Seite 389] ist entsprechend

$$\mathcal{F} = v^T P v - 2k_1^T (Ad\hat{x} + Bv + w) - 2k_2^T (Rd\hat{x} + b) \quad (5.40)$$

Deren totales Differenzial führt zu dem Normalgleichungssystem

$$\begin{pmatrix} BQ_l B^T & A & 0 \\ A^T & 0 & R^T \\ 0 & R & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ d\hat{x} \\ k_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -w \\ 0 \\ -b \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

bzw.

$$Nz = n$$

Die Unbekannten erhält man wie beim Grundmodell 5.2.1 als Teil des Lösungsvektors z . Die Kofaktormatrix $Q_{\hat{x}}$ gewinnt man durch Extraktion der entsprechenden Submatrix von N^{-1} , wobei zu beachten ist, dass die Submatrix mit -1 zu multiplizieren ist, um $Q_{\hat{x}}$ zu erhalten

$$N^{-1} = \begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & -Q_{\hat{x}} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (5.42)$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_m \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_n \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_g$

Auch das Gauß-Helmert-Modell mit Restriktionen lässt sich stufenweise lösen, indem in einer ersten Stufe ein gewöhnliches Modell ohne Restriktionen berechnet wird, wodurch man die Lösungen \hat{x}_{GH} mit der zugehörigen Kofaktormatrix $Q_{\hat{x},GH}$ erhält. Diese Lösung führt man in einer zweiten Stufe der bedingten Ausgleichung $R(\hat{x}_{GH} + v_x) + b = 0$ zu, die dafür sorgt, dass die Parameter den gestellten Bedingungen genügen. Als Vorteil der stufenweisen Lösung kann die Möglichkeit angesehen werden, dass die Beobachtungen bereits in der ersten Stufe ohne den zusätzlichen Zwang der Bedingungsgleichungen getestet werden können. Ein gravierender Nachteil ist allerdings, dass wie beim Gauß-Markov-Modell mit Restriktionen das Modell ohne Restriktionen regulär sein muss, damit die erste Stufe überhaupt berechnet werden kann. Dabei werden die Restriktionen oft gerade deshalb angebracht, um das Problem überhaupt erst regulär zu machen. Ein Beispiel dafür ist die Berechnung eines ausgleichenden Kreises, der sich als Schnitt einer Kugel mit einer Ebene ergibt. Nach der Formulierung des mathematischen Modells für Kugel und Ebene muss zwingend die Restriktion eingeführt werden, dass der Kugelmittelpunkt in der Ebene liegen soll. Ansonsten kommen unendlich viele Kugeln für denselben Schnittkreis in Frage; die Berechnung würde in so einem Fall nicht konvergieren.

5.2.3 Statistische Tests

Bezüglich der Grundlagen zu statistischen Tests sei auf die Ausführungen in Kapitel 5.1.3 verwiesen.

Globaltest Üblicherweise werden Gauß-Helmert-Modelle getestet, indem ein Globaltest durchgeführt wird. Zunächst wird eine Schätzung für den a-priori-Varianzfaktor

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{v^T P v}{m - u + g} \quad (5.43)$$

durchgeführt. Anschließend entscheidet man sich anhand eines Vergleichs von a-posteriori- und a-priori-Varianz, ob der Unterschied zu groß ist oder nicht. Der Testwert lautet

$$\begin{aligned} T_{Glob} &= \frac{v^T P v}{\sigma_0^2} \\ &\sim \chi_{m-u+g}^2 \end{aligned} \quad (5.44)$$

Bezüglich der Aussagekraft des Globaltests gelten im Großen und Ganzen dieselben Aussagen, die zu diesem Thema in Kapitel 5.1.3 getroffen wurden.

Ausreißertest Ausreißertests sind in der Vergangenheit selten durchgeführt worden, weil deren Berechnung ungleich aufwändiger ist als die eines Ausreißer-

tests bei Gauß-Markov-Modellen. Um eine optimale Vergleichbarkeit zu gewährleisten, war es unerlässlich, einen allgemeinen Algorithmus für Ausreißertests bei Gauß-Markov-Modellen zu entwickeln. Die mathematischen Grundlagen zur Berechnung von Ausreißern beim Gauß-Helmert-Modell werden im Folgenden erläutert (siehe auch [29]).

Zunächst modelliert man grobe Fehler im Beobachtungsvektor ganz allgemein als ∇l

$$\hat{l} = l - \nabla l \quad (5.45)$$

und linearisiert den funktionalen Zusammenhang an der Stelle (\hat{x}, l) ; dann ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$F(l, \hat{x}) + \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)_{\hat{x}, l} d\hat{x} + \left(\frac{\partial F}{\partial l} \right)_{\hat{x}, l} v + \left(\frac{\partial F}{\partial \nabla l} \right)_{\hat{x}, l} \hat{\nabla} l = 0 \quad (5.46)$$

Wie sich unschwer erkennen lässt, gilt

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \nabla l} \right)_{\hat{x}, l} = - \left(\frac{\partial F}{\partial l} \right)_{\hat{x}, l} \quad (5.47)$$

so dass man Gleichung (5.46) symbolisch durch

$$w + Ad\hat{x} + Bv - B\hat{\nabla} l = 0 \quad (5.48)$$

darstellen kann.

Fasst man die Zuschläge $d\hat{x}$ und die groben Fehler $\hat{\nabla} l$ als Unbekannte auf, dann kann man Gleichung (5.46) auch durch

$$(A \quad -B) \begin{pmatrix} d\hat{x} \\ \hat{\nabla} l \end{pmatrix} + Bv + w = 0 \quad (5.49)$$

ausdrücken.

An dieser Stelle ist es sinnvoll, die Modellierung des groben Fehlers zu verfeinern. Gleichung (5.49) sieht eine Fehlerkomponente für jede eingeführte Beobachtung vor. Wenn man nicht alle Beobachtungen auf einmal, sondern nur einen Teil der Beobachtungen (zum Beispiel die Koordinaten eines 3D-Punktes) prüfen will, dann kann man diesen Sachverhalt durch

$$\nabla l = K \nabla e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla x \\ \nabla y \\ \nabla z \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

(vgl. Ansatz im Gauß-Markov-Modell, [52]) ausdrücken. Gleichung (5.49) wird dann zu

$$(A \quad -BK) \begin{pmatrix} d\hat{x} \\ \hat{\nabla} e \end{pmatrix} + Bv + F(l, \hat{x}) = 0 \quad (5.51)$$

bzw.

$$A'd\hat{x}' + Bv + w = 0$$

Es handelt sich um dieselbe schematische Darstellung wie bei der Nullhypothese. Allerdings können die Unbekannten nicht ohne Weiteres aus dem Normalgleichungssystem

$$\begin{pmatrix} BQ_l B^T & A' & 0 \\ A'^T & 0 & R^T \\ 0 & R & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ d\hat{x}' \\ k_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -w \\ 0 \\ -b \end{pmatrix} \quad (5.52)$$

bzw.

$$N'z = n$$

berechnet werden, da durch den Ansatz (5.51) die Matrix A' und damit auch die Matrix N' singular sein muss. In der Tat gehen die drei Spaltenvektoren, die aus dem Produkt $-BK$ resultieren, aus dem Vielfachen eines Basisvektors des \mathfrak{R}^m hervor (m sei die Anzahl der Gleichungen exklusive der Bedingungsgleichungen entsprechend R). Das bedeutet, dass das Normalgleichungssystem nach (5.52) unter Verwendung der Matrizen aus (5.51) unendlich viele Lösungen besitzt, denn wenn z_0 eine Lösung der Normalgleichungen (5.52) und G' der Nullraum von N' ist, dann sind alle z nach [4, Seite 157], [53, Seite 2]

$$z = z_0 + G\lambda, \lambda \text{ beliebig} \quad (5.53)$$

ebenfalls Lösungen von (5.52).

Diese Tatsache lässt sich anhand eines Beispiels aus der Formanalyse leicht veranschaulichen: Lässt man einen groben Fehler eines 3D-Punktes bei der Anpassung einer Ersatzform für die Punktwolke zu, so kann sich der projizierte Punkt letztlich überall auf der Form befinden. Der Betrag der Verbesserungen v dieses Punktes wird 0 sein (weil man die Funktion $v^T P v$ minimieren möchte), während die Diskrepanz zwischen originaler und projizierter Koordinate vollständig durch die Anteile des groben Fehlers ausgedrückt wird. Da bezüglich des groben Fehlers keine Bedingungen gestellt worden sind, können dessen Komponenten unendlich viele Kombinationen annehmen, sofern die Projektion nur auf der geschätzten Form zu liegen kommt [29].

Man muss sich folglich auf eine der Lösungen festlegen. Aus diesem Grund liegt es nahe, eine Restriktion einzuführen, die die Anteile des groben Fehlers einschließt und den Vektor der Unbekannten z , der die Parameter der Form, die Komponenten des groben Fehlers und die Korrelaten umfasst, eindeutig definiert.

In Analogie zur freien Netzausgleichung [53] ist eine sinnvolle Vorgabe die, dass der grobe Fehler des Punktes entlang der Lotlinie zur Ersatzfläche zu schätzen ist. Man erreicht dies durch die Forderung nach einer Minimierung der euklidischen Norm des Lösungsvektors $\|d\hat{x}'\|_2$, einer Halbnorm von z [5]:

$$\|d\hat{x}'\|_2^2 = z^T P_z z \quad (5.54)$$

Die Matrix P_z ist eine positiv semidefinite Matrix der Dimension (Anzahl der Gleichungen + Anzahl der Unbekannten + Anzahl der Restriktionsgleichungen), die lediglich in den $d\hat{x}'$ zugeordneten Diagonalelementen den Wert 1, sonst 0 aufweist.

Die Forderung nach minimaler Halbnorm (5.54) führt zu einem neuen Normalgleichungssystem

$$\begin{pmatrix} BQ_1B^T & A' & 0 & \\ A'^T & 0 & R^T & P_z G' \\ 0 & R & 0 & \\ G'^T P_z & & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ d\hat{x}' \\ k_2 \\ k_3 \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

dessen Normalgleichungsmatrix regulär und dessen Lösungsvektor deshalb eindeutig ist (siehe [53, Seite 3], [4, Seite 389]).

Den zur Aufstellung nötigen Nullraum G' von N' kann man nach unterschiedlichen mathematischen Verfahren gewinnen. Eine numerisch stabile und deshalb empfehlenswerte Lösung gelingt über eine Singulärwertzerlegung ([5], [3], [18])

$$N' = USV^T \quad (5.56)$$

Weil N' singular ist, sind nicht alle Singulärwerte ζ größer als 0. Der Nullraum von N' ist der Raum, der von den Vektoren aus V aufgespannt wird, deren Singulärwert ζ numerisch gesehen gleich null ist. Dieser Sachverhalt ist aus den Ausführungen in 4.5 unmittelbar ersichtlich.

Der grobe Fehler $\hat{\nabla}e$ ist nach der Lösung von System (5.55) wie in (5.51) definiert im letzten Teil von $d\hat{x}'$ zu finden. Seine Kofaktormatrix $Q_{\nabla e}$ erhält man durch Extraktion aus der Matrix Q_{k_1, dx', k_2, k_3} , die während der Berechnung von (5.55) entsteht.

Das Verfahren ist iterativ durchzuführen, bis die Norm $\|d\hat{x}'\|_\infty$, also die Anteile der Parameter an der Norm $\|d\hat{x}'\|_\infty$, eine vorher festzulegende Grenze, üblicherweise etwas mehr als die Rechengenauigkeit, nicht überschreitet.

Der Test eines Vektors s auf Signifikanz erfolgt im Allgemeinen durch Berechnung des Testwerts

$$\begin{aligned} T_s &= \frac{1}{\sigma^2} s^T Q_s^{-1} s \\ &\sim \chi^2(n) \end{aligned} \quad (5.57)$$

(siehe [5, Seite 175 ff.], [52]). Der Freiheitsgrad n entspricht der Dimension des Vektors s .

Diese Formel gilt allerdings nur für Vektoren mit regulärer Kofaktormatrix. Nun ergibt sich aus den Ausführungen zur Singularität von N' aus (5.52) und aus der Regularisierungsstrategie zweifelsfrei, dass die Kofaktormatrix $Q_{\nabla e}$ des Fehlervektors $\hat{\nabla}e$ nicht regulär sein kann. Weil die Modellanteile $-BK$ im Ansatz (5.51) nur den Rang 1 aufweisen, muss die Matrix $Q_{\nabla e}$ ebenfalls vom Rang 1 sein. Demzufolge ist der Vektor $\hat{\nabla}e$ singular normalverteilt vom Rang $r = 1$.

$$\hat{\nabla}e \sim N_1(0, \sigma^2 Q_{\nabla e}) \quad (5.58)$$

Die Singularität eines normalverteilten Vektors s bedeutet, dass man die gesamte stochastische Information durch r Zufallsvariablen und ihre $(r \times r)$ -Kovarianzmatrix darstellen kann [5, Seite 189]. Die übrig bleibenden Komponenten sind Linearkombinationen dieser r Zufallsgrößen und deshalb redundant. Durch orthogonale Transformation des singulären Vektors

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} G^T \\ H^T \end{pmatrix} s \\ \mathcal{S}(G) &= \mathcal{S}(Q) \\ \mathcal{S}(H) &= \mathcal{N}(Q) \end{aligned} \quad (5.59)$$

wobei G aus dem Spaltenraum von Q und H aus dem Nullraum von Q gebildet wird, erhält man die stochastischen Anteile s_1 und die deterministischen Anteile s_2 . Die Dichtefunktion des Vektors s kann prinzipiell nicht eindeutig charakterisiert werden. Wenn man sich aber auf den Träger der stochastischen Information s_1 beschränkt, dann hat die Dichtefunktion eines singular normalverteilten Vektors

$$s \sim N_r(0, C) \quad (5.60)$$

die Form

$$\varphi(x) = \left[(2\pi)^r \prod_{i=1}^r \lambda_i \right]^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} x^T C^{-1} x} \quad (5.61)$$

Die λ_i sind die von null verschiedenen Eigenwerte der Kovarianzmatrix C und C^{-1} eine beliebige g-Inverse von C wie beispielsweise die Moore-Penrose-Bjerrhammar-Inverse (MPB-Inverse) C^+ [5, Seite 189].

Der Vektor s kann nun auf Signifikanz getestet werden, indem man eine orthogonale Transformation durchführt und dann den stochastischen Anteil s_1

$$s_1 \sim N(0, G^T C G) \quad (5.62)$$

mittels

$$\begin{aligned} T &= s_1^T (G^T C G)^{-1} s_1 \\ &\sim \chi^2(r) \end{aligned} \quad (5.63)$$

testet. Oder man verzichtet auf die orthogonale Transformation und verwendet

$$\begin{aligned} T &= s^T C^+ s \\ &\sim \chi^2(r) \end{aligned} \quad (5.64)$$

als Testgröße [5, Seite 194]. Übertragen auf das vorliegende Problem des Beobachtungstests im Gauß-Helmert-Modell lautet der Test also

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\sigma^2} \hat{\nabla} e^T Q_{\nabla e}^+ \hat{\nabla} e \\ &\sim \chi^2(1) \end{aligned} \quad (5.65)$$

Die MPB-Inverse $Q_{\nabla e}^+$ erhält man in einfacher und numerisch stabiler Weise über eine Singulärwertzerlegung von $Q_{\nabla e}$.

Es bleibt anzumerken, dass die Linearisierung des funktionalen Zusammenhanges an der Stelle (\hat{x}, l) stattfindet. Der Vektor der Beobachtungen l wurde also nicht in jeder Iteration um den geschätzten groben Fehler ∇l verbessert, um anschließend eine Linearisierung an dieser verbesserten Stelle vorzunehmen. Diese Vorgehensweise ist zulässig, solange man zum Beispiel wegen geeigneter Schritte in der Vorverarbeitung annehmen kann, dass die vermuteten groben Fehler keine großen Ausmaße erreichen.

Eine leicht unterschiedliche Variante des oben dargestellten Ansatzes basiert auf der Idee, dass die eigentliche Beobachtung

$$\hat{l} = l - \nabla l \quad (5.66)$$

sein müsste. Möchte man dem bereits während der Iteration Rechnung tragen, dann bietet sich eine Linearisierung des funktionalen Zusammenhanges an der Stelle (\hat{x}, \hat{l}) an. Daraus ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$F(\hat{l}, \hat{x}) + \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)_{\hat{x}, \hat{l}} d\hat{x} + \left(\frac{\partial F}{\partial l} \right)_{\hat{x}, \hat{l}} v + \left(\frac{\partial F}{\partial \nabla l} \right)_{\hat{x}, \hat{l}} d\hat{\nabla} l = 0 \quad (5.67)$$

das sich von Gleichungssystem (5.46) aus dem ursprünglichen Ansatz insofern unterscheidet, dass nun nicht bei jeder Iteration der gesamte Fehler $\hat{\nabla} l$, sondern ein Zuschlag $d\hat{\nabla} l$ zu der zuletzt gültigen Schätzung $\hat{\nabla} l$ berechnet wird. Man geht hier also analog zur Schätzung der Parameter \hat{x} vor.

Wie im ursprünglichen Ansatz gilt

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \nabla l} \right)_{\hat{x}, \hat{l}} = - \left(\frac{\partial F}{\partial l} \right)_{\hat{x}, \hat{l}} \quad (5.68)$$

so dass man Gleichung (5.67) symbolisch durch

$$w + Ad\hat{x} + Bv - Bd\hat{\nabla} l = 0 \quad (5.69)$$

bzw. durch

$$(A \quad -B) \begin{pmatrix} d\hat{x} \\ d\hat{\nabla}l \end{pmatrix} + Bv + w = 0 \quad (5.70)$$

darstellen kann. Die weitere Berechnung geschieht in völliger Analogie zum ursprünglichen Ansatz [29].

Als Abbruchkriterium für dieses Verfahren kann die Norm $\|d\hat{x}'\|_\infty$ gewählt werden, weil $d\hat{x}'$ nur noch aus Zuschlägen besteht, die verschwinden müssen, wenn das Verfahren konvergiert. Es ist zu beachten, dass die Ableitungen von F immer an der Stelle $\hat{l} = l - \nabla l = l - K\hat{\nabla}e$ vorzunehmen sind. Das bedeutet, dass der Beobachtungsvektor nach jedem Schleifendurchlauf um den aktuell vermuteten groben Fehler zu bereinigen ist, bevor die an der Ausgleichung beteiligten Matrizen neu aufgestellt werden und eine erneute Ausgleichung durchgeführt wird.

Testet man den alternativen Ansatz mit dem stochastischen Modell $C = I$, so stellt man fest, dass die Sollparameter bei unverrauschten Beobachtungen wie zu erwarten exakt erreicht werden. Allerdings ist der geschätzte grobe Fehler dem Betrag nach größer als der ursprünglich eingeführte und steht nicht senkrecht auf dem funktionalen Modell im projizierten Punkt, obwohl doch durch die Ränderung der Normalgleichungsmatrix genau dies gewährleistet sein sollte. Die Ursache liegt in der Tatsache, dass genau genommen die Zuschläge in jeder Iteration zu der bis zu dem Zeitpunkt ermittelten Näherung für den groben Fehler lotrecht zu dem Modell sind, das durch die aktuell gültigen Parameterwerte festgelegt ist. Geht man mit relativ schlechten Näherungen für die Parameter in die Ausgleichung, so wird sich die Definition des Modells während den Iterationen merklich verändern. Damit ändert sich aber auch in jedem Schritt die Lotrichtung im projizierten Punkt und damit die Zwangsbedingung für $\|d\hat{x}'\|_2$, so dass die Zuschläge zu dem groben Fehler als Vektorzug dargestellt eine Raumkurve beschreiben. Die Resultierende kann dann nicht mehr senkrecht auf dem Modell stehen, das aus der letzten Iteration vor dem Abbruch der Schleife hervor geht.

Dieses Problem kann man ausschließen, wenn man die erste Näherung für die Parameter nicht gänzlich neu bestimmt, sondern stattdessen die Parameterwerte aus der Nullhypothese verwendet. Unter der Voraussetzung, dass der grobe Fehler nicht sehr groß ist, sind dann keine grundlegenden Änderungen im Parametersatz zu erwarten, so dass der berechnete grobe Fehler in dem verfälschten Punkt ziemlich genau (wenn auch nicht exakt) dem Sollwert entspricht.

Der ursprüngliche Ansatz kennt dieses Problem nicht, weil hier immer an der Stelle der ursprünglichen Beobachtungen, also aus der Sicht des Vektors ∇e an der Stelle 0 linearisiert wird. Der komplette Vektor wird bei jeder Iteration neu geschätzt und wandert sozusagen mit, wenn sich die Form durch die Verbesserung der Parameter ändert. Durch das Verfahren der Ränderung steht der Fehlervektor immer senkrecht auf dem Modell, das durch die Parameterwerte des aktuellen Schrittes definiert wird, was auch für die letzte Iteration und damit für die end-

gültige Fläche gelten muss.

6 Total Least Squares

6.1 Classical Total Least Squares

6.1.1 Motivation und Formulierung des Problems

Im folgenden Kapitel wird die klassische Total-Least-Squares-Methode vorgestellt und analysiert. Das Attribut „klassisch“ bedeutet in diesem Zusammenhang, dass eine Lösung des Gleichungssystems $Ax \approx b$ im Sinne von TLS existiert und eindeutig ist.

Um den Unterschied zu Least Squares und damit die Motivation für TLS zu illustrieren, wird zunächst kurz die LS-Lösung charakterisiert.

Definition 6.1 (Least-Squares-Problem). Es sei ein überbestimmtes Gleichungssystem $Ax \approx b$ mit m Gleichungen und n Unbekannten x gegeben. Die Least-Squares-Methode erfüllt

$$\|b - \hat{b}\|_2 \rightarrow \min, \hat{b} \in \mathfrak{R}^m \quad (6.1)$$

wobei $\hat{b} \in R(A)$. Wenn dieses \hat{b} gefunden werden konnte, so wird jedes x , das eine Lösung der Gleichung $Ax = \hat{b}$ darstellt, „Least-Squares-Lösung“ genannt. Entsprechend ist $\Delta b = b - \hat{b}$ die „Least-Squares-Verbesserung“ (siehe [3], [8], [18], [21], [17], [41]).

Es ist allgemein bekannt, dass dies der Projektion von b orthogonal zum Spaltenraum von A entspricht. Aus der Definition 6.1 wird deutlich, dass nur b mit dem Ziel der Lösbarkeit des Gleichungssystems verändert wird. Das entspricht der Vermutung, dass nur der Vektor b fehlerhaft ist, die Matrix A jedoch mathematisch exakt vorliegt. Dass diese Vermutung bisweilen unrealistisch ist, wird bei einem Blick auf die möglichen Fehlerquellen sofort klar.

Nach [8, Seite 17], [44, Seite 30] treten im Allgemeinen folgende Fehler auf:

- Modellfehler: Es kommt ein mathematisches Modell zur Anwendung, das die reale Problemstellung nur genähert beschreibt.
- Modellvereinfachung: Motiviert durch einfachere Handhabung oder bessere Lösbarkeit werden bedeutsame Fakten des realen Problems bei der Modellbildung nicht berücksichtigt.
- Fehler in den Daten: Dies betrifft überwiegend den Vektor b . Genauigkeitsaussagen können im Allgemeinen aufgrund von Fachwissen oder auf empirischer Grundlage getroffen werden.

- Rundungsfehler

Rundungsfehlern ist durch die Wahl eines geeigneten numerischen Verfahrens zu begegnen, wie es z. B. Dinter in [8] beschreibt.

Fehler in den Daten drücken sich bei der überwiegenden Anzahl geodätischer Modelle durch Verfälschungen des Vektors b aus. Den Fehlern in den Daten trägt der Least-Squares-Ansatz in geeigneter Weise Rechnung, sofern zuverlässige Genauigkeitsaussagen über die Fehlersituation vorliegen und diese Fehler zufälliger Natur sind.

Modellfehlern und Fehlern durch Modellvereinfachung kann man durch den Least-Squares-Ansatz jedoch nicht wirksam begegnen. Bei Anwendung eines Least-Squares-Ansatzes werden solche Fehler bereits bei der Modellbildung verneint, da sie durch dieses Standardverfahren der Ausgleichsrechnung nicht berücksichtigt werden können. Streng genommen ist das eine falsche Annahme [8].

Die Überlegung, Fehler in der Designmatrix (also Modellfehler) zuzulassen, führt zum Total-Least-Squares-Ansatz.

Definition 6.2 (Total-Least-Squares-Problem). Es sei ein überbestimmtes Gleichungssystem $Ax \approx b$ mit m Gleichungen und n Unbekannten x gegeben. Die Total-Least-Squares-Methode erfüllt

$$\begin{aligned} \|[A; b] - [\hat{A}; \hat{b}]\|_F &\rightarrow \min \\ \text{und } [\hat{A}; \hat{b}] &\in \mathfrak{R}^{m \times (n+1)} \end{aligned} \quad (6.2)$$

wobei $\hat{b} \in R(\hat{A})$. Wenn dieses $[\hat{A}; \hat{b}]$ gefunden werden konnte, so wird jedes x , das eine Lösung der Gleichung darstellt, „Total-Least-Squares-Lösung“ genannt. Entsprechend ist $[\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}] = [A; b] - [\hat{A}; \hat{b}]$ die „Total-Least-Squares-Verbesserung“.

Man beachte, dass der Begriff „Verbesserung“ aus geodätischer Sicht irreführend ist, weil eine Verbesserung üblicherweise an die ursprünglichen Werte angebracht wird, um den Schätzwert (verbesserten Wert) zu erhalten. In der mathematischen Literatur zu TLS wird das jedoch umgekehrt gehandhabt.

Im Falle der Parameterschätzung möchte man also die unbekannt Parameter x bestimmen, die über die (linearisierte) Modellbildung A mit den m Beobachtungen b verknüpft sind. Es gilt [3, Seite 176], [12]

$$\tilde{A}x = \tilde{b}, \quad A = \tilde{A} + \Delta A \quad \text{und} \quad b = \tilde{b} + \Delta b \quad (6.3)$$

Unter der Annahme, dass A vollen Rang aufweist und alle $\Delta a_{i,j}$ bzw. Δb_i unkorreliert und gleich verteilt sind, lässt sich nachweisen, dass die TLS-Lösung \hat{x} die wahren Parameter „konsistent“ schätzt ($\hat{x} \rightarrow \tilde{x}$ für $m \rightarrow \infty$). Diese Aussage gilt für jede beliebige Art der Verteilung. Die LS-Methode ist unter obiger Fehlerannahme inkonsistent.

6.1.2 Berechnung der Lösung

Die Berechnung der Total-Least-Squares-Lösung beruht in weiten Teilen auf der Singulärwertzerlegung (siehe Kapitel 4.5).

Zunächst wird $Ax \approx b$ umgestellt [3, Seite 177], es ergibt sich

$$[A; b] \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} \approx 0 \quad (6.4)$$

Außerdem sei die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$ gegeben durch [12]

$$[A; b] = USV^T \quad (6.5)$$

mit den Unterteilungen

$$U = [U_1; U_2], \quad U_1 = [u_1, \dots, u_n], \quad U_2 = [u_{n+1}, \dots, u_m]$$

$$V = [v_1, \dots, v_{n+1}] = \begin{pmatrix} V_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \\ n & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} n \\ 1 \end{matrix} \quad (6.6)$$

$$S = \begin{pmatrix} S_1 & 0 \\ 0 & \zeta_{n+1} \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{m \times (n+1)}, \quad S_1 = \text{diag}(\zeta_1, \dots, \zeta_n) \in \mathfrak{R}^{n \times n}$$

$$\zeta_1 \geq \dots \geq \zeta_{n+1} \geq 0$$

Bemerkung. Es gilt generell $m > n$. Die Zahlen n und 1 an den Rändern von V beschreiben die Dimensionen der Teilmatrizen.

Wenn $\zeta_{n+1} \neq 0$ ist, dann hat $[A; b]$ den Rang $n + 1$. Folglich gibt es im Nullraum von S keinen Vektor, der nicht der Nullvektor ist. Damit ist das Gleichungssystem nicht lösbar, da die letzte Komponente des Parametervektors nach Gleichung (6.6) den Wert -1 annehmen muss. Es ist offensichtlich, dass eine Lösung nur dann gefunden werden kann, wenn der Rang von $[A; b]$ auf den Wert n reduziert wird. Unter den unendlich vielen Möglichkeiten muss die „optimale“ Lösung gefunden werden, also diejenige, die insgesamt die geringsten Korrekturen am System $[A; b]$ erfordert. Das Eckart-Young-Mirsky-Theorem (siehe Kapitel 4.6) stellt ein Maß und eine Anleitung zur Verfügung, wie diese optimale Lösung gefunden werden kann. Danach wird die Matrix vom Rang n , die der ursprünglichen Matrix $[A; b]$ am nächsten kommt, durch

$$[\hat{A}; \hat{b}] = U \hat{S} V^T \quad (6.7)$$

mit $\hat{S} = \text{diag}(\zeta_1, \dots, \zeta_n, 0)$

ermittelt. Der Aufwand beträgt nach Gleichung (4.51)

$$\min_{\text{Rang}([\hat{A}; \hat{b}])=n} \|[A; b] - [\hat{A}; \hat{b}]\|_F = \zeta_{n+1} \quad (6.8)$$

(siehe auch [3, Seite 178],[12]). Außerdem ist aus Gleichung (4.51) zu entnehmen, dass die entsprechende TLS-Verbesserung mittels

$$[A; b] - [\hat{A}; \hat{b}] = [\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}] = \zeta_{n+1}u_{n+1}v_{n+1}^T \quad (6.9)$$

berechnet werden kann. (Nach Kapitel 4.5 hat die TLS-Verbesserungs-Matrix aus Gleichung (6.9) den Rang 1.)

Nachdem die Matrix $[\hat{A}; \hat{b}]$ den Rang n , aber die Spaltendimension $n+1$ aufweist, ist die Gleichung $[\hat{A}; \hat{b}]\begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} = 0$ im Allgemeinen lösbar.

Der Nullraum von $[\hat{A}; \hat{b}]$ besteht aus genau dem Vektor v aus V , dessen zugehöriger Singulärwert zu Null gesetzt wurde. Zur Begründung beachte man zunächst, dass V eine orthogonale Matrix ist:

$$v_i^T v_j = 0 \quad \forall v \in V, i \neq j \quad (6.10)$$

Deshalb ist

$$\begin{aligned} [\hat{A}; \hat{b}]v_{n+1} &= U\hat{S}V^T v_{n+1} \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \zeta_i u_i v_i^T \right) v_{n+1} \\ &= \sum_{i=1}^n \zeta_i u_i v_i^T v_{n+1} \\ &= \sum_{i=1}^n \zeta_i u_i 0 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (6.11)$$

Also kann die TLS-Lösung erhalten werden, indem v_{n+1} skaliert wird, so dass die letzte Komponente von v_{n+1} den Wert -1 erhält:

$$\begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{-1}{v_{n+1,n+1}} v_{n+1} \quad (6.12)$$

(Voraussetzung ist, dass $v_{n+1,n+1} \neq 0$)

$$\hat{b} = \hat{A}\hat{x} = \frac{-1}{v_{n+1,n+1}} \hat{A} \begin{pmatrix} v_{1,n+1} \\ \vdots \\ v_{n,n+1} \end{pmatrix} \in R(\hat{A}) \quad (6.13)$$

Bemerkung. Wenn $[A; b]$ den Rang n aufweist, dann ist das Gleichungssystem bereits lösbar, und die Parameter können direkt berechnet werden [3, Seite 178].

Der folgende Satz charakterisiert die TLS-Lösung und gibt Bedingungen für die Existenz und die Eindeutigkeit einer Lösung an:

Satz 6.1 (Charakteristik der TLS-Lösung). Gegeben sei die SVD von $[A; b]$ mit den Singulärwerten ζ_i und die SVD von A mit den Singulärwerten γ_i . Wenn $\gamma_n > \zeta_{n+1}$, dann löst

$$[\hat{A}; \hat{b}] = U\hat{S}V^T \text{ mit } \hat{S} = \text{diag}(\zeta_1, \dots, \zeta_n, 0) \quad (6.14)$$

mit der entsprechenden Verbesserungsmatrix

$$[\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}] = [A; b] - [\hat{A}; \hat{b}] = \zeta_{n+1}u_{n+1}v_{n+1}^T \quad (6.15)$$

das TLS-Problem aus Definition 6.2. Der Vektor der Unbekannten

$$\hat{x} = \frac{-1}{v_{n+1,n+1}} \begin{pmatrix} v_{1,n+1} \\ \vdots \\ v_{n,n+1} \end{pmatrix} \quad (6.16)$$

existiert dann und ist die eindeutige Lösung von $\hat{A}x = \hat{b}$.

Die Bedingung $\gamma_n > \zeta_{n+1}$ sichert die Existenz und die Eindeutigkeit der Lösung. Die Eindeutigkeit folgt durch Anwendung von Satz 4.9: Wenn $\gamma_n > \zeta_{n+1}$ gilt, dann ist $\zeta_n \neq \zeta_{n+1}$. Also muss ζ_{n+1} ein einfacher Singulärwert sein. Dann hat aber auch der Nullraum von $[\hat{A}; \hat{b}]$ die Dimension 1, besteht folglich aus einem einzigen Vektor. Dieser Vektor ist nach (6.11) die einzige Lösung des Gleichungssystems $\hat{A}x = \hat{b}$. Die Existenz folgt aus Überlegungen zu einem Eigenwertproblem von $[A; b]$. Gleichung (6.16) zeigt, dass dann keine Lösung gefunden werden kann, wenn $v_{n+1,n+1} = 0$ ist. Wenn nun $[A; b]^T[A; b] \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} = \zeta_{n+1}^2 \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}$ wäre, dann würde $A^T A y = \zeta_{n+1}^2 y$ gelten. Das ist aber ausgeschlossen, weil γ_n^2 bereits der kleinste Eigenwert von $A^T A$ ist. Also kann die letzte Komponente von v nicht 0 sein und eine Lösung kann nach (6.16) angegeben werden.

6.1.3 Geometrische Interpretation

Interessante Einblicke in die TLS-Methode ergeben sich, wenn man sie aus geometrischer Sicht mit der LS-Methode vergleicht. Dabei kann man vom Spaltenraum oder vom Zeilenraum ausgehen.

Betrachtung des Spaltenraumes Abbildung 6.1 illustriert den Unterschied zwischen der LS-Lösung und der TLS-Lösung aus der Sicht des Spaltenraumes. Wie allgemein bekannt ist [8, 5, 19, 26], wird bei der LS-Lösung des Gleichungssystems der Vektor b so modifiziert, dass der entstehende Vektor b' im Spaltenraum von A liegt, also $Ax = b'$ lösbar ist. Geometrisch bedeutet das, dass der Vektor b in zwei zueinander senkrechte Komponenten b' und $r = Ax - b$ zerlegt wird,

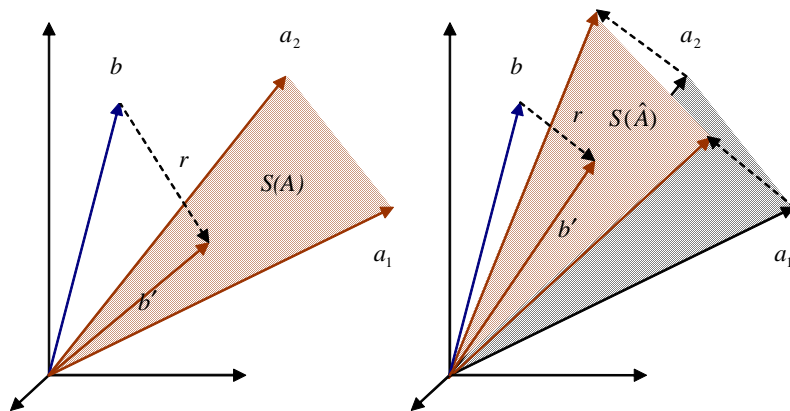


Abbildung 6.1: Vergleich von LS und TLS aus der Sicht des Spaltenraumes

wobei r senkrecht auf A steht. Diese Eigenschaft des Vektors r garantiert, dass seine Länge minimal wird. Bildlich gesprochen wird der Raum, der von den Spaltenvektoren von A bestimmt wird, festgehalten, und b wird darauf zu bewegt.

Bei der TLS-Lösung geht man nun nicht davon aus, dass man den Spaltenraum von A festhalten kann, denn er kann fehlerhaft sein. Stattdessen wird sowohl für b , als auch für jeden Spaltenvektor a_i von A ein Verbesserungsvektor Δa_i bzw. Δb geschätzt, und zwar so, dass die Länge aller Verbesserungsvektoren zusammen minimal ist. Betrachtet man nun die Berechnung aus der Sicht der Singulärwertzerlegung, so stellt man fest, dass eine Matrix Z durch die Rangreduzierung in zwei Komponenten \hat{Z} und ΔZ aufgeteilt wird, wobei die beiden Komponenten \hat{Z} und ΔZ senkrecht aufeinander stehen, weil $\hat{Z}^T \Delta Z = 0$ gilt. Berücksichtigt man ferner, dass der Rang von ΔZ den Wert 1 hat, so erkennt man, dass $\mathcal{S}(\hat{Z}) \perp \mathcal{S}(\Delta Z)$ ist und dass alle Spalten von ΔZ parallel zueinander sein müssen. Das spiegelt sich in Bild 6.1 wieder: Man sieht, dass alle Δa_i und Δb parallel zueinander sind und senkrecht auf dem Spaltenraum von \hat{A} stehen (siehe [12]).

Betrachtung des Zeilenraumes Ein sehr aufschlussreicher Einblick ergibt sich durch die Betrachtung aus der Sicht des Zeilenraumes. Auch hier sollen die Unterschiede anhand von Abbildung 6.2 verdeutlicht werden. Der Zeilenraum von $[A; b]$ ist der Raum, der von den Zeilenvektoren der Matrix aufgespannt wird. Es gibt zwar m Zeilenvektoren, aber nur maximal $n + 1$ davon können voneinander unabhängig sein. Diese linear unabhängigen Vektoren spannen den Zeilenraum auf. Wenn keine Fehler vorliegen, dann ist das Gleichungssystem $Ax = b$ lösbar, und der Zeilenraum ist n -dimensional. Wenn das System fehlerhaft ist, dann ist

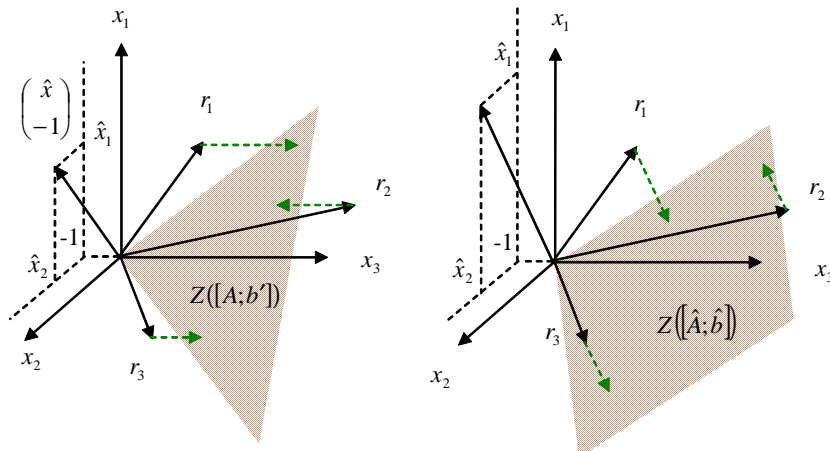


Abbildung 6.2: Vergleich von LS und TLS aus der Sicht des Zeilenraumes

dieser Raum $n + 1$ -dimensional und muss auf die Dimension n reduziert werden, damit eine Lösung gefunden werden kann.

Im Falle der LS-Lösung kann man aber lediglich die letzten Komponenten der Zeilenvektoren variieren, um $[A; b]$ in geeigneter Weise in den gewünschten Subraum zu überführen: Diese Komponenten entsprechen in ihrer Gesamtheit dem Vektor b . Deshalb sind die Verbesserungsvektoren für die Zeilenvektoren von $[A; b]$ auf Parallelen zur x_3 -Achse beschränkt. In gewisser Weise werden also die horizontalen Abstände zum Subraum minimiert. Die Lösung des Gleichungssystems ergibt sich dann aus dem Schnittpunkt der Orthogonalen auf den Zeilenraum von $[A; b']$ durch den Ursprung mit der Hyperebene $x_{n+1} = -1$.

Die TLS-Lösung wird ebenfalls durch den oben beschriebenen Schnittpunkt bestimmt. Allerdings ist die TLS-Methode nicht auf die jeweils letzten Komponenten der Zeilenvektoren beschränkt. Vielmehr können die Verbesserungsvektoren senkrecht zum Subraum $[\hat{A}; \hat{b}]$ gewählt werden [18, Seite 599]. Es können also die senkrechten Abstände zum Subraum minimiert werden. Selbstverständlich ist die Summe der Längen der Verbesserungsvektoren der TLS-Lösung kleiner als die der LS-Lösung, da diese nicht den Einschränkungen der LS-Lösung unterliegen.

6.1.4 Alternative TLS-Probleme

In dem bisher analysierten Ansatz ging man von einem Gleichungssystem der Art $Ax = b$ aus. Das Schätzen der Parameter x entspricht also der Festlegung einer linearen Beziehung des Vektors b zu den Spalten von A . Das wird durch den Wert

–1 in der Schreibweise

$$[A; b] \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} \approx 0 \quad (6.17)$$

deutlich.

Fasst man nun die Matrix $[A; b]$ zu einer beliebigen Matrix C zusammen und ersetzt den Vektor $\begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix}$ durch einen neuen Vektor y , so entsteht ein Gleichungssystem der Art

$$Cy \approx 0 \quad (6.18)$$

Da keine Komponente des Vektors y auf einen festen Wert gesetzt ist, wird durch das Schätzen von y ein etwas anderes Ziel als zuvor erreicht. Hier geht es primär um das Bestimmen einer linearen Beziehung der Spalten von C untereinander, wobei keine dieser Spalten wie in (6.17) eine Sonderstellung einnimmt. Das führt zu einem alternativen TLS-Problem:

Definition 6.3 (Alternatives TLS-Problem). Es sei

$$Cy \approx 0, \quad C \in \mathfrak{R}^{m \times n}, \quad y \in \mathfrak{R}^n \quad (6.19)$$

Das TLS-Problem erfüllt die Zielfunktion

$$\begin{aligned} \|C - \hat{C}\|_F &\rightarrow \min \\ \hat{C} &\in \mathfrak{R}^{m \times n}, \quad y \in \mathfrak{R}^n \end{aligned} \quad (6.20)$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} \hat{C}y &= 0 \\ y^T y &= 1 \end{aligned} \quad (6.21)$$

Die zweite Nebenbedingung schließt die triviale Lösung $y = 0$ aus, während die erste für die Singularität und damit für die Lösbarkeit des Gleichungssystems sorgt.

Die Berechnung von \hat{C} erfolgt entsprechend Kapitel 4.6 durch

$$\begin{aligned} \hat{C} &= C - u_n \zeta_n v_n^T \\ y &= v_n \end{aligned} \quad (6.22)$$

Die Bedingung $y^T y = 0$ ist erfüllt, da die Matrix V aus der Singulärwertzerlegung eine orthogonale Matrix ist. Damit ist jeder Vektor aus V ein Einheitsvektor, was der genannten Bedingung entspricht.

Bemerkung. Da die zweite Nebenbedingung lediglich die triviale Lösung $y = 0$ ausschließen soll, kann man sie ebenso gut durch eine andere Nebenbedingung ersetzen, die zu diesem Ziel führt. Folglich ist die Bedingung $y_n = -1$ zulässig. Ersetzt man noch C durch $[A; b]$, dann findet man das ursprüngliche TLS-Problem aus Definition 6.2 vor.

Dieses alternative TLS-Problem eignet sich zum Beispiel zur Bestimmung von Näherungslösungen im Bereich der Formanalyse. Wenn man nicht den einfachsten Fall der ausgleichenden Geraden verwendet, dann handelt es sich fast immer um nichtlineare Least-Squares-Probleme.

Definition 6.4 (Nichtlineare Ausgleichungsprobleme). Gegeben sei ein Gleichungssystem von nichtlinearen Gleichungen

$$F(u) = \begin{pmatrix} f_1(u) \\ \vdots \\ f_m(u) \end{pmatrix} \approx 0, \quad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \quad m > n \quad (6.23)$$

Die nichtlineare Ausgleichung führt zur Bestimmung eines Vektors \hat{u} , so dass

$$\sum_{i=1}^m f_i(u)^2 \rightarrow \min \quad (6.24)$$

Die Lösung dieses nichtlinearen Problems erfolgt durch eine iterative Lösung einer Folge von linearen Problemen. Dabei wird die Lösung \hat{u} durch $\tilde{u} + \Delta u$ ausgedrückt, wobei \tilde{u} eine Näherung von \hat{u} ist. Die Gleichungen aus (6.23) werden durch eine Taylor-Linearisierung in die Form

$$F(\tilde{u} + \Delta u) \cong F(\tilde{u}) + J(\tilde{u})\Delta u \approx 0 \quad (6.25)$$

überführt, wobei J die Jakobi-Matrix ist. Die Gleichung (6.25) ist folglich ein lineares System, dessen Lösung zu einer neuen, besseren Näherung $\tilde{u}_{i+1} = \tilde{u}_i + \Delta u_i$ führt. Das Gleichungssystem wird nun an der Stelle dieser neuen Näherung entsprechend Gleichung (6.25) linearisiert, und es wird eine nochmals verbesserte Näherung berechnet. Diese Sequenz wird so lange wiederholt, bis der Vektor Δu hinreichend klein ist.

Die Schwierigkeit liegt generell in der Festlegung eines guten Startvektors \tilde{u}_0 . Ist diese Näherung nicht genügend nahe an der zu bestimmenden Lösung \hat{u} , so werden unnötig viele Schritte benötigt. Im Extremfall kann es sein, dass die Sequenz nicht konvergiert und deshalb keine Lösung \hat{u} ermittelt werden kann. Die Festlegung einer guten Näherung ist jedoch in vielen Fällen alles andere als trivial. Bei einfachen Formen wie beispielsweise einem ausgleichenden Kreis kann man aus den ersten drei Punkten über Methoden der analytischen Geometrie zu einer guten Näherung kommen, sofern keine groben Fehler in diesen Punkten vorhanden sind. Schon bei einem ausgleichenden Zylinder ist das ungleich schwieriger.

In parametrischer Form lässt sich ein Zylinder durch die Gleichungen

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} + t_i \begin{pmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} + R \begin{pmatrix} q_{x_i} \\ q_{y_i} \\ q_{z_i} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad 1 \leq i \leq n \quad (6.26)$$

mit den Nebenbedingungen:

$$\|r\|_2 = 1, \quad p \perp r,$$

$$\|q_i\|_2 = 1, \quad q_i \perp r$$

beschreiben [4]. r ist der Einheitsvektor, der die Richtung der Mittelachse des Zylinders festlegt. R ist der Zylinderradius. p ist der Vektor zu dem Punkt auf der Mittelachse, der dem Ursprung am nächsten ist. Es ergeben sich insgesamt $7 + 4n$ Parameter (n sei die Anzahl der Punkte):

$$\begin{aligned} & p_x, p_y, p_z, r_x, r_y, r_z, R \\ & t_i, q_{x_i}, q_{y_i}, q_{z_i} \end{aligned} \quad (6.27)$$

Es ist offensichtlich nicht einfach, diese Parameter aus einer Punktwolke zu ermitteln, wenn die Lage des Zylinders noch völlig unbekannt ist.

Das alternative TLS-Problem ermöglicht es, auf einfache Weise erste Näherungen für diese Parameter zu erhalten. Zunächst wird eine allgemeine Quadrik im \mathbb{R}^3 angesetzt [4], [9], [43], da ein Zylinder ein Spezialfall einer solchen Quadrik ist:

$$(x_i \quad y_i \quad z_i) \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} + 2 \underbrace{(b_1 \quad b_2 \quad b_3)}_{b^T} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} + c = 0 \quad (6.28)$$

Die Gleichung (6.28) lässt sich auch durch

$$\begin{aligned} & a_{11}x_i^2 + a_{22}y_i^2 + a_{33}z_i^2 + \\ & \quad 2a_{12}x_iy_i + 2a_{13}x_iz_i + 2a_{23}y_iz_i + \\ & \quad 2b_1x_i + 2b_2y_i + 2b_3z_i + c = 0 \end{aligned} \quad (6.29)$$

oder

$$\begin{aligned} & Bu = 0, \\ & B = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 2x_i & 2y_i & 2z_i & 1 & x_i^2 & y_i^2 & z_i^2 & 2x_iz_i & 2x_iz_i & 2y_iz_i \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \\ & u = (b_1 \quad b_2 \quad b_3 \quad c \quad a_{11} \quad a_{22} \quad a_{33} \quad a_{12} \quad a_{13} \quad a_{23})^T \end{aligned} \quad (6.30)$$

ausdrücken.

Die Minimierung der Abstände der Punkte zu dieser allgemeinen Form, auch Minimierung der geometrischen Distanz genannt [14], setzt wiederum voraus, dass Näherungswerte für die Unbekannten, also für die Elemente von u bekannt sind.

Diese Näherungswerte kann die algebraische Distanz liefern. Nach [14] spricht man von algebraischer Ausgleichung, wenn man die Parameter eines überbestimmten Gleichungssystems $F(x) = 0$ bestimmt, indem man die Widersprüche jeder Gleichung im Least-Squares-Sinne minimiert.

Der vorliegende Fall ist nun ein Problem nach Definition 6.3, denn aufgrund der Unvermeidbarkeit von Fehlern bei der Punktbestimmung kann man nicht davon ausgehen, dass Gleichung (6.30) widerspruchsfrei lösbar ist. Vielmehr liegt ein System der Art

$$Bu = r \approx 0 \quad (6.31)$$

vor. Die Parameter u können jetzt, wie bei Definition 6.3 beschrieben, durch eine Singulärwertzerlegung elegant bestimmt werden.

Da nun Näherungslösungen für die Matrix A und den Vektor b der Quadrik bekannt sind, kann man die Eigenwerte und Eigenvektoren von A berechnen und zusammen mit b auf die Parameter des Zylinders nach Gleichung (6.26) schließen.

Der Nachteil der Vorgehensweise ist die Abhängigkeit der Norm $\|u\|_2 = 1$ von Transformationen der Koordinaten im Raum. Das kann aber durch eine geeignete Änderung der Nebenbedingung umgangen werden.

6.2 Erweiterungen des Classical TLS

In Satz 6.1 wird die Bedingung $\gamma_n > \zeta_{n+1}$ für ein lösbares und eindeutiges TLS-Problem erwähnt. Es wurde der Zusammenhang

$$\gamma_n > \zeta_{n+1} \Leftrightarrow \zeta_n > \zeta_{n+1} \text{ und } v_{n+1,n+1} \neq 0 \quad (6.32)$$

hergeleitet.

Wenn jedoch $\zeta_n = \zeta_{n+1}$ gilt, dann kann das TLS-Problem aus Definition 6.2 immer noch eine Lösung haben, die jedoch nicht eindeutig sein muss. Stattdessen ist jede Linearkombination der Vektoren v_{p+1}, \dots, v_{n+1} (für $\zeta_{p+1}, \dots, \zeta_{n+1}$, $p < n$ und $\zeta_p > \zeta_{p+1}$) eine Lösung des TLS-Problems, sofern man diese Linearkombination in die Form $\begin{pmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{pmatrix}$ bringen kann. Das ist immer der Fall, wenn die letzte Komponente der Linearkombination $\neq 0$ ist.

Wenn $\zeta_n > \zeta_{n+1}$, aber $v_{n+1,n+1} = 0$ gilt, dann kann keine Lösung des TLS-Problems gefunden werden, weil der Vektor v_{n+1} nicht durch Skalieren in die Form $\begin{pmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{pmatrix}$ überführt werden kann. Dieser Gedanke lässt sich verallgemeinern: Wenn $\zeta_p > \zeta_{p+1}, \dots, \zeta_{n+1}$, $p < n$ und $v_{n+1,i} = 0$ für alle $i = p+1, \dots, n+1$ gilt, dann

kann keine Linearkombination der entsprechenden Vektoren v gefunden werden, deren letzte Komponente $\neq 0$ ist [3]. Folglich gibt es keine Lösung der Form $\begin{pmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{pmatrix}$; das klassische TLS-Problem ist in diesem Fall nicht lösbar. In englischsprachiger Literatur bezeichnet man diese Probleme als „nongeneric“, übersetzt „spezifisch“. Spezifische TLS-Probleme können auftreten, wenn A singulär (oder beinahe singulär) ist, also $\gamma_n \approx 0$ gilt. Dann sind zwei Vorgehensweisen möglich: Entweder man eliminiert in geeigneter Weise Spalten aus der Matrix A und überführt sie so in eine reguläre Matrix A' . Anschließend kann man das Problem $A'x \approx b$ lösen und erhält für die verbliebenen Parameter verlässliche Schätzungen. Diese Möglichkeit der Lösung von spezifischen TLS-Problemen kommt jedoch für viele praktische Probleme nicht in Frage, weil man meist nicht die Möglichkeit hat, einzelne Parameter als unbedeutend und damit als eliminierbar zu deklarieren. Oder man führt zusätzliche Bedingungen ein, um das TLS-Problem lösbar zu machen, wie im folgenden Kapitel ausgeführt wird.

Ein weiterer Grund für spezifische TLS-Probleme können große Singulärwerte $\gamma_n \approx \zeta_{n+1}$ sein. In diesem Fall liegt der Vektor b nicht nahe am Spaltenraum von A , sondern tendiert eher dazu, senkrecht zu den Spaltenvektoren von A zu stehen. Das bedeutet allerdings, dass eine völlig unpassende Modellierung gewählt wurde, weil b offensichtlich nicht mit A korreliert. In diesem Fall ist das gesamte Problem neu zu formulieren; die Berechnung einer Lösung ist nicht sinnvoll.

In diesem Kapitel werden Erweiterungen des klassischen TLS-Problems eingeführt und diskutiert:

- Es wird gezeigt, wie eine optimale Lösung (gemessen an der Norm des Lösungsvektors) gefunden wird, wenn die Lösung des TLS-Problems nicht eindeutig ist.
- Im Falle spezifischer TLS-Probleme wird der Ansatz zusätzlicher Bedingungen vorgestellt, um das System lösbar zu machen und gleichzeitig eine optimale Lösung im Sinne von Definition 6.2 zu erhalten.
- Außerdem wird erläutert, wie man ein gemischtes TLS-Problem berechnen kann, bei dem eine frei wählbare Anzahl von Spalten von A als fehlerfrei deklariert, die entsprechend nicht verbessert werden.

Schließlich wird ein Algorithmus vorgestellt, der für die Berechnung aller Erweiterungen geeignet ist.

6.2.1 Mehrdeutige Lösung

Die Lösung des TLS-Problems aus Definition 6.2 ist immer dann nicht eindeutig, wenn der kleinste Singulärwert aus der Zerlegung nach Kapitel 4.5 mehrfach

auftritt [3]:

$$\zeta_p > \zeta_{p+1} = \dots = \zeta_{n+1}, \quad p < n \quad (6.33)$$

In der Tat folgt aus 6.2 und 4.10, dass jede Linearkombination $r = \sum_{i=p+1}^{n+1} a_i v_i$, $\|r\|_2 = 1$ der Vektoren v_i , $p+1 \leq i \leq n+1$, deren letzte Komponente nicht null ist, zur Lösung des Total-Least-Squares-Problems verwendet werden kann. In jedem dieser Fälle ist nach ([49], [3, Seite 178])

$$[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}] = [A; b] r r^T \quad (6.34)$$

und

$$\|[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}]\|_F^2 = \zeta_{n+1}^2 \quad (6.35)$$

Gleichung (6.34) stellt nach Definition 6.2 eine TLS-Verbesserung dar, sofern die letzte Komponente von r nicht verschwindet. Die Lösung \hat{x} erhält man durch eine Skalierung von r :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{pmatrix} &= -\frac{1}{r_{n+1}} r \\ \Rightarrow \hat{x} &= -\frac{1}{r_{n+1}} \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.36)$$

Es gibt demnach unendlich viele Lösungen für das TLS-Problem, wenn der Fall $\zeta_p > \zeta_{p+1}, \dots, \zeta_{n+1}$, $p < n$ vorliegt [18]. Die *optimale* Lösung ist nun diejenige, deren Norm am kleinsten ist. Dazu wird zunächst der Einheitsvektor r aufgespalten.

$$r = \begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix} \text{ mit } \|r\|_2 = 1, \quad z = \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix}, \quad \gamma = r_{n+1} \quad (6.37)$$

Wenn $\gamma \neq 0$ ist, dann lässt sich die Norm von \hat{x} leicht berechnen:

$$\hat{x} = -\frac{z}{\gamma} \Rightarrow \|\hat{x}\|_2 = \frac{\sqrt{1 - \gamma^2}}{\gamma} \quad (6.38)$$

Da $|\gamma| < 1$, führt die Forderung nach Minimierung von $\|\hat{x}\|_2$ zur Maximierung von γ . Es muss also die Linearkombination der Vektoren v_i , $p+1 \leq i \leq n+1$ mit dem Betrag 1 gefunden werden, deren letzte Komponente r_{n+1} maximal ist. Diese optimale Lösung kann mit Hilfe einer geeigneten Householdermatrix Q gefunden werden ([18, Seite 598], [3, Seite 178]):

$$[v_{p+1}, \dots, v_{n+1}] Q = \begin{pmatrix} \star & z \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{matrix} n \\ 1 \\ n-p & 1 \end{matrix} \quad (6.39)$$

Dazu werden die Vektoren v_i , $p + 1 \leq i \leq n + 1$ zu einer Matrix zusammengefasst. Anschließend wird diese Matrix durch die Householdertransformation in eine Matrix gleicher Norm überführt, so dass deren unterste Zeile ein Vielfaches des Einheitsvektors e_{n-p+1} ist. Damit kann $r = \begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix}$ nur der Einheitsvektor aus $\mathcal{S}([v_{p+1}, \dots, v_{n+1}])$ mit größtmöglicher letzter Komponente sein. Da die Lösung \hat{x} aus einer Skalierung von $r = \begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix}$ hervor geht, muss sie nach Gleichung (6.38) unter allen möglichen Lösungen diejenige mit der kleinsten Norm sein. Die Verbesserungsmatrix wird anschließend nach Gleichung (6.34) ermittelt.

Nach Definition 6.2 ist noch zu beweisen, dass diese Lösung die Forderung nach minimaler Norm der Verbesserungsmatrix erfüllt. Dazu multipliziert man die Singulärwertzerlegung aus Satz 4.7 mit geeigneten orthogonalen Matrizen

$$\begin{pmatrix} I_p & 0 & 0 \\ 0 & Q & 0 \\ 0 & 0 & I_{m-n-1} \end{pmatrix}^T U^T[A; b]V \begin{pmatrix} I_p & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} = S \quad (6.40)$$

Dadurch werden die Vektoren u_i und v_i , $p + 1 \leq i \leq n + 1$ unter Beibehaltung der Norm transformiert. Insbesondere wird V in eine Matrix entsprechend Gleichung (6.39) umgewandelt. Durch die Multiplikation mit orthogonalen Matrizen ändert sich jedoch das Singulärwert-Spektrum S von $[A; b]$ nicht, insbesondere bleibt der kleinste Singulärwert ζ_{n+1} erhalten, der nach der dyadischen Dekomposition zusammen mit u_{n+1} und $v_{n+1} = r = \begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix}$ ein Tripel bildet. Somit ist nach Kapitel 4.5 nachgewiesen, dass für die Frobenius-Norm der Verbesserungsmatrix $\|[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}]\|_F^2 = \zeta_{n+1}^2$ gilt, was nach Kapitel 4.6 die minimale Norm der Verbesserungsmatrix sein muss [49].

Bemerkung. Wie in Kapitel 4.4 dargelegt, werden Householdermatrizen gewöhnlich verwendet, um einzelne Spalten einer Matrix auf ein Vielfaches des Einheitsvektors zu setzen:

$$Q \begin{pmatrix} \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \star & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & \star & \star \end{pmatrix} \quad (6.41)$$

Der Householdervektor ergibt sich aus der Spalte, die auf die gewünschte Form transformiert werden soll, indem man den Betrag der Spalte von der dem Index des Einheitsvektors entsprechenden Komponenten abzieht: $v = a_i - \|a_i\|_2 e^{(j)}$.

Im vorliegenden Fall soll jedoch so transformiert werden, dass eine einzelne Zeile diese Form annimmt. Dazu transponiert man die Matrix zunächst

$$A = \begin{pmatrix} \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} \Rightarrow A^T = \begin{pmatrix} \star & \star & a_{n,1} \\ \star & \star & \cdots \\ \star & \star & a_{n,n} \end{pmatrix} \quad (6.42)$$

Die Matrix A^T kann man dann durch Multiplikation mit einer Householdermatrix

transformieren

$$A'^T = SA^T = S \begin{pmatrix} \star & \star & a_{n,1} \\ \star & \star & \cdots \\ \star & \star & a_{n,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \star & \star & 0 \\ \star & \star & 0 \\ \star & \star & a_{n,n} \end{pmatrix} \quad (6.43)$$

wobei der Householdervektor v nun durch $v = a - \|a\|e^{(n)}$ gegeben ist. Das gewünschte Ergebnis könnte man anschließend durch Rücktransponieren von A'^T erhalten. Wegen

$$\begin{aligned} A'^T &= SA^T \\ \Rightarrow A' &= AS^T = AS \end{aligned} \quad (6.44)$$

kann man auch die Householdermatrix von rechts multiplizieren und kommt ohne Transformation zum gewünschten Resultat.

Die oben beschriebene Transformation ist einfach zu realisieren. Die Lösung \hat{x} kann aber ebenso direkt aus den Vektoren v_i , $p+1 \leq i \leq n+1$ berechnet werden.

Satz 6.2 (Geschlossener Ausdruck für die Minimum-Norm-Lösung). Es sei (6.5) die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$ und $\zeta_p > \zeta_{p+1} = \dots = \zeta_{n+1}$, $p < n$. Wenn es mindestens ein $v_{n+1,i} \neq 0$, $p+1 \leq i \leq n+1$ gibt, dann ist die TLS-Lösung mit der kleinsten Norm durch

$$\hat{x} = - \frac{\sum_{i=p+1}^{n+1} v_{n+1,i} \begin{pmatrix} v_{1,i} \\ \vdots \\ v_{n,i} \end{pmatrix}}{\sum_{i=p+1}^{n+1} v_{n+1,i}^2} \quad (6.45)$$

gegeben (für den Beweis siehe [49]).

Bei der praktischen Anwendung der Aussagen dieses Kapitels ist zu beachten, dass Singulärwerte numerisch gesehen oft verschieden sein werden, auch wenn sie eigentlich identisch sein sollten. Dieser Sachverhalt ergibt sich sowohl durch das Vorhandensein von Fehlern in den Daten als auch durch die beschränkte Rechengenauigkeit. Um dem Rechnung zu tragen, definiert man eine Schranke ϵ und betrachtet alle Singulärwerte ζ_i mit $|\zeta_i - \zeta_{n+1}| < \epsilon$ als gleich. Diese bilden den Block der kleinsten Singulärwerte. Die Lösung ergibt sich dann wie oben beschrieben.

6.2.2 Spezifische Probleme

Eine Lösung muss nicht immer erhältlich sein, was ein einfaches Beispiel aus [18, Seite 595] zeigt. Wie bereits angesprochen wurde, wird man keine Lösung im Sinne von Definition 6.2 finden können, wenn $\zeta_p > \zeta_{p+1} = \dots = \zeta_{n+1}$, $p < n$ und $v_{n+1,i} = 0$ für alle $i = p + 1 \leq i \leq n + 1$ gilt. In einem solchen Fall spricht man von einem spezifischen TLS-Problem, dessen Eigenschaften und Lösung nun untersucht werden sollen. Zunächst werden einige wichtige Zusammenhänge zwischen den Elementen der Singulärwertzerlegung bei spezifischen TLS-Problemen festgehalten:

Satz 6.3 (Eigenschaften des spezifischen TLS-Problems). Es sei $A = U'S'V'^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $U' = [u'_1, \dots, u'_m]$, $V' = [v'_1, \dots, v'_n]$ und $S = \text{diag}(\zeta'_1, \dots, \zeta'_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\zeta'_1 \geq \dots \geq \zeta'_n$ die Singulärwertzerlegung von A und (6.5) die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$. Außerdem sei b' die senkrechte Projektion von b auf den Spaltenraum $\mathcal{S}(A)$ und $[\hat{A}; \hat{b}]$ nach Gleichung (6.34) oder Gleichung (6.7). Weiterhin seien $V'(\zeta_j)$ und $U'(\zeta_j)$ die Subräume aus der SVD von A , die ζ_j zugeordnet werden. Dann gelten nach [49, 51] die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned}
 v_{n+1,j} = 0 &\Leftrightarrow v_j \perp \begin{pmatrix} v' \\ 0 \end{pmatrix}, v' \in V'(\zeta_j) \\
 v_{n+1,j} = 0 &\Rightarrow \zeta_j = \zeta'_k, k = \{j - 1, j\} \\
 v_{n+1,j} = 0 &\Rightarrow b \perp u', u' \in U'(\zeta_j) \\
 v_{n+1,j} = 0 &\Leftrightarrow u_j = u', u' \in U'(\zeta_j) \\
 v_{n+1,j} = 0 &\Rightarrow b' \perp u', u' \in U'(\zeta_j) \\
 v_{n+1,j} = 0 &\Rightarrow \hat{b} \perp u', u' \in U'(\zeta_j)
 \end{aligned} \tag{6.46}$$

Dieser Satz ist grundlegend für das Verständnis des spezifischen TLS-Problems. Es wurde bereits gezeigt, dass für den Fall $\zeta_n > \zeta_{n+1}$ und $v_{n+1,n+1} = 0$ keine Lösung gefunden werden kann. Nach (6.46) gilt dann

$$\begin{aligned}
 \zeta_{n+1} = \zeta', u_{n+1} = u', v_{n+1} = \begin{pmatrix} v'_n \\ 0 \end{pmatrix} \\
 b \perp u'_n, b' \perp u'_n, \hat{b} \perp u'_n
 \end{aligned} \tag{6.47}$$

gilt. Wendet man Gleichung (6.47) auf Gleichung (6.9) an, so erhält man

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}; \hat{b}] &= [A; b] - [\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}] \\
 &= [A; b] - \zeta_{n+1} u_{n+1} v_{n+1}^T \\
 &= \left(\sum_{i=1}^n \zeta'_i u'_i v_i{}^T; b \right) - \zeta'_n u'_n (v_n{}^T; 0) \\
 &= \left(\sum_{i=1}^{n-1} \zeta'_i u'_i v_i{}^T; b \right)
 \end{aligned} \tag{6.48}$$

(siehe [5, Seite 44]). Gleichung (6.48) besagt, dass bei der Anwendung der klassischen Lösungsstrategie nur die Matrix A verändert wird. Die Rangreduktion des gesamten Systems wird demnach allein durch eine Rangreduktion von A erfüllt, während b unverändert bleibt. Da nun $\text{Rang}(\hat{A}) = n - 1 < \text{Rang}([\hat{A}; \hat{b}]) = n$ gilt, kann \hat{b} nicht im Spaltenraum $\mathcal{S}(\hat{A})$ liegen. Somit kann durch Gleichung (6.48) keine Lösung nach Definition 6.2 gefunden werden.

Stattdessen wird eine lineare Beziehung der Spalten von A untereinander geschätzt und nicht die eigentlich gefragte lineare Beziehung zwischen A und b . Das wird besonders durch Anwendung von Satz 6.3 deutlich:

$$\begin{aligned} [\hat{A}; \hat{b}]v_{n+1} = 0 &\Rightarrow \hat{A}v'_n = 0 \\ [A; b]v_{n+1} = \zeta_{n+1}u_{n+1} &\Rightarrow Av'_n + 0 \cdot b = Av'_n = \zeta'_n u'_n \end{aligned} \quad (6.49)$$

Man hat nun zwei Möglichkeiten, um dennoch zu einer Schätzung des gesamten linearen Zusammenhangs zu gelangen:

Man kann aus einer Linearkombination der v -Vektoren aus der Singulärwertzerlegung einen Einheitsvektor erzeugen, dessen letzte Komponente ungleich null ist und der trotzdem eine möglichst kleine TLS-Verbesserung erlaubt. Ein solcher Vektor ist zum Beispiel durch

$$v = \epsilon v_n + \sqrt{1 - \epsilon^2} v_{n+1} \quad (6.50)$$

gegeben. Berechnet man $[\hat{A}; \hat{b}]$ nach Gleichung (6.34) aus diesem Vektor v , so wird $\hat{b} \notin \mathcal{S}(\hat{A})$ gelten. Für die Frobenius-Norm der TLS-Verbesserung gilt jedoch

$$\|[\hat{A}; \hat{b}]\|_F = \sqrt{\epsilon^2 \zeta_n^2 + (1 - \epsilon^2) \zeta_{n+1}^2} \quad (6.51)$$

Damit kann aber die Forderung nach minimaler Norm der Verbesserungen nicht erfüllt werden, weil dafür ϵ so klein wie möglich sein müsste.

Da diese Lösung den Bedingungen nach Definition 6.2 offensichtlich nicht genügen kann, ist es besser, geeignete Zusatzbedingungen einzuführen, um der Formulierung des TLS-Problems gerecht zu werden. Betrachtet man die Vektoren v_i mit $v_{n+1,i} = 0$, $i = p + 1, \dots, n + 1$ und $\zeta_p > \zeta_{p+1} = \dots = \zeta_{n+1}$, $p < n$, dann kann man aus Satz 6.3 schließen, dass $b \perp u'_{i-1} = u_i$ gilt. Anders ausgedrückt gibt es bereits im ursprünglichen System keinen Zusammenhang zwischen A und dem Beobachtungsvektor b in der Richtung von u_i . Da es aber um die Bestimmung eines linearen Zusammenhangs zwischen den Spalten von A und dem Vektor b geht, erscheint es besser, die Richtung entlang u_i zu unterdrücken, als eine Lösung in dieser Richtung zu erzwingen. Anderenfalls würde man durch die TLS-Lösung einen Zusammenhang simulieren, der nicht vorhanden ist. Also wird durch die Zusatzbedingungen

$$\begin{pmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{pmatrix} \perp v_i \quad (6.52)$$

garantiert, dass die Schätzung $\hat{b} \perp u_i$ ist.

Bemerkung. Die Vektoren v_i mit der oben beschriebenen Eigenschaft und kleinem ζ nennt man auch engl. „nonpredictive multicollinearities“, weil sie anzeigen, dass manche Spalten in A fast linear abhängig sind und gleichzeitig aufgrund des kleinen Singulärwertes wenig zur Voraussage von b beitragen.

Aufgrund der oben erläuterten Zusammenhänge wird das spezifische TLS-Problem wie folgt definiert:

Definition 6.5. Es sei das Gleichungssystem $Ax \approx b$ mit m Gleichungen und n Unbekannten gegeben. Weiterhin sei Gleichung (6.5) die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$. Das spezifische TLS-Problem erfüllt

$$\|[A; b] - [\hat{A}; \hat{b}]\|_F \rightarrow \min \quad (6.53)$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} \hat{b} &\in \mathcal{S}(\hat{A}), [\hat{A}; \hat{b}]v_i = 0 \\ \text{wobei } \max_{v_{n+1,p} \neq 0} p &< i < n + 1 \end{aligned} \quad (6.54)$$

Wenn ein entsprechendes $[\hat{A}; \hat{b}]$ vorliegt, dann wird jedes x , das

$$\hat{A}x = \hat{b} \quad (6.55)$$

löst, eine spezifische TLS-Lösung genannt.

$$[\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}] = [A; b] - [\hat{A}; \hat{b}] \quad (6.56)$$

ist die entsprechende TLS-Verbesserung.

Der Lösungsweg ergibt sich in eleganter Weise aus der dyadischen Dekomposition der Singulärwertzerlegung. Wie aus (6.5) ersichtlich ist, sucht die TLS-Lösung im $(n + 1)$ -dimensionalen Raum $[A; b]$ nach einer Näherung vom Rang n , so dass die vorzunehmenden Verbesserungen (gemessen nach der Frobenius-Norm) minimal sind und gleichzeitig $[\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}]v_i = 0$, $i = p + 1, \dots, n + 1$ gilt. Die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$ kann man durch

$$[A; b] = \sum_{i=1}^p \zeta_i u_i v_i^T + \sum_{i=p+1}^{n+1} \zeta_i u_i v_i^T \quad (6.57)$$

ausdrücken. Da die Nebenbedingungen (6.57) erfüllt sein sollen, muss die Näherung aus

$$[\hat{A}; \hat{b}] = C + \sum_{i=p+1}^{n+1} \zeta_i u_i v_i^T \quad (6.58)$$

zusammengesetzt sein und den Rang n besitzen. Deshalb ist C eine Matrix vom Rang $p - 1$, die der Matrix $[A; b]_p = \sum_{i=p+1}^{n+1} \zeta_i u_i v_i^T$ am nächsten kommt. Nach Satz 4.10 ist die gesuchte Matrix

$$C = \sum_{i=i}^{p-1} \zeta_i u_i v_i^T \quad (6.59)$$

und entsprechend

$$[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}] = \zeta_p u_p v_p^T \quad (6.60)$$

Die Schätzung \hat{b} muss im Spaltenraum $\mathcal{S}(\hat{A})$ liegen, da v_p im Nullraum von $[\hat{A}; \hat{b}]$ liegt und $v_{n+1,p} \neq 0$ ist. Die Lösung \hat{x} erhält man auf dem bereits beschriebenen Weg durch Skalierung von v_p , so dass die letzte Komponente zu -1 wird.

Satz 6.4 (Lösung des spezifischen TLS-Problems). Es sei (6.5) die Singulärwertzerlegung von $[A; b]$. Weiterhin gelte $v_{n+1,i} = 0$ für alle $i = p + 1 \leq \dots \leq n + 1$, $p < n$ und $\zeta_{p-1} > \zeta_p$, $v_{n+1,p} \neq 0$. Dann gilt

$$[\hat{A}; \hat{b}] = U \hat{S} V^T \quad (6.61)$$

mit $\hat{S} = \text{diag}(\zeta_1, \dots, \zeta_{p-1}, 0, \zeta_{p+1}, \dots, \zeta_{n+1})$

und

$$[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}] = \zeta_p u_p v_p^T \quad (6.62)$$

bzw.

$$\hat{x} = -\frac{1}{v_{n+1,p}} \begin{pmatrix} v_{1,p} \\ \vdots \\ v_{n,p} \end{pmatrix} \quad (6.63)$$

existiert und ist die einzige Lösung des spezifischen TLS-Problems aus Definition (6.5).

(siehe auch [3, Seite 179]). $\zeta_{p-1} > \zeta_p$ ist keine Einschränkung der Allgemeinheit. Wenn $\zeta_{p-1} = \zeta_p$ ist, dann gibt es immer noch eine Lösung, sie wird nur nicht eindeutig sein. Das ist immer dann der Fall, wenn ζ_p ein mehrfacher Singulärwert ist, also wenn $\zeta_{p-r+1} = \dots = \zeta_p$ gilt. Ist man in der Lage, einige Vektoren v_i , $i = p - r + 1, \dots, p$ mit $v_{n+1,i} \neq 0$ identifizieren, dann kann man die Lösung kleinster Norm nach Kapitel 6.2.1 aus dem Raum $[v_{p-r+1}, \dots, v_p]$ ermitteln.

Das Beispiel zu Gleichung (6.50) eignet sich, um die Eigenschaften des spezifischen TLS-Problems kurz zusammenzufassen: Es sei $v_{n+1,j} = 0; j = p + 1, \dots, n + 1$, $p \leq n$, $v_{n+1,p} \neq 0$ und $\zeta_{p-1} > \zeta_p$. Dann kann man die Lösung nach Gleichung (6.63) durch

$$\hat{x} = -\frac{1}{v_{n+1,p}} \begin{pmatrix} v_{1,p} \\ \vdots \\ v_{n,p} \end{pmatrix} \quad (6.64)$$

berechnen. Die TLS-Verbesserung ist $[\Delta\hat{A}; \Delta\hat{b}] = \zeta_p u_p v_p^T$ und hat die Frobenius-Norm ζ_p . Es kann ohne weiteres eine andere Lösung gefunden werden, die zu einer kleineren Verbesserung führt: Wenn man einen Vektor v nach Gleichung (6.50) bestimmt, dann wird die Norm der TLS-Verbesserung immer zwischen ζ_n und ζ_{n+1} liegen und damit kleiner sein als diejenige des spezifischen TLS-Problems. Sie ist jedoch nicht geeignet, denn wie man sehen konnte, werden Zusammenhänge zwischen A und b eingeführt, die im Ursprungssystem gar nicht vorhanden waren. Die Lösung sieht also vordergründig besser aus, ist aber bei genauerem Hinsehen schon vom Ansatz her falsch.

6.2.3 Gemischte LS-TLS-Probleme

Alle bisher vorgestellten Varianten von TLS-Problemen haben die Eigenschaft, dass sämtliche Spalten in A als fehlerhaft betrachtet werden. Dementsprechend ergeben sich für alle Elemente in der Matrix $[A; b]$ Verbesserungen. Es sind jedoch auch Probleme denkbar, in denen manche Spalten exakt bekannt sind (siehe [7], [49], [3]). Ein ganz einfaches Problem dieser Sorte ist das Modell

$$a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_n = b \quad (6.65)$$

Die Gesamtmatrix $[A; b]$ hat hier die Gestalt

$$[1; A; b] \begin{pmatrix} a_0 \\ x \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (6.66)$$

Die erste Spalte der Matrix bezieht sich auf a_0 . Bei der Festlegung dieser Spalte kann nur der Wert 1 in Frage kommen; es gibt keinen Spielraum für Unsicherheit. Folglich erscheint es nicht ratsam, Verbesserungen für diese Spalte zu schätzen.

Zur Behandlung von TLS-Problemen, bei denen bestimmte Spalten in A definitiv bekannt sind, muss eine andere Lösungsstrategie als die bisher vorgestellten eingeschlagen werden.

Definition 6.6 (Gemischtes LS-TLS-Problem). Es sei ein lineares Gleichungssystem $Ax \approx b$ mit m Gleichungen und n Unbekannten gegeben. Es seien weiterhin $n_1 \leq n$ Spalten von A fehlerfrei. Ferner sei A ohne Einschränkung der Allgemeinheit durch $A = [A_1; A_2]$ partitioniert, wobei A_1 alle fehlerfreien Spalten und nur diese enthält. Dann führt das gemischte LS-TLS-Problem zu

$$\|[A_2; b] - [\hat{A}_2; \hat{b}]\|_F \rightarrow \min \quad (6.67)$$

unter der Nebenbedingung

$$\hat{b} \in S \left([A_1; \hat{A}_2] \right) \quad (6.68)$$

Jedes x , das die Gleichung

$$\hat{A}x = A_1x_1 + \hat{A}_2x_2 = \hat{b} \quad (6.69)$$

erfüllt, wird Lösung des gemischten LS-TLS-Problems genannt, und

$$[\Delta\hat{A}_2; \Delta\hat{b}] = [A_2; b] - [\hat{A}_2; \hat{b}] \quad (6.70)$$

ist die entsprechende Verbesserung des gemischten LS-TLS-Problems.

Zu Lösung des oben definierten Problems muss das Gesamtsystem, das aus fehlerfreien wie fehlerhaften Spalten besteht, zunächst auf ein rein fehlerhaftes TLS-Problem reduziert werden. Dieses reduzierte Problem wird nach den bereits vorgestellten Methoden für klassische, mehrdeutige oder spezifische Probleme gelöst. Die daraus entstandene Zwischenlösung wird in einem letzten Schritt auf das ursprüngliche System zurücktransformiert, um die gewünschte Lösung des gemischten Problems nach Definition 6.6 zu erhalten [3, Seite 183]. Diese Schritte werden im Folgenden genauer erläutert.

Zunächst muss die Matrix A so partitioniert werden, dass die ersten n_1 Spalten fehlerfrei und die restlichen n_2 Spalten fehlerhaft sind, i.e. $A = [A_1; A_2]$. Anschließend wird die Matrix $[A_1; A_2; b]$ gebildet und transformiert,

$$Q_{n_1}^T [A_1; A_2; b] = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & r_{1b} \\ 0 & R_{22} & r_{2b} \\ n_1 & n - n_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} n_1 \\ m - n_1 \end{matrix} \quad (6.71)$$

so dass R_{11} eine obere Dreiecksmatrix ist. Diese Form erreicht man wie in Kapitel 4.4 beschrieben durch die Multiplikation mit den ersten n_1 Householdermatrizen. Man beachte, dass das Subsystem $R_{22}x_2 \approx r_{2b}$ komplett fehlerhaft und von den fehlerfreien Anteilen x_1 entkoppelt ist. Nun berechnet man die TLS-Lösung \hat{x}_2 des Systems

$$R_{22}x_2 \approx r_{2b} \quad (6.72)$$

Die restlichen Parameter \hat{x}_1 ergeben sich nach Gleichung (6.71) aus

$$R_{11}\hat{x}_1 = r_{1b} - R_{12}\hat{x}_2 \quad (6.73)$$

(für den Beweis der Richtigkeit dieser Vorgehensweise siehe [16]).

Sollte das gemischte LS-TLS-Problem zugleich mehrdeutig und/oder spezifisch sein, muss diesem Sachverhalt bei der TLS-Lösung des Subproblems (6.72) Rechnung getragen werden. Es sind dann die Verfahren anzuwenden, die in den Kapiteln 6.2.1 und 6.2.2 hergeleitet wurden. Ansonsten kann die Berechnung des gemischten LS-TLS-Problems wie oben geschildert fortgesetzt werden.

6.2.4 Einheitliche Berechnung aller Sonderfälle

Die unterschiedlichen Eigenschaften von klassischen, mehrdeutigen, spezifischen und gemischten TLS-Problemen werden auf Basis der Kapitel 6.1.2, 6.2.1, 6.2.2 und 6.2.3 durch Abbildung 6.3 dargestellt. In der Praxis müsste man zuerst das

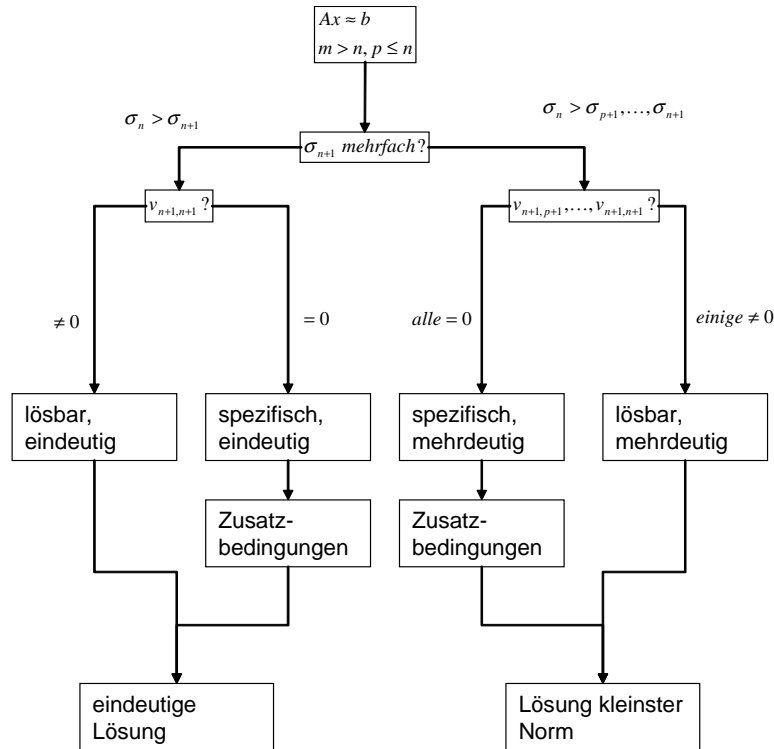


Abbildung 6.3: Zusammenfassung der Spezialfälle

vorliegende Problem untersuchen, um festzustellen, welcher der möglichen Fälle vorliegt. Anschließend könnte man dem Problem mit geeigneten Lösungsstrategien begegnen (siehe Kapitel 6.1.2, 6.2.1, 6.2.2 und 6.2.3). Diese Vorgehensweise ist jedoch schon deshalb unpraktisch, weil Mischformen auftreten können, wie oben bereits mehrfach angesprochen wurde. Deshalb ist ein Algorithmus nötig, der alle möglichen Kombinationen der hergeleiteten Fälle gleichermaßen lösen kann (vgl. [3, 184 ff.], [49]).

Algorithmus (alle Problemausprägungen).

Gegeben

- $A \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ mit $m > n$
- b
- boolean-Vektor t der Dimension n , der anzeigt, ob die i -te Spalte von A fehlerfrei ist oder nicht (fehlerfrei $\Leftrightarrow t_i = \text{true}$, fehlerhaft $\Leftrightarrow t_i = \text{false}$)

Schritt 1: Spaltenvertauschungen

Summiere jeweils die „true“- und „false“-Einträge in t und setze

$$\begin{aligned}n_1 &= \text{Anzahl der fehlerfreien Spalten} \\n_2 &= n - n_1 \text{ (Anzahl der fehlerhaften Spalten)}\end{aligned}\tag{6.74}$$

Vertausche mit Hilfe einer Permutationsmatrix P die Spalten von A

$$\begin{aligned}A' &= AP = [A_1; A_2] \\&\quad \quad \quad n_1 \quad n_2 \\x' &= P^T x\end{aligned}\tag{6.75}$$

so dass A_1 die fehlerfreien und A_2 die fehlerhaften Spalten von A enthält

Schritt 2: QR-Zerlegung

Wenn $n_1 > 0$ ist, dann

überführe die Matrix $[A_1; A_2; b]$ teilweise in obere Dreiecksform

$$[A_1; A_2; b] = Q_{n_1} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} n_1 \\ m - n_1 \\ n_1 \quad n_2 + 1 \end{matrix}\tag{6.76}$$

so dass Q_{n_1} eine orthogonale Matrix und R_{11} in oberer Dreiecksform ist.

Wenn $n_1 = n$, dann ermittle die Least-Squares-Lösung über $R_{11}x = R_{12}$ (zum Beispiel durch Rückwärtseinsetzen) und beende die Berechnung.

ansonsten setze $R_{22} := [A'; b]$.

Schritt 3: Singulärwertzerlegung

Führe eine Singulärwertzerlegung von R_{22} durch:

$$\begin{aligned}U^T R_{22} V &= \text{diag} \{ \zeta_1, \dots, \zeta_s \}, s = \min \{ m - n_1; n_2 + 1 \} \\ \zeta_{i-1} &\geq \zeta_i \quad \forall i = 2, \dots, s \text{ und } \zeta_j = 0 \quad \forall j > s \\ V &= [v_1, \dots, v_{n_2+1}]\end{aligned}\tag{6.77}$$

Schritt 4: Bestimmung der Toleranzgrenze für die Rangbestimmung

Die Toleranzgrenze e wird entweder absolut vorgegeben oder durch

$$\begin{aligned}e &= \sqrt{2 \max \{ m; n_2 + 1 \}} \sigma^2 \\ \sigma^2 &= \text{Varianz der Fehler in } [A; b]\end{aligned}\tag{6.78}$$

bestimmt.

Schritt 5: Ermittlung des Lösungsraumes L

Wähle $j = n_2 + 1$

Bestimme die Vielfalt m_{ζ_j} von ζ_j : Zähle k von j aus rückwärts. Wenn $\zeta_k \geq \zeta_j + e$, dann ist $\zeta_k \neq \zeta_j$

Setze $V_{22} := [v_{k+1}, \dots, v_j]$

Wenn $v_{n+1,i} = 0 \forall i = k+1, \dots, j$ dann setze $j = k$ und kehre zur Bestimmung der Vielfalt zurück

Wenn $n_1 > 0$ ist, dann berechne

$$\begin{aligned} V_{12} &= -R_{11}^{-1} R_{12} V_{22} \\ L &:= \begin{bmatrix} V_{12} \\ V_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} n_1 \\ n_2 + 1 \end{matrix} \end{aligned} \quad (6.79)$$

ansonsten

$$L := V_{22} \quad (6.80)$$

Schritt 6a: Bestimmung der TLS-Lösung \hat{x}

Wenn der Lösungsraum aus mehreren Vektoren aufgespannt wird, dann transformiere die Matrix L orthogonal (zum Beispiel mit einer Householdermatrix), so dass in der untersten Zeile bis auf das letzte Element nur Nullen vorkommen

$$LQ = \begin{bmatrix} M & z \\ 0 \dots 0 & \gamma \end{bmatrix} \begin{matrix} n \\ 1 \\ 1 \end{matrix} \quad (6.81)$$

Berechne die Lösung

$$\hat{x}' = -\frac{z}{\gamma} \quad (6.82)$$

Schritt 6b: Bestimmung der Matrix der Verbesserungen $[\Delta \hat{A}'; \Delta \hat{b}]$

Wenn es keine fehlerfreien Spalten gab (und deshalb auch keine orthogonale Transformation durchgeführt werden musste), dann erhält man die Matrix der Verbesserungen unmittelbar nach

$$[\Delta \hat{A}'; \Delta \hat{b}] = [A'; b] \begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix} [z^T; \gamma] \quad (6.83)$$

Anderenfalls ist zunächst der Vektor $\begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix}$ entsprechend der Anzahl der fehlerfreien Spalten zu unterteilen

$$\begin{pmatrix} z \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \gamma \end{pmatrix} \begin{matrix} n_1 \\ n_2 \\ 1 \end{matrix} \quad (6.84)$$

Dann berechnet man die Verbesserungsmatrix für die TLS-Zerlegung von R_{22} nach

$$\Delta R_{22} = R_{22} \begin{pmatrix} z_2 \\ \gamma \end{pmatrix} [z_2^T; \gamma] \quad (6.85)$$

Die gesamte Matrix der Verbesserungen gewinnt man schließlich nach

$$[\Delta \hat{A}'; \Delta \hat{b}] = Q_{n_1}^T \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Delta R_{22} \\ n_1 & n_2 + 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} n_1 \\ m - n_1 \end{matrix} \quad (6.86)$$

mit der Orthogonalmatrix Q_{n_1} aus Schritt 2.

Schritt 7: Rückgängig machen der Spaltenvertauschungen Um wieder die ursprüngliche Reihenfolge der Parameter respektive Spalten von A zu erhalten, müssen die Permutationen aus Schritt 1 wieder rückgängig gemacht werden.

$$\begin{aligned} \hat{x} &= P \hat{x}' \\ A &= A' P \\ \Delta \hat{A} &= \Delta \hat{A}' P \end{aligned} \quad (6.87)$$

zu den Spaltenvertauschungen Im Fall $n_1 = 0$ sind keine Vertauschungen nötig. Man setzt $P = I$ und damit $A' = A$.

zu der Toleranzgrenze Obwohl ein Singulärwert mathematisch gesehen mehrfach vorkommen kann, wird man feststellen, dass sich die entsprechenden Werte (aufgrund numerischer Effekte) leicht unterscheiden können. Gleichheit der Werte bedeutet deshalb nicht, dass die Differenz genau 0 sein muss, sondern dass sie eine bestimmte Grenze nicht überschreiten darf.

zur Ermittlung des Lösungsraumes Wenn der fragliche Singulärwert mehrfach vorkommt, dann ist eine Lösung auf der Basis dieses Singulärwertes nicht eindeutig. Der Lösungsraum wird vielmehr durch alle Vektoren v bestimmt, die dem Wert durch die SVD zugeordnet werden. Wenn die letzte Komponente aller in Frage kommenden Vektoren v gleich null ist, dann kann in diesem Raum kein Vektor gefunden werden, der als Lösung dienen kann. Der Lösungsraum wird dann unter den Vektoren v gesucht, die zum nächstkleineren Singulärwert gehören.

zur Berechnung der Lösung Wenn der Lösungsraum L aus einem Vektor besteht

$$L = l = \begin{bmatrix} z \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (6.88)$$

dann ergibt sich die Lösung \hat{x} aus einer einfachen Skalierung von l .

Wenn der Lösungsraum von mehreren Vektoren aufgespannt wird und die Lösung deshalb nicht eindeutig ist, dann kann die Lösung kleinster Norm auch ohne Transformation mittels

$$z := \sum_{i=r+1}^{n+1} v_{n+1,i} \begin{pmatrix} v_{1,i} \\ \vdots \\ v_{n,i} \end{pmatrix}, \quad \gamma = \sum_{i=r+1}^{n+1} v_{n+1,i}^2 \quad (6.89)$$

$$\Rightarrow \hat{x} = -\frac{z}{\gamma}$$

berechnet werden. Wenn allerdings auch die Verbesserungsmatrix ermittelt werden soll, dann ist eine Transformation günstiger.

6.3 Statistische Eigenschaften von TLS

Die bisherigen Kapitel beschäftigten sich vor allem mit der Berechnung der Parameter und der Verbesserungsmatrix aus einer numerischen Sichtweise. Da den zugrunde liegenden Daten ein stochastisches Verhalten unterstellt wird, ist auch eine Diskussion der TLS-Technik aus statistischer Sicht notwendig. Dabei tauchen unterschiedliche Fragen auf: Unter welchen Bedingungen ist TLS ein erwartungstreuer Schätzer? Können statistische Aussagen zu den berechneten Parametern getroffen werden und wenn ja, wie verhalten sie sich gegenüber denen einer LS-Lösung? In welcher Weise sollen Informationen über das stochastische Verhalten der Daten im Zuge des Algorithmus berücksichtigt werden? Inwieweit sind Vereinfachungen zulässig?

6.3.1 TLS- und LS-Modell

Die statistischen Eigenschaften der TLS-Technik kann man am besten erläutern, indem man sie der klassischen Regression (nach LS-Prinzip) gegenüberstellt. Dazu geht man vom Gleichungssystem

$$\tilde{A}x = \tilde{b} \quad (6.90)$$

aus. Die Tilde ($\tilde{}$) signalisiert die wahren Werte der Variablen, der Vektor x enthält die nicht beobachtbaren und deshalb zu schätzenden Parameter des Systems. Möchte man dieses Gleichungssystem im Sinne der klassischen Regression lösen, dann geht man davon aus, dass die Matrix \tilde{A} vollständig bekannt ist. Ihre Einträge sind also deterministischer Natur. Die wahren Werte des Vektors \tilde{b} kann man hingegen nicht fehlerfrei beobachten. Vielmehr liegt lediglich ein Vektor b vor,

der mit \tilde{b} über die Fehler Δb zusammenhängt

$$\begin{aligned} A &= \tilde{A} \\ b &= \tilde{b} + \Delta b \end{aligned} \tag{6.91}$$

Man erhält folglich ein System

$$A\hat{x}_{LS} = b - \hat{\Delta}b \tag{6.92}$$

wobei die Parameter \hat{x}_{LS} üblicherweise so bestimmt werden, dass die Norm $\|\hat{\Delta}b\|_2$ minimal ist.

Die Anwendung des TLS-Ansatzes reflektiert die Annahme, dass neben \tilde{b} auch \tilde{A} nicht fehlerfrei angesetzt werden kann [3]. Deshalb gilt hier

$$\begin{aligned} A &= \tilde{A} + \Delta A \\ b &= \tilde{b} + \Delta b \end{aligned} \tag{6.93}$$

Das Gleichungssystem für die TLS-Lösung hat dann die Form

$$(A - \Delta\hat{A})\hat{x}_{TLS} = b - \hat{\Delta}b \tag{6.94}$$

6.3.2 Konsistenz des Schätzverfahrens

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wird zunächst folgende Voraussetzung definiert:

Satz 6.5. Die Zeilen von $[\Delta A; \Delta b]$ seien stochastisch voneinander unabhängig und einer gemeinsamen Verteilung $N(0; \sigma^2 I_{n+1})$ unterworfen, wobei σ^2 unbekannt sein kann.

Dann ist die TLS-Methode nach [49], [37, Seite 2] ein erwartungstreuer Schätzer für die Parameter x , für die Matrix $\begin{bmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{b} \end{bmatrix}$ und für die Standardabweichung σ . Wendet man den Algorithmus aus Kapitel 6.2.4 an, so gilt:

- \hat{x} als Schätzwert für x
- $[\hat{A}; \hat{b}] = [A; b] - [\hat{\Delta}A; \hat{\Delta}b]$ als Schätzwert für $[\tilde{A}; \tilde{b}]$
- $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{m}\zeta_{n+1}^2$ als Schätzwert für σ^2

Nach [49] sind zur Beurteilung der Konvergenzeigenschaften des Schätzers zunächst die Annahmen

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \tilde{A}^T \tilde{A} \text{ existiert} \tag{6.95}$$

und

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \tilde{A}^T \tilde{A} \text{ ist positiv definit} \quad (6.96)$$

zu treffen. Außerdem sei

$$\mu = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} [\tilde{A}; \tilde{b}]^T \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ x^T \mu_1 \end{pmatrix} \quad (6.97)$$

Dann gilt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} [A; b]^T [A; b] = \sigma^2 I_{n+1} + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} [\tilde{A}; \tilde{b}]^T [\tilde{A}; \tilde{b}] \quad (6.98)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} [A; b]^T \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \mu \quad (6.99)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \hat{\sigma}^2 = \sigma^2 \quad (6.100)$$

Gleichung (6.98) bedeutet vereinfacht gesagt, dass die Verbesserungsmatrix $[\hat{\Delta}A; \hat{\Delta}b]$ und die Matrix der wahren Werte $[\tilde{A}; \tilde{b}]$ stochastisch voneinander unabhängig sind, wenn genügend Zeilen m vorliegen und damit eine ausreichende Überbestimmung vorhanden ist.

Gleichung (6.100) sagt aus, dass die Schätzung $\hat{\sigma}^2$, die man nach der Berechnung des kleinsten Singulärwertes von $[A; b]$ angeben kann, bei ausreichender Redundanz die Varianz σ^2 zuverlässig widerspiegelt. Damit kann man auch nach der TLS-Schätzung a posteriori auf die vorliegende Fehlerverteilung von $[A; b]$ schließen. Darüber hinaus wird ausgedrückt, dass man eine genaue Schätzung der Matrix $[\tilde{A}; \tilde{b}]^T [\tilde{A}; \tilde{b}]$ erhält, wenn man $\sigma^2 I_{n+1}$ von $[A; b]^T [A; b]$ subtrahiert.

Die Bedingungen (6.95) und (6.96) stellen eine starke Einschränkung dar und sind relativ schlecht handhabbar. Im Allgemeinen reicht folgende Forderung aus:

$$\lambda_{\min}(\tilde{A}^T \tilde{A}) \rightarrow \infty \text{ für } m \rightarrow \infty \quad (6.101)$$

Bedingung (6.101) bedeutet letztendlich, dass die Einträge in der Designmatrix gut über den zur Verfügung stehenden Zahlenraum verteilt sind und damit eine zuverlässige Schätzung der Parameter gewährleisten. Das Beispiel der ausgleichenden Geraden vermag das besonders gut zu verdeutlichen: Die zugrunde liegende Modellierung lautet hier bekanntlich

$$y = mx + b \quad (6.102)$$

Im Sinne eines TLS-Ansatzes seien sowohl die x_i als auch die y_i fehlerbehaftet. Dann fordert die Bedingung (6.101), dass

$$\sum_{i=1}^m (\tilde{x}_i - \tilde{\bar{x}})^2 \rightarrow \infty \text{ für } m \rightarrow \infty \quad (6.103)$$

gelten sollte; die Werte \tilde{x}_i sollten möglichst unterschiedlich und nicht auf einen kleinen Zahlenbereich beschränkt sein. Es ist aus anschaulicher Sicht klar, dass nur dann eine zuverlässige Schätzung der Geradenparameter erfolgen kann.

6.3.3 Verteilung des Parametervektors

Unter der Voraussetzung, dass das Rauschen auf den Daten relativ klein ist und weiterhin (6.5) gilt, kann man die Varianz-Kovarianz-Matrix der TLS-Lösung \hat{x}_{TLS} von Ansatz (6.94) durch

$$\begin{aligned} C_{\hat{x}_{TLS}} &\approx \frac{1}{m} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ -1 \end{pmatrix}^T C \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ -1 \end{pmatrix} (\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \\ &= (1 + \|\tilde{x}\|_2^2) \sigma^2 (\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \end{aligned} \quad (6.104)$$

annähern. Verwendet man folgende Näherungen (siehe (6.98) und (6.100)) für die unbekanntenen wahren Werte

$$\begin{aligned} \hat{x} &\leftarrow \tilde{x} \\ \frac{\zeta_{n+1}^2}{m} &\leftarrow \sigma^2 \\ A^T A - \zeta_{n+1}^2 I_n &\leftarrow \tilde{A}^T \tilde{A} \end{aligned} \quad (6.105)$$

dann wird Gleichung (6.104) zu

$$C_{\hat{x}_{TLS}} \approx \frac{\zeta_{n+1}^2}{m} (1 + \|\hat{x}_{TLS}\|_2^2) (A^T A - \zeta_{n+1}^2 I)^{-1} \quad (6.106)$$

Für die Varianz-Kovarianz-Matrix der LS-Lösung \hat{x}_{LS} hingegen gilt

$$C_{\hat{x}_{LS}} = \sigma^2 (A^T A)^{-1} \quad (6.107)$$

Vergleicht man die Angaben zur Varianz-Kovarianz-Matrix der TLS-Lösung (6.106) mit denen zur VK-Matrix der LS-Lösung (6.107), dann erkennt man, dass die Kovarianzmatrix der TLS-Lösung größer ist als die der LS-Lösung. Die Ursache dafür liegt in der Verkleinerung des Ranges der A -Matrix, die bei der Berechnung der LS-Lösung nicht vorgenommen wird. Dadurch sind mehr Möglichkeiten bei der Eliminierung der Gleichungsrestfehler gegeben, so dass die Verzerrung

der Parameter kleiner werden kann. Allerdings muss dadurch die VK-Matrix der Parameter größer ausfallen.

Im Übrigen ist das TLS-Problem immer schlechter konditioniert als das entsprechende LS-Problem (siehe [3, Seite 180]): Da der Vektor $\begin{pmatrix} x_{TLS} \\ -1 \end{pmatrix}$ ein Eigenvektor der Matrix $(A, b)^T (A, b)$ ist, kann man per Definition

$$\begin{pmatrix} A^T A & A^T b \\ b^T A & b^T b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{TLS} \\ -1 \end{pmatrix} = \zeta_{n+1}^2 \begin{pmatrix} x_{TLS} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (6.108)$$

schreiben. Der obere Block von (6.108) kann auch durch

$$(A^T A - \zeta_{n+1}^2 I) x_{TLS} = A^T b \quad (6.109)$$

ausgedrückt werden. Betrachtet man die Konditionszahlen (siehe Kapitel 4.2) des TLS- und des LS-Problems

$$\kappa(A^T A - \zeta_{n+1}^2 I) = \frac{\gamma_1^2 - \zeta_{n+1}^2}{\gamma_n^2 - \zeta_{n+1}^2} > \frac{\gamma_1^2}{\gamma_n^2} = \kappa(A^T A) \quad (6.110)$$

dann erkennt man, dass das TLS-Problem empfindlicher auf kleine Störungen in den Beobachtungen reagiert als das LS-Problem.

6.4 Skalierung von originären TLS-Problemen

Wie aus dem vorangegangenen Kapitel ersichtlich wurde, muss man vor einer Berechnung nach Kapitel 6.2.4 dafür sorgen, dass die Elemente der Matrix $[\Delta A; \Delta b]$ unabhängige Zufallsvariablen mit dem Erwartungswert 0 und gleicher Standardabweichung repräsentieren (siehe 6.5, [3, Seite 176], [37, Seite 2]). Um dies zu erreichen, müssen die Daten entsprechend vorbereitet werden. Prinzipiell hat man dazu die Möglichkeit, das Gleichungssystem durch Multiplikation mit Äquilibrationmatrizen anzupassen ([39], [18]). Ein

$$[A; b] \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} \approx 0 \quad (6.111)$$

äquivalentes Gleichungssystem ist

$$Z[A; b]S \left(S^{-1} \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} \right) \approx 0 \quad (6.112)$$

das aus dem vorigen durch Vor- und Nachmultiplikation mit Äquilibration(skalierungs-)Matrizen hervor geht. Die beiden Äquilibrationmatrizen S und Z müssen selbstverständlich regulär sein.

In mathematischer Literatur wird die Skalierung oft mit dem Ziel angewendet, die Kondition des Problems, also hier von $[A; b]$, so weit es geht zu senken und damit

die numerischen Eigenschaften des Problems zu verbessern. Diese Strategie ist hier jedoch nicht geeignet, weil es das Ziel eines TLS-Ansatzes sein sollte, die unterschiedlichen Fehlerniveaus der Daten auszugleichen. Deshalb muss man zuerst Annahmen über die Fehlersituation von $[A; b]$ treffen und dann die Skalierungsmatrizen so wählen, dass jeder Eintrag im skalierten System $Z[A; b]S$ möglichst die gleiche Fehlererwartung aufweist. Nur dann sind die Bedingungen für eine optimale Lösung des TLS-Problems gegeben. Da offensichtlich die Skalierung des Systems $[A; b]$ mit den Matrizen Z und S die identische Skalierung der Verbesserungsmatrix $Z[\Delta A; \Delta b]S$ nach sich zieht, ist zu erwarten, dass die Einträge in der Matrix $Z[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}]S$ in etwa gleich groß sind. Unter der Voraussetzung, dass keine systematischen Verzerrungen in den Daten vorhanden sind, kann man die Unsicherheit der einzelnen Einträge entsprechend ihrer Stochastizität durch die Angabe von Varianzen und Kovarianzen ausdrücken.

Es gibt nun zwei mögliche Skalierungsstrategien: Wenn man sich über die Fehlerverteilungen der Daten im Unklaren ist, dann kann man die Äquilibrierungsmatrizen Z und S so wählen, dass gleich große Einträge in der Matrix $Z[\Delta \hat{A}; \Delta \hat{b}]S$ entstehen. Ist dies erreicht, dann kann man über die Matrizen S und Z Rückschlüsse auf die Verteilung der Fehler in $[A; b]$ ziehen. Wenn man aber einigermaßen gesicherte Kenntnisse über die Varianzen und Kovarianzen der Einträge in $[A; b]$ zu Verfügung hat, dann sollte man die Skalierungsmatrizen auf Basis dieser Informationen wählen.

Ein einfacher Fall liegt vor, wenn beide Skalierungsmatrizen Diagonalmatrizen sind. Man drückt dadurch aus, dass die Einträge in $[A; b]$ stochastisch gesehen nicht voneinander abhängen. Die Multiplikation mit der Äquilibrierungsmatrix Z bewirkt dann eine Zeilenskalierung von $[A; b]$ (jede Zeile von $[A; b]$ wird mit Z_{ii} multipliziert), während die Matrix S für eine entsprechende Spaltenskalierung sorgt. Zur Ermittlung der Diagonalelemente von Z (bzw. S) geht man von der Standardabweichung σ_{z_i} der Elemente in der i -ten Zeile (bzw. σ_{s_i} der i -ten Spalte) aus und setzt [18, Seite 598]

$$Z_{ii} = \frac{1}{\sigma_{z_i}} \text{ bzw. } S_{ii} = \frac{1}{\sigma_{s_i}} \quad (6.113)$$

Kann man für die Elemente in den Spalten (bzw. den Zeilen) neben den Varianzen auch die Kovarianzen angeben, dann erhält man für die Spalten (bzw. Zeilen) eine Kovarianzmatrix C_{Spalten} (bzw. C_{Zeilen}). Die Äquilibrierungsmatrizen sind dann durch

$$Z = C_{\text{Spalten}}^{-\frac{1}{2}} \text{ bzw. } S = C_{\text{Zeilen}}^{-\frac{1}{2}} \quad (6.114)$$

gegeben. Die Inverse der Quadratwurzel der Kovarianzmatrizen erhält man durch eine Cholesky-Zerlegung von C .

Die Skalierung mit den Diagonalmatrizen Z und S bewirkt, dass die Funktion

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^m d_i^2 \frac{|a_i^T x - b_i|^2}{x^T S_1^{-2} x + s_{n+1}}, \quad S_1 = \text{diag}(s_1, \dots, s_n) \quad (6.115)$$

minimiert wird (a_i sei die i -te Zeile von A). Dabei stellt der Bruchterm die Entfernung von $\begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$ zum Subraum

$$P_x = \left(\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} : a \in \mathfrak{R}^n, b \in \mathfrak{R}, b = x^T a \right) \quad (6.116)$$

dar. Die Entfernung im Raum \mathfrak{R}^{n+1} sei durch $\|Sx\|_2$ zu berechnen (vgl. [18], [3]).

Eine in der Literatur oft vorzufindende Konfiguration ist die Auswertung von Messungen von Experimenten. Dabei wird ein und derselbe Sachverhalt genügend oft an unterschiedlichen Stellen gemessen, um die Parameter der zugrunde liegenden Modellierung bestimmen zu können. Jeder Zeile der Designmatrix A liegt also dieselbe Modellbildung und derselbe Messaufbau zugrunde; lediglich die Werte sind unterschiedlich. Aufgrund des identischen Messaufbaus kann eine Varianz-Kovarianz-Matrix C_{n+1} angegeben werden, die für jede Zeile der Designmatrix Gültigkeit hat. Da die Messung jedes mal neu vorgenommen wurde, liegt eine Korrelation bezüglich verschiedener Zeilen (sprich Messungen) nicht vor. Die Auswertestrategie sieht deshalb vor, zunächst die Äquilibrierungsmatrix für die Zeilen durch

$$S = C^{-\frac{1}{2}} \quad (6.117)$$

zu berechnen. Anschließend wird das Gleichungssystem transformiert

$$[A'; b'] = [A; b]S \quad (6.118)$$

so dass die Einträge des transformierten Systems $[A'; b']$ voneinander unabhängig und gleich verteilt sind. Auf das transformierte System wird der Algorithmus nach Kapitel 6.2.4 angewendet, woraus die transformierte Lösung \hat{x}' entsteht. Diese Lösung wird dann nach

$$\hat{x} = S\hat{x}' \quad (6.119)$$

ins ursprüngliche System zurück transformiert. Mit den beteiligten Matrizen verfährt man entsprechend.

Ein gutes praktisches Beispiel zur Skalierung geben Mühlich und Mester in [37]. Hier wird die korrekte Skalierung des $(8+n)$ -Algorithmus hergeleitet und anschließend anhand von Vergleichsrechnungen verifiziert. Es konnte gezeigt werden, dass Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Berechnung durch die Skalierung signifikant gesteigert werden konnten.

Der Leser wird bemerken, dass es nicht immer möglich ist, durch Skalieren alle Elemente des Gleichungssystems $[A; b]$ stochastisch voneinander zu entkoppeln

und mit einheitlicher Standardabweichung zu versehen. Das ist zum Beispiel schon dann der Fall, wenn unterschiedlichen Zeilen von $[A; b]$ unterschiedliche Kovarianzmatrizen C_i und C_j zugeordnet werden müssen. Stellt man die Äquilibrationmatrix S durch die Cholesky-Zerlegung von C_i auf, so wird die i -te Zeile den Forderungen nach einheitlicher Standardabweichung und stochastischer Unabhängigkeit der Einträge gerecht werden, die j -te Zeile aber nicht. Offensichtlich ist in diesen Fällen die Voraussetzung für eine optimale Lösung des TLS-Problems nicht gegeben. Nach [49] kann der TLS-Algorithmus dennoch sinnvoll angewendet werden und zu aussagekräftigen Ergebnissen führen, auch wenn die Lösung nicht hundertprozentig erwartungstreu ist.

6.5 Frei skalierbare TLS-Probleme

Wie in Kapitel 6.4 angesprochen wurde, kann eine erwartungstreue Anwendung des originären TLS-Algorithmus, der die Lösung im Grundsatz mittels einer Singulärwertzerlegung der erweiterten Designmatrix berechnet, nur dann erfolgen, wenn das System $[A; b]$ durch Multiplikation mit Zeilen- und Spaltenäquilibrationmatrizen so skaliert werden kann, dass die einzelnen Einträge voneinander unabhängig sind und ihnen dieselbe Standardabweichung zugeordnet werden kann. Das setzt allerdings voraus, dass die Fehlerhaushalte aller Zeilen respektive Spalten in $[A; b]$ ähnlich sein müssen. Das ist jedoch in der Mehrzahl der Modellierungen in der Praxis nicht der Fall. Vielmehr muss man im Allgemeinen davon ausgehen, dass der Fehlerhaushalt der gesamten Matrix $[A; b]$ eher unstrukturiert ist. Eine logische Konsequenz ist, dass in diesen Fällen der bisher beschriebene TLS-Algorithmus nicht angewendet werden kann, wenn eine Erwartungstreue des Schätzers unabdingbar ist. Aus diesem Grund wurde im Zuge dieser Arbeit ein Berechnungsschema entwickelt, das es erlaubt, völlig unterschiedliche Varianzen für jeden Eintrag in $[A; b]$ und beliebige Kovarianzen zwischen diesen Einträgen einzuführen.

Da das entstehende Modell und dessen Berechnung Ansätzen aus Kapitel 5 folgt, wird zum besseren Verständnis die in der Geodäsie übliche Notation verwendet.

Zunächst geht man vom Gleichungssystem

$$Ax \approx l \tag{6.120}$$

aus.

Nach der allgemeinen Definition 6.2 eines TLS-Problems sollen für die Designmatrix A eine Fehlermatrix \hat{E} und für den Beobachtungsvektor l ein Fehlervektor \hat{e} gefunden werden, so dass die Gleichung

$$(A - \hat{E})\hat{x} = l - \hat{e} \tag{6.121}$$

konsistent ist und gleichzeitig die Frobenius-Norm der Matrix $[\hat{E}; \hat{e}]$ so klein wie möglich ist.

Wenn man die Spalten von E wie bei der Speicherung als „column packed array“ übereinander anordnet, dann kann man so den neuen Fehlervektor

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \text{stack}(E) \\ e \end{pmatrix} \quad (6.122)$$

konstruieren.

Unter Zuhilfenahme von (6.122) ergibt sich für Gleichung (6.121) die Darstellung

$$A\hat{x} + \underbrace{\begin{bmatrix} \overbrace{-\hat{x}_1 \dots -\hat{x}_n}^m & \overbrace{\begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{matrix}}^m \end{bmatrix}}_{n\text{-mal}} \hat{e} + (-l) = 0 \quad (6.123)$$

Ein Vergleich mit Gleichung (5.33) aus Kapitel 5.2.1 lässt erkennen, dass es sich bei Modell (6.123) um ein Gauß-Helmert-Modell handelt:

$$\begin{aligned} A\hat{x} + \hat{B}\hat{v} + w &= 0 \\ \text{mit} \\ \hat{B} &= \begin{bmatrix} -(\hat{x}^T \otimes I_m); I_m \end{bmatrix} \\ \hat{v} = \hat{e} &= \begin{pmatrix} \text{stack}(E) \\ e \end{pmatrix} \\ w &= (-l) \end{aligned} \quad (6.124)$$

Die vereinfachende Darstellung \otimes ist das Kronecker-Produkt von Matrizen, welches wie folgt definiert ist:

$$A_{m \times n} \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} = [a_{ij}B] \quad (6.125)$$

Die „Beobachtungen“ l' in dem Modell (6.124) setzen sich aus den Beobachtungen l und aus den Einträgen in der Designmatrix A im ursprünglichen Modell (6.120) zusammen. Für die so definierten Beobachtungen l' kann eine Verteilung

$$l' \sim \left(0; \sigma_0^2 Q_{l'} \right) \quad (6.126)$$

angegeben werden.

Die $((n+1)m) \times ((n+1)m)$ -Matrix $Q_{l'}$ ist die Kofaktormatrix der neuen Beobachtungen. Es ist leicht einsehbar, dass über die Kofaktormatrix $Q_{l'}$ Genauigkeiten für jeden Eintrag in der Designmatrix A wie auch im ursprünglichen Beobachtungsvektor l angegeben werden können. Des Weiteren hat man die Möglichkeit, Angaben über Korrelationen zwischen beliebigen Elementen in A oder l zu treffen.

Die Berechnung der Parameter kann nun auf iterativem Wege erfolgen. Zunächst errechnet man eine erste Näherung \hat{x} für die Unbekannten durch eine Berechnung der LS-Lösung des Gauß-Markov-Modells (6.120):

$$\hat{x} = (A^T P A)^{-1} A^T P l \quad (6.127)$$

wobei P die Inverse der Kofaktormatrix der ursprünglichen Beobachtungen Q_l und als Submatrix aus der Kofaktormatrix $Q_{l'}$ erhältlich ist.

Mit Hilfe von \hat{x} kann eine erste Näherung der Matrix \hat{B} aufgestellt werden. Außerdem hat der Anwender die Möglichkeit, durch zusätzliche Gleichungen der Art $R\hat{x} + b = 0$ Restriktionen bezüglich der zu schätzenden Unbekannten zu formulieren. Analog zu Kapitel 5.2.1 führt die Euler-Lagrange-Gleichung zu dem System

$$\begin{pmatrix} BC_{l'} B^T & A & 0 \\ A^T & 0 & R^T \\ 0 & R & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ \hat{x} \\ k_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -w \\ 0 \\ -b \end{pmatrix} \quad (6.128)$$

bzw.

$$Nz = n$$

Mittels Invertierung von N erhält man basierend auf den aktuellen Werten für die Unbekannten eine verbesserte Schätzung derselben. Diese neue Schätzung wird nun in einer Schleife so lange zur Verbesserung von B und anschließend zur erneuten Verbesserung der Unbekannten verwendet, bis im Rahmen der Rechengenauigkeit kein Unterschied der aktuellen Schätzung zur vorhergehenden mehr feststellbar ist.

Bezüglich der Umsetzung sei angemerkt, dass sich das Abbruchkriterium hier leicht von dem aus Kapitel 5.2.1 unterscheidet. Im ursprünglichen Gauß-Helmert-Modell werden Verbesserungen dx zu den aktuellen Schätzwerten für die Unbekannten geschätzt, die in der Folge gegen null konvergieren müssen. Demnach ist ein geeignetes Abbruchkriterium beispielsweise die ∞ -Norm der Zuschläge dx . Im Modell für die Lösung des TLS-Problems werden keine Zuschläge, sondern die vollen Unbekannte geschätzt. Deshalb kann nicht ohne weiteres eine vorhandene Bibliothek für einen Gauß-Helmert-Algorithmus übernommen werden.

Einen ähnlichen Ansatz zur Lösung des TLS-Problems verfolgt Schaffrin in [41] und [42], allerdings ohne Gewichtung der Beobachtungen l und der Elemente in A .

Er verweist ebenfalls auf die Tatsache, dass sich das TLS-Problem für Gleichung (6.120) als Gauß-Helmert-Modell darstellen lässt, und schlägt eine Lösung über die Lagrange-Gleichungen vor. Allerdings wird die Berechnung hier in anderer Weise durchgeführt. Zunächst wird das Gauß-Helmert-Modell nach Gleichung (6.123) definiert:

$$l = Ax + [I_m; -(x^T \otimes I_m)] \begin{bmatrix} e \\ e_A \end{bmatrix} \quad (6.129)$$

mit

$$e_A = \text{stack}(E)$$

Die Aufstellung der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{F} = e^T e + e_A^T e_A + 2k^T (Ex - Ax + l - e) \quad (6.130)$$

führt zu den Bedingungen

$$\begin{aligned} \hat{e} - \hat{k} &= 0 \\ \hat{e}_A + (\hat{x} \otimes I_m) \hat{k} &= 0 \\ l - A\hat{x} - e + (\hat{x} \otimes I_m) \hat{e}_A &= 0 \\ -A^T \hat{k} + \hat{E}^T \hat{k} &= 0 \end{aligned} \quad (6.131)$$

Nach einigen Umformungen erhält man das Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} A^T A & A^T l \\ l^T A & l^T l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x} \\ -1 \end{bmatrix} \hat{s} \quad (6.132)$$

wobei \hat{s} wie folgt definiert ist:

$$\hat{s} = l^T l - l^T A \hat{x} \quad (6.133)$$

Es handelt sich dabei um ein Eigenwertproblem, dessen kleinster Eigenwert \hat{s} und sein zugehöriger Eigenvektor gesucht sind. Die Lösung ergibt sich dann wie bei der klassischen Berechnung des TLS-Problems in Kapitel 6.1.2 aus der Skalierung des Eigenvektors. Der Autor schlägt verschiedene iterative Verfahren zu Lösung des Eigenwertproblems vor.

Sollen Restriktionen bezüglich der Unbekannten x eingeführt werden, so kann dies wiederum durch lineare Gleichungen $Rx + b = 0$ geschehen. Die Lagrange-Funktion ändert sich zu

$$\mathcal{F} = e^T e + e_A^T e_A + 2k_1^T (Ex - Ax + l - e) + 2k_2^T (Rx + b) \quad (6.134)$$

so dass das Gleichungssystem (6.132) entsprechend erweitert werden muss:

$$\begin{bmatrix} A^T A & A^T l & R^T \\ l^T A & l^T l & -b^T \\ R & -b & \hat{s} I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ -1 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x} \\ -1 \\ \mu \end{bmatrix} \hat{s} \quad (6.135)$$

mit

$$\mu = k_2(1 + x^T x) \quad (6.136)$$

welches wiederum ein Eigenwertproblem darstellt.

Die Lösung dieses Eigenwertproblems ist auf iterativem Wege möglich, die einzelnen Berechnungsschritte sind in [42] erläutert.

7 Verwendung von TLS in geodätischen Problemen

7.1 Perspektiven von TLS

Das Thema dieser Schrift ist die Untersuchung der Eignung des TLS-Ansatzes für gängige Problemstellungen in der Geodäsie. In den vorangegangenen Kapiteln wurden die theoretischen Hintergründe zum TLS-Ansatz erläutert und ein Überblick über bereits bestehende erfolgreiche Anwendungen gegeben. Ziel dieses Kapitels ist es, aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse die zu untersuchenden Fragestellungen zu sammeln und zu präzisieren. Die folgenden Kapitel beschäftigen sich konsequenterweise mit der Diskussion der Punkte, die hier formuliert worden sind.

Effektivität In mathematischer Literatur wird von einer wesentlich verbesserten Effektivität der TLS-Berechnung gegenüber der bekannten LS-Ausgleichung mittels Aufstellung der Normalgleichungen berichtet. Was ist darunter zu verstehen und inwieweit wirkt sich diese Eigenschaft auf die praktische Berechnung einer Parameterschätzung im Sinne merklich verbesserter Antwortzeiten eines Rechensystems aus?

Empfindlichkeit gegenüber Ausreißern Wie verhält sich die Parameterschätzung, wenn die Beobachtungen so stark vom wahren Wert abweichen, dass dies nicht durch die vermutete statistische Ungenauigkeit erklärt werden kann? Es ist bekannt, dass unter Verwendung des LS-Prinzips Verschmierungseffekte auftreten, das heißt, der grobe Fehler in der Beobachtung wird auf andere Beobachtungen verteilt. Was passiert, wenn man die Parameter nach dem TLS-Prinzip berechnet? Ist TLS eventuell robuster oder sogar empfindlicher als die LS-Schätzung?

Geeignete Problemstellungen für TLS Wie bereits in den Ausführungen zu den mathematischen Eigenschaften der TLS-Ausgleichung deutlich wurde, muss die Modellierung gewissen Anforderungen genügen, damit eine erwartungstreue Schätzung erfolgen kann. Was bedeutet das aus praktischer

Sicht und welche Problemstellungen aus der Geodäsie kommen demzufolge in Frage? (Dieses Problem wird genauer an Beispielen aus den Bereichen

- Ausgleichung von Höhennetzen
- Ausgleichung von Lagenetzen
- Formanalyse

untersucht.)

Genauigkeit der Parameterschätzung Wenn die Voraussetzungen für eine exakte TLS-Ausgleichung gegeben sind, dann wird in mathematischer Literatur von einer Genauigkeitssteigerung von 10-15 % gegenüber einer normalen LS-Ausgleichung gesprochen [3, Seite 177]. Das ist aus geodätischer Sicht eine vielversprechende Aussage, die durch den Vergleich mit gängigen Ausgleichungstechniken überprüft werden muss.

Anwendungen ohne exakte Einhaltung der TLS-Voraussetzungen

Auch wenn die Voraussetzungen für eine exakte Parameterschätzung durch TLS nicht gegeben sind, wird in mathematischer Literatur darauf hingewiesen, dass der TLS-Ansatz sinnvoll angewendet werden kann [49, Seite 91]. Welche Vorteile bringt der TLS-Ansatz in diesem Zusammenhang?

- Erweist es sich als hilfreich, dass TLS bei bestimmten Problemstellungen im Gegensatz zu GH keine Berechnung von Näherungsparametern erfordert?
- Es ist bekannt, dass bei einer Ausgleichung nicht nur Fehler in der Beobachtung von Daten unvermeidlich sind. Auch der unterstellte mathematische Zusammenhang, der letztlich das Design des Gleichungssystems bestimmt, kann irrtümlich angenommen worden sein. Gewöhnlich fällt es schwer, aus den Ergebnissen der Ausgleichung einigermaßen sicher zu beurteilen, ob ein Fehler in der Modellierung vorlag oder nicht. Aus dem TLS-Ansatz ergeben sich neue Maßzahlen aus der Parameterschätzung, die darüber Aufschluss geben könnten. Dabei kommt vor allem die Verteilungscharakteristik der Delta-Matrix in Frage.

7.2 Fallbeispiel 1

Dieses Fallbeispiel soll untersuchen, wie empfindlich eine TLS-Schätzung reagiert, wenn der funktionale Zusammenhang richtig angenommen wurde, aber im Beobachtungsmaterial grobe Fehler vorhanden sind. Aufgrund verschiedener Aussagen in mathematischen Literaturquellen sollte man erwarten, dass eine TLS-Schätzung stärker auf Ausreißer reagiert als eine LS-Ausgleichung [49].

Zum Vergleich eignet sich besonders der Fall der orthogonalen Regression für eine Geradengleichung $y = mx + b$, weil hier ein Gauß-Helmert-Modell und ein gemischtes TLS-Problem angesetzt werden können, deren Zielfunktionen identisch sind. Für die Kofaktormatrix der Beobachtungen, hier die Koordinaten der

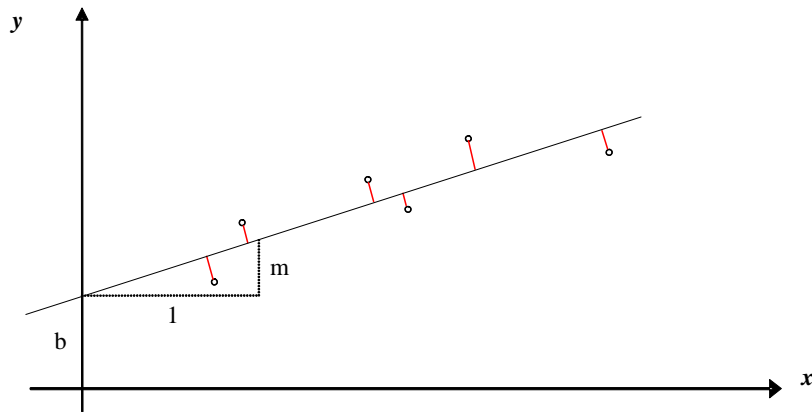


Abbildung 7.1: Modell und Ausgleichsprinzip des Beispiels

Punkte, wird eine Einheitsmatrix gewählt. Der Varianzfaktor σ_0^2 sei 0,000001.

7.2.1 Gauß-Helmert-Modell

Weil in der Ausgangsfunktion

$$\begin{aligned} y &= mx + b \\ \Leftrightarrow 0 &= mx + b - y \end{aligned} \quad (7.1)$$

die Unbekannten und die Beobachtungen nicht generell in getrennten Summanden aufzufinden sind, muss für die Berechnung der orthogonalen Regression eine Linearisierung an der Stelle der Beobachtungen (Punkte) und der Näherungswerte der Unbekannten durchgeführt werden.

$$x_i dm + 1db + \hat{m}v_{x_i} - 1v_{y_i} + \hat{m}x_i + \hat{b} - y_i = 0 \quad (7.2)$$

Das Gauß-Helmert-Modell sieht wie folgt aus:

$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ x_i & 1 \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dm \\ db \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{m} & -1 & 0 & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & \hat{m} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{x_1} \\ v_{y_1} \\ \vdots \\ v_{x_n} \\ v_{y_n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \vdots \\ \hat{m}x_i + \hat{b} - y_i \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \quad (7.3)$$

A x B v w

Die zu minimierende Zielfunktion ist die Summe der Quadrate der Verbesserungen $\Omega = v^T P v = v^T I v = v^T v$, die an die Koordinaten (x_i, y_i) anzubringen sind. Wie bereits in Kapitel 5.2.1 erläutert, wird dieses Problem auf iterativem Weg gelöst.

7.2.2 TLS-Modell

Für die TLS-Modellierung wird die Geradengleichung $y = mx + b$ wie in Kapitel 6.1 beschrieben umgestellt.

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ x_i & 1 & y_i \\ \vdots \\ A' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ b \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (7.4)$$

Betrachtet man die Fehlersituation in der Matrix A' , dann stellt man fest, dass die erste und die dritte Spalte der Matrix A' fehlerbehaftet sind, da es sich um die Beobachtungen handelt. Die zweite Spalte von A' ergibt sich jedoch aus der Modellierung; hier sind alle Elemente fehlerfrei. Folglich wird ein gemischter TLS-Ansatz nach Kapitel 6.2.3 gewählt und dabei die zweite Spalte von Verbesserungen ausgenommen. Über eine teilweise QR- und anschließende SVD-Zerlegung von A' erhält man die gesuchten Parameter; zu den einzelnen Berechnungsschritten sei auf Kapitel 6.2.4 verwiesen.

Wie aus Definition 6.6 ersichtlich ist, wird dabei die Frobenius-Norm der Fehlermatrix $[\Delta A_2; \Delta l]$ minimiert, wobei die Matrix A_2 aus den fehlerhaften Spalten von A' , also der ersten und der dritten Spalte von A' besteht. Da die Matrix $[A_2; l]$ aus den Koordinatenwerten und nur aus diesen besteht, muss die Matrix $[\Delta A_2; \Delta l]$ genau die Fehler der Beobachtungen enthalten. Das Quadrat der Frobenius-Norm (siehe Gleichung (4.8)) der Matrix $[\Delta A_2; \Delta l]$ entspricht genau der Funktion $v^T v$, die auch die zu minimierende Zielfunktion beim Gauß-Helmert-Modell darstellt. Sowohl der Gauß-Helmert-Ansatz als auch der gemischte TLS-Ansatz versuchen also, genau dieselbe Zielfunktion zu minimieren; die Erwartungswerte beider Verbesserungsquadratsummen, Parameterschätzungen etc. sind demnach gleich.

7.2.3 Vergleich

Zum Vergleich des Verhaltens beider Ansätze wurden über einen Punktwolken-generator Sätze von Beobachtungen (Koordinaten) erstellt. Beim Start des Generators werden die Sollparameter der Geraden, die Anzahl der Punkte, der Koordinatenbereich und das erwünschte Rauschverhalten angegeben. Anschließend werden in dem Bereich per Zufallsgenerator Koordinatenpaare auf der Sollgeraden erzeugt und ein zufälliges Gaußsches Rauschen für die Beobachtungen erzeugt.

Als Resultat erhält man ein Punktwolkenobjekt, das je nach Bedarf die verrauschten Koordinaten, die unverfälschten Koordinaten oder die Rauschanteile zurück gibt

GH <-> TLS ohne Rauschen Zunächst wurden Rechnungen ohne Rauschen durchgeführt, um die Erwartungstreue beider Schätzer zu überprüfen. Tabelle 1 stellt die mittleren Resultate für die Randbedingungen

- Anzahl der Punkte: 30
- Sollsteigung m : 1
- Sollachsenabschnitt b : 1
- Bandbreite der X-Koordinaten: -50 <-> +50

dar.

Tabelle 1: Unterschiede im unverrauschten Fall

	TLS-GH
Steigung \hat{m}	0
Abschnitt \hat{b}	3 E-16
Verbesserungsquadratsumme $v^T v$	1 E-27
Verbesserungen v_i	1 E-16

Die Ergebnisse gelten im Wesentlichen für beliebige Werte der Sollparameter, Anzahl der Punkte etc.

Es kann festgehalten werden, dass beide Berechnungsverfahren im Falle unverfälschter Beobachtungen identische Ergebnisse erzielen. Die Gleichungsrestfehler sind bei beiden Algorithmen annähernd null, folglich lösen die geschätzten Parameter und die verbesserten Beobachtungen die Geradengleichung widerspruchsfrei.

GH <-> TLS mit Rauschen Nun soll untersucht werden, wie sich die beiden Schätzer verhalten, wenn die Beobachtungen mit einem natürlichen Rauschen belegt sind. Dazu werden wie oben beschrieben eine Standardabweichung der Koordinaten von 0,001 angenommen und entsprechende Verfälschungen für das Beobachtungsfeld erzeugt. Die so erhältlichen Koordinatensätze werden wie im vorigen Abschnitt den beiden Schätzern zugeführt, um die Ergebnisse vergleichen zu können. Es gelten dieselben Randbedingungen wie im vorigen Beispiel.

Tabelle 2 zeigt die Unterschiede zwischen beiden Berechnungsarten, wenn ein natürliches Rauschen in den Beobachtungen vorhanden ist.

Tabelle 2: Unterschiede im verrauschten Fall

	TLS-GH
Steigung \hat{m}	1 E-9
Abschnitt \hat{b}	1 E-9
Verbesserungsquadratsumme $v^T v$	1 E-14
Verbesserungen v_i	1 E-8

Es zeigen sich nun vor allem Unterschiede in den Verbesserungen, auch wenn der Bereich sicher akademischer Art ist. Vergegenwärtigt man sich, dass die Verbesserungsquadratsumme zu minimieren ist und dass die Rechenschärfe bei Double-Zahlen bei E-16 liegt, dann kann man den Unterschieden in den Verbesserungen beider Algorithmen keine bedeutende Rolle zumessen.

Allerdings fällt auf, dass die Verbesserungsquadratsumme von TLS bei allen Testrechnungen immer kleiner ist als die von GH. Das bedeutet prinzipiell, dass die Schätzung aus der TLS-Berechnung das Minimumskriterium besser zu erfüllen vermag als die aus der GH-Berechnung. Der Grund ist darin zu suchen, dass die TLS-Berechnung in einem Schritt aus einer Singulärwertzerlegung erfolgt, die GH-Berechnung jedoch auf iterativem Wege. In einem nachfolgenden Beispiel wird auf diesen Effekt noch genauer eingegangen.

GH \leftrightarrow TLS ohne Rauschen und mit einem groben Fehler Nachdem das Verhalten in den Fällen ohne grobe Fehler in den Beobachtungen geklärt ist, werden nun die Berechnungen durchgeführt, nachdem ein grober Fehler in einer Beobachtung angesetzt wurde. Es soll wieder

- Anzahl der Punkte: 30
- Sollsteigung m : 1
- Sollachsenabschnitt b : 1
- Bandbreite der X-Koordinaten: -50 \leftrightarrow +50

gelten, wobei den Beobachtungen zunächst kein Rauschen auferlegt wird. Der grobe Fehler wird erzeugt, indem die X-Koordinate eines Punktes um 0,005 Einheiten verfälscht wird. Tabelle 3 stellt die Ergebnisse der Rechnungen zusammen. Die Größe der eingebauten groben Fehler stehen im Kopf der jeweiligen Spalte. Es fällt auf, dass auch bei Vorliegen eines groben Fehlers in den Koordinaten die TLS-Verbesserungsquadratsumme bei jedem Berechnungsdurchlauf kleiner ist als die des GH-Modells. Der TLS-Schätzer erfüllt die Minimumsbedingung also wie in obigem Beispiel besser als der GH-Schätzer. Welcher Schätzer reagiert nun empfindlicher auf den groben Fehler? Dazu wird der eingebaute grobe Fehler

Tabelle 3: Unterschiede ohne Rauschen mit grobem Fehler

	0.005	0.1
$\hat{m}_{TLS} \leftrightarrow \hat{m}_{GH}$	1 E-9	1 E-7
$\hat{b}_{TLS} \leftrightarrow \hat{b}_{GH}$	1 E-9	1 E-7
$\Omega_{TLS} - \Omega_{GH}$	-4 E-15	-3 E-10
$v_{TLS} \leftrightarrow v_{GH}$	1 E-9	1 E-6

auf das Hundertfache der angenommenen Standardabweichung erhöht. Die Unterschiede in den geschätzten Parametern werden größer (1E-7), dasselbe gilt für die Verbesserungen (1E-6). Die Verbesserungsquadratsumme von TLS ist um E-10 kleiner als die von GH. TLS ist also zumindest in diesem Fall unempfindlicher gegenüber groben Fehlern als GH. Das steht im Widerspruch zu der allgemeinen Erwartung, dass TLS empfindlicher auf Ausreißer reagiert.

GH <-> TLS mit Rauschen und mit einem groben Fehler Eine realistischere Situation ist das Vorliegen von natürlichem Rauschen in den beobachteten Koordinaten, welches wieder durch $\sigma = 0.001$ angenommen wird. Dieses Rauschen wird wie bereits beschrieben an die Sollkoordinaten angebracht. Zusätzlich wird wie im vorigen Beispiel ein grober Fehler eingebaut, indem eine Koordinate eines Punktes um das fünffache bzw. das hundertfache der Standardabweichung verfälscht wird. Im Übrigen gelten die bekannten Randbedingungen.

Tabelle 4: Unterschiede mit Rauschen und grobem Fehler

	0.005	0.1
$\hat{m}_{TLS} \leftrightarrow \hat{m}_{GH}$	1 E-9	1 E-7
$\hat{b}_{TLS} \leftrightarrow \hat{b}_{GH}$	1 E-8	1 E-6
$\Omega_{TLS} - \Omega_{GH}$	-4 E-14	-4 E-10
$v_{TLS} \leftrightarrow v_{GH}$	1 E-8	1 E-6

In Tabelle 4 sind die wichtigsten Ergebnisse der Testläufe unter den genannten Bedingungen zusammengefasst. Bei den Testläufen fällt auf, dass die TLS-Verbesserungsquadratsumme immer kleiner ist als die aus der GH-Berechnung. Der TLS-Schätzer erfüllt die Minimumsbedingung also wieder besser als der GH-Schätzer. Die Parameter passen wie vorher auf E-9 bis E-8 genau zusammen. Die Verbesserungen von TLS und GH weichen im Bereich von E-8 voneinander ab.

Es wird wieder der eingebaute grobe Fehler auf das hundertfache der Standardabweichung erhöht. Die Parameter von TLS unterscheiden sich von den GH-Parametern um E-6, also stärker, als wenn ein kleinerer Fehler vorliegt. Es zeigt sich, dass die Verbesserungsquadratsumme von TLS um E-10 kleiner ist als die von GH. TLS scheint also wieder besser geeignet zu sein als die GH-Lösung.

7.2.4 Beurteilung

In dem vorgestellten Fall wurde eine Konfiguration gewählt, bei der sowohl der TLS- als auch der bekannte GH-Ansatz theoretisch genau dieselben Erwartungswerte hinsichtlich der Schätzergebnisse aufweisen. Die Beobachtungen wurden dabei so erstellt, dass sie ohne Rauschen und ohne grobe Fehler genau zu dem unterstellten mathematischen Zusammenhang passen. Das funktionale Modell ist also richtig gewählt. Aufgrund der vollkommen unterschiedlichen Berechnungsschritte war es interessant zu beobachten, wie sich beide Schätzer verhalten, wenn natürliches Rauschen bzw. grobe Fehler ins Spiel kommen. Die groben Fehler wurden in einem Teil der Tests in vernünftiger Größe und in einem anderen Teil in absurder Dimension eingeführt.

Nach mathematischer Literatur (z. B. [49]) wäre zu erwarten gewesen, dass TLS empfindlicher auf Ausreißer reagiert. Das hätte sich in groben Verzerrungen hinsichtlich der Parameterschätzungen zeigen müssen. Das Gegenteil war jedoch der Fall. Aus den Testläufen geht hervor, dass die Schätzergebnisse von TLS und GH nur dann numerisch gesehen identisch sind, wenn keine Fehler in den Beobachtungen vorliegen, was unrealistisch ist. Je größer das Rauschen oder vorliegende grobe Fehler werden, also je stärker die tatsächlichen Beobachtungen von ihren Sollwerten abweichen, desto deutlicher werden die Unterschiede zwischen den Ergebnissen beider Schätzer. Da die Verbesserungsquadratsumme von TLS immer kleiner war als diejenige von GH, erfüllt der TLS-Schätzer die Forderung nach minimaler Verbesserungsquadratsumme in allen Fällen besser als GH-Schätzer. Der Total-Least-Squares-Ansatz liefert damit bessere Ergebnisse als der Gauß-Helmert-Ansatz.

Fazit: TLS ist deutlich unempfindlicher gegenüber Ausreißern als angenommen.

7.3 Fallbeispiel 2

In dem vorangegangenen Beispiel wurde untersucht, wie sich die TLS-Berechnung verhält, wenn der mathematische Zusammenhang richtig gewählt war, die Beobachtungen jedoch durch natürliches Rauschen und/oder grobe Fehler verfälscht sind. Nun soll die Frage geklärt werden, wie sich TLS im Vergleich zu LS verhält, wenn der Ansatz des mathematischen Modell unpassend ist.

Wie in 7.2 wird eine Gerade geschätzt, weil sich dann wie bereits dargelegt die beiden Berechnungsverfahren besonders gut vergleichen lassen. Allerdings werden mittels Generator auf zufälliger Basis Punktwolken erzeugt, die auf einer Parabel liegen (Bereich der X-Komponenten: $x_{\text{Scheitel}-5} \leftrightarrow x_{\text{Scheitel}+5}$, 20 Punkte, kein Rauschen). Der vermutete mathematische Zusammenhang ist also falsch; auf die Schätzung einer Geraden bezogen sind sämtliche Beobachtungen „grobe Fehler“. Tabelle 5 stellt die Unterschiede beider Berechnungsverfahren dar. Bezüglich der

Tabelle 5: Ergebnisse TLS <-> GH

	Abweichung
Parameterschätzung	$\approx E1$
Verbesserungen	$\approx E1$
Verbesserungsquadratsummen	$\approx E2$

Verbesserungsquadratsummen ist wie in 7.2 zu bemerken, dass diejenige aus TLS immer die kleinere ist. Der Unterschied ist ausgesprochen groß.

Damit die Ergebnisse besser nachvollzogen werden können, wurde auch ein Standardbeispiel aus einfachen Koordinaten angesetzt. Die Punkte wurden wie folgt gewählt:

$$P_1 \cdots P_4 = (0, 0) (1, 1) (2, 4) (3, 9) \quad (7.5)$$

und liegen demnach auf einer Parabel mit dem Scheitelpunkt $(0, 0)$ und dem Abplattungsfaktor 1.

Tabelle 6: Ergebnisse des Standardbeispiels

	TLS	GH
Steigung \hat{m}	3.241	3.000
Achsabschnitt \hat{b}	-1.362	-1
Verbesserungsquadratsumme	0.372	0.400

In Tabelle 6 sind die Resultate von TLS und GH enthalten. In der Graphik 7.2, in der die beiden aus TLS und GH ermittelten Geraden mit den jeweiligen Verbesserungen dargestellt sind, wird der signifikante Unterschied zwischen beiden Algorithmen besonders deutlich.

Da die Verbesserungsquadratsumme der TLS-Berechnung deutlich kleiner als die der GH-Berechnung ist, kann man festhalten, dass die Lösung des TLS-Algorithmus der Minimumforderung besser entspricht. Es stellt sich die Frage, warum der GH-Weg nicht dieselbe Lösung liefert, obwohl doch der Ansatz nach Euler-Lagrange (siehe 5.2.1) genau dies gewährleisten sollte.

An schlechten ersten Näherungen für die Parameter kann es nicht liegen. Das kann man überprüfen, indem man die Lösungen aus der TLS-Berechnung als erste Näherung für das iterative GH-Verfahren verwendet. Obwohl es sich dabei um die aktuell beste Lösung handelt, konvergiert das GH-Verfahren auf den bereits bekannten Fixpunkt. Numerisch ungünstige Verhältnisse scheiden ebenfalls aus, da die Kondition der zu invertierenden Matrix N in dem vorliegenden Beispiel nur etwa 100 beträgt. Auch der Verdacht, dass eines der beiden Verfahren den funktionalen Zusammenhang nicht korrekt löst, bestätigt sich nicht: Setzt man die verbesserten Beobachtungen und die ermittelten Parameter in die Geraden-

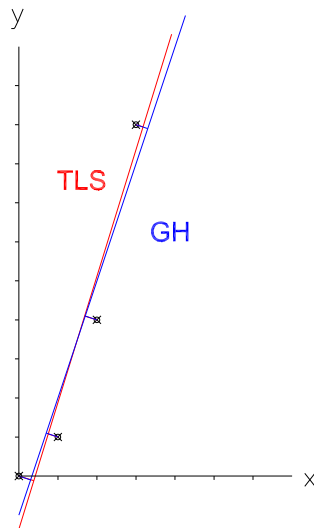


Abbildung 7.2: Geradenschätzung bei falschem Modell

gleichung ein, dann bewegt sich der Gleichungsrestfehler in beiden Fällen in dem Bereich der numerischen Rechenschärfe.

Die Erklärung für das „Versagen“ des GH-Verfahrens zur Berechnung der optimalen Ausgleichsgeraden erschließt sich erst bei einer genaueren Betrachtung der einzelnen Iterationsschritte bei der Anwendung des GH-Ansatzes. Zunächst ist festzuhalten, dass im Gegensatz zum TLS-Algorithmus keine direkte Lösung ermittelt wird. Stattdessen erfolgt eine Linearisierung des funktionalen Zusammenhangs für die Gerade.

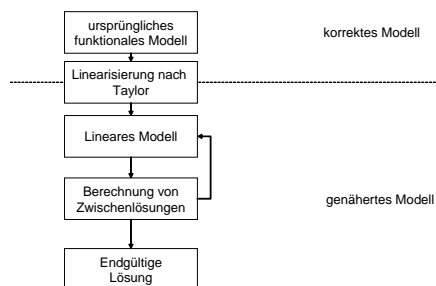


Abbildung 7.3: Verfahrensschritte beim Gauß-Helmert-Ansatz

Erst dieses lineare Modell bildet den Ausgangspunkt für die iterative Berechnung der Parameter unter der Vorgabe der minimalen Verbesserung der Beobachtungen. Wichtig dabei ist die Tatsache, dass es sich um die Parameter des *linearen* Modells handelt und nicht um die des eigentlichen, nichtlinearen Modells. Soll die endgültige Lösung des linearen Modells Gültigkeit für das nichtlineare Modell besitzen, so ist dafür Sorge zu tragen, dass durch die Linearisierung nach Taylor

keine nennenswerte Modellverfälschung auftritt. Der Unterschied zwischen dem ursprünglichen und dem linearisierten Modell entspricht im Fall des GH-Ansatzes der Summe aller Glieder vom Grad $n \geq 2$. Führt man die entsprechenden Ableitungen korrekt aus, so erhält man als Differenz zwischen den Gleichungen des ursprünglichen Modells (7.1) und denen des linearisierten Modells (7.2) das Restglied

$$dm \cdot v_{x_i} \tag{7.6}$$

Nun drängt sich der Gedanke auf, dass dm , also der Zuschlag zu der aktuellen Schätzung für die Geradensteigung, im Verlaufe der Iterationen gegen null geht. Damit sollte der Unterschied zwischen dem nichtlinearen und dem linearisierten Modell eigentlich verschwinden, sofern die Berechnungsschleife genügend oft durchlaufen wird. Offensichtlich ist das nicht der Fall, wie die unterschiedlichen Verbesserungsquadratsummen beider Berechnungen zeigen. Vielmehr zeigt sich bei den einzelnen Berechnungsschritten folgendes Verhalten:

Führt man als erste Näherung für die GH-Berechnung die (korrekten) Lösungen aus dem TLS-Ansatz ein, so werden die in Tabelle 7 dargestellten Parameter und Verbesserungen geschätzt.

Tabelle 7: Lösungen nach der ersten Iteration

Parameter	m	b
	3	-1
Verbesserungen	v_x	v_y
Punkt 1	0.2817	-0.0869
Punkt 2	-0.2817	0.0869
Punkt 3	-0.2817	0.0869
Punkt 4	0.2817	-0.0869

Die entsprechende Verbesserungsquadratsumme beträgt $\Omega_1 = 0.3475$, was geringer ist als die Verbesserungsquadratsumme der TLS-Lösung von $\Omega_{TLS} = 0.3729$. Der „Rest“ wird durch Taylorrestglieder (siehe Tabelle 8) aufgefangen, deren Vorhandensein durch einen Zuschlag zum Steigungsparameter von $dm = -0.2418$ erst möglich gemacht wird.

Tabelle 8: Taylor- respektive Gleichungsrestglieder

	1. Iteration
Gleichung 1	-0.0681
Gleichung 2	0.0681
Gleichung 3	0.0681
Gleichung 4	-0.0681

Das hat im Übrigen zur Folge, dass die eigentliche Geradengleichung gar nicht widerspruchsfrei gelöst wird, wenn man die verbesserten Beobachtungen und die

Parameter der ersten Iteration einsetzt. Stattdessen werden die Gleichungen des linearisierten Modells gelöst, was man letztlich nach Abbildung 7.3 erwarten durfte. Nun erklärt sich auch die Bestimmung der vorliegenden Parameter aus Schritt 1, denn wenn man diesen Schritt isoliert betrachtet, dann ist die Verbesserungsquadratsumme tatsächlich kleiner als die der global gesehen besseren TLS-Lösung. Insofern wird die Minimumsbedingung in diesem Schritt erfüllt.

Im zweiten Iterationsschritt ergeben sich nun die Schätzwerte aus Tabelle 9. Da

Tabelle 9: Lösungen nach der zweiten Iteration

Parameter	m	b
	3	-1
Verbesserungen	v_x	v_y
Punkt 1	0.3	-0.1
Punkt 2	-0.3	0.1
Punkt 3	-0.3	0.1
Punkt 4	0.3	-0.1

nun der Zuschlag für den Steigungsparameter verschwindet, muss auch das Taylorrestglied verschwinden. Dies gilt wohlgerneht keineswegs global, sondern lediglich bezogen auf die Situation nach der ersten Schätzung. Die Verbesserungen aus Tabelle 9 sind in der aktuellen Situation tatsächlich die geringsten, die man an die Beobachtungen anbringen kann. Aufgrund des nicht existenten Taylorrestgliedes verschwinden nun auch die Unterschiede zwischen linearisiertem und ursprünglichem Geradenmodell, so dass die verbesserten Beobachtungen und die Parameter aus Schritt 2 sowohl die ursprünglichen als auch die linearisierten Gleichungen widerspruchsfrei lösen.

Das Beispiel zeigt deutlich, dass eine Linearisierung und anschließende iterative Berechnung wie im GH-Ansatz dann und nur dann erfolgen darf, wenn der mathematische Zusammenhang in Bezug auf die Beobachtungen richtig gewählt wurde. Das heißt insbesondere, dass die Verbesserungen für die Beobachtungen keine relevanten Ausmaße annehmen dürfen. Schon das Vorhandensein eines groben Fehlers widerspricht dieser Forderung, was im Übrigen auch erklärt, warum die TLS-Schätzungen aus Kapitel 7.2 immer besser waren als die der GH-Berechnungen. Ist eine falsche mathematische Modellierung gewählt worden, so müssen bezogen auf dieses Modell alle Beobachtungen als grob fehlerhaft klassifiziert werden. Wie das vorliegende Beispiel zeigt, erfüllen die Schätzergebnisse dann nicht mehr die Forderung nach minimalen Verbesserungen, so dass die Berechnung nach dem GH-Ansatz im Grunde keinen Sinn macht.

Fazit: TLS kann auch mit vielen groben Fehlern im Beobachtungsmaterial umgehen, während GH mit zunehmender Anzahl und Größe der Fehler immer mehr Schwierigkeiten hat, korrekte Ergebnisse zu erzeugen.

7.4 Fallbeispiel 3

7.4.1 Modell

Das folgende Beispiel beschäftigt sich mit der Ausgleichung von Höhennetzen, um die TLS-Methode an einem einfachen praktischen Problem zu spiegeln. Die Grundkonfiguration des Netzes wird durch die Graphik 7.4 dargestellt. Es handelt

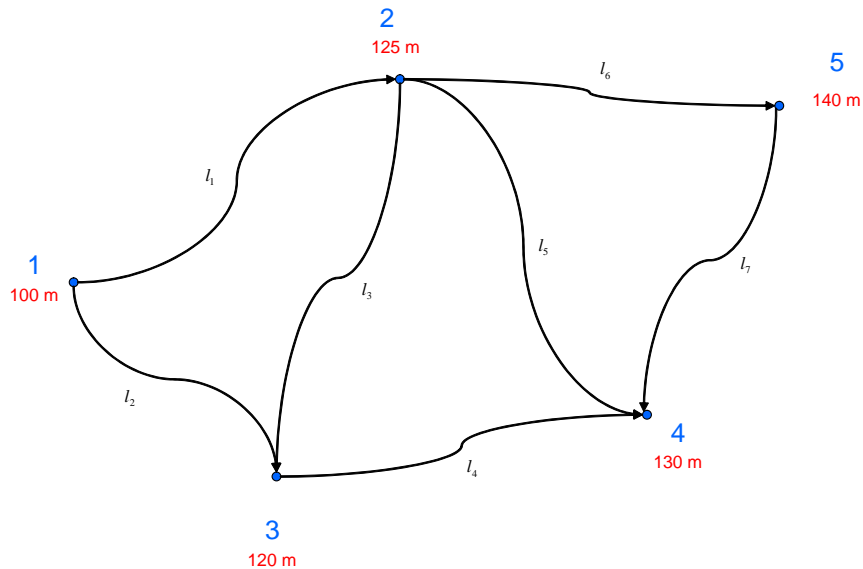


Abbildung 7.4: Topologische Darstellung des Netzes

sich um fünf Höhenpunkte (blau), deren Sollhöhen (rot) neben den Punktnummern vermerkt sind. Die Menge der Beobachtungen besteht aus den gemessenen Höhenunterschieden l_1 bis l_7 . Bezüglich der Beobachtungen wird eine einheitliche Standardabweichung von 0.001 m und keine Korrelation untereinander angenommen. Wird der Punkt 1 auf der Höhe 100 m festgehalten, so kann man folgendes Gleichungssystem aufstellen:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_2 \\ H_3 \\ H_4 \\ H_5 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \\ l_4 \\ l_5 \\ l_6 \\ l_7 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -H_1 \\ -H_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

$A \qquad \hat{x} \qquad \approx \qquad b$

Da es sich nach 5.1.1 offensichtlich um ein Gauß-Markov-Modell handelt, kann die Total-Least-Squares-Methode prinzipiell angewandt werden. Wie in Kapitel 6.4

ausgeführt wurde, kann eine erwartungstreue Schätzung mittels TLS nur dann gelingen, wenn die Einträge in der erweiterten Designmatrix $[A; b]$ voneinander unabhängig sind und die gleiche Varianz bzw. Standardabweichung aufweisen. Betrachtet man den Fehlerhaushalt der Matrix $[A; b]$, so stellt man fest, dass man lediglich für die letzte Spalte, in der die Beobachtungen stehen, Angaben in Sinne von Standardabweichungen treffen kann. Die restlichen Spalten, die aus der Designmatrix A resultieren, bieten keinen Spielraum für Fehler. Schließlich liegen deren Zahlenwerte exakt fest, sobald man weiß, auf welche Punkte die gemessenen Höhenunterschiede Bezug nehmen. Eine geringfügige „Verbesserung“ der Zahlenwerte 0, 1 oder -1 macht im Kontext des mathematischen Modells keinen Sinn.

Somit kann bereits festgehalten werden, dass die klassische TLS-Methode nach Kapitel 6.1 hier nicht geeignet ist, um eine erwartungstreue Schätzung der Parameter zu erhalten. Ein gemischter TLS-Ansatz nach Kapitel 6.2.3 kann theoretisch angesetzt werden, wenn man dabei die ersten vier Spalten der erweiterten Matrix als fehlerfrei deklariert. Diese Vorgehensweise (siehe 6.2.4) entspricht allerdings exakt der Berechnung einer LS-Lösung nach Gauß-Markov. Ein Höhennetz ist folglich kein klassisches Problem für die Anwendung eines TLS-Algorithmus.

7.4.2 Testrechnungen

In mathematischer Literatur wird oft darauf hingewiesen, dass eine TLS-Berechnung auch dann sinnvoll verwendet werden kann, wenn die statistischen Eigenschaften der Modellierung den Anforderungen von Kapitel 6.4 nicht genügen. Deshalb soll nun anhand verschiedener Testrechnungen im Höhennetz untersucht werden, ob sich mittels TLS Erkenntnisse über Modell oder Daten erhalten lassen, die aus der Berechnung nach 5.1.1 nicht oder nicht so deutlich zu Tage treten.

Variante A Es soll untersucht werden, ob TLS in der Lage ist, Ausreißer zu detektieren. Dazu wird ein grober Fehler von 0.05 m in die zweite Beobachtung eingefügt; ein statistisches Rauschen entsprechend der Standardabweichung entfällt zunächst. Der Beobachtungsvektor sieht dann folgendermaßen aus:

$$l^T = (125 \quad 120.05 \quad -5 \quad 10 \quad 5 \quad 15 \quad -10) \quad (7.8)$$

Tabelle 11 gibt die aus TLS resultierende Fehlermatrix zu $[A; b]$ wieder.

Die Erwartung, dass sich der grobe Fehler an der entsprechenden Stelle (rechte Spalte, zweites Element von oben) bemerkbar macht, bestätigt sich nicht. Es ist sogar so, dass dieses Feld sehr geringe Verbesserungen erfährt, die falsche Beobachtung also nur geringfügig verbessert wurde. Dagegen spielt sich ein Hauptteil der Korrekturen in der Designmatrix in den ersten beiden Zeilen ab.

Tabelle 10: Ab-Matrix für Höhennetz, Variante A

1	0	0	0	125
0	1	0	0	120.05
-1	1	0	0	-5
0	-1	1	0	10
-1	0	1	0	5
-1	0	0	1	15
0	0	1	-1	-10

Tabelle 11: Delta-Matrix für Höhennetz, Variante A

0.00003579	0.00003436	0.00003722	0.00004008	-0.00000029
-0.00003578	-0.00003435	-0.00003721	-0.00004007	0.00000029
0.00002236	0.00002147	0.00002326	0.00002505	-0.00000018
-0.00001342	-0.00001288	-0.00001395	-0.00001503	0.00000011
0.00000895	0.00000859	0.00000931	0.00001002	-0.00000007
0.00000448	0.00000430	0.00000465	0.00000501	-0.00000004
0.00000447	0.00000429	0.00000465	0.00000501	-0.00000004

Bei näherer Überlegung ist das auch nicht überraschend: Die Zeilen der Ab-Matrix bilden Vektoren, die so bewegt werden müssen, dass die Dimension des aufgespannten Raumes um 1 verkleinert wird (siehe 6.2). Die ersten vier Elemente der ersten beiden Zeilenvektoren weisen im Verhältnis zur Länge des Vektors kleine Beträge (1 oder 0) auf, während die letzte Komponente fast die ganze Länge des Vektors ausmacht (über 100). Es ist einleuchtend, dass kleine Änderungen der letzten Komponente die Lage des Vektors im Raum kaum verändern, da sie überwiegend längs des Vektors wirken. Die Vektoren müssen aber bewegt werden, um die Dimension des aufgespannten Raumes zu vermindern. Demzufolge müsste die letzte Komponente stark verändert werden, um dieses Ziel nur damit zu erreichen. Zum gleichen Resultat kommt man aber auch, wenn man wesentlich weniger an den ersten, kleinen Komponenten ändert. Hier wirkt die Änderung fast nur quer zum Vektor, verändert also fast ausschließlich die Lage des Vektors im Raum. Da die Verbesserungen insgesamt möglichst klein gehalten werden sollen (siehe 6.1), bietet es sich an, überwiegend die betragsmäßig kleinen Komponenten zu variieren.

Variante B Da das Problem in der vorhergehenden Rechnung aus einer ungünstigen Situation durch die Lagerung des Netzes resultiert, werden nun die

Sollhöhen entsprechend geändert. Es gelte jetzt

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}_1 &= 0 \\
 \tilde{H}_2 &= 1 \\
 \tilde{H}_3 &= 0.5 \\
 \tilde{H}_4 &= 1.5 \\
 \tilde{H}_5 &= 0.5
 \end{aligned}
 \tag{7.9}$$

Der grobe Fehler in der zweite Beobachtung betrage weiterhin 0.05 m.

Tabelle 12: Ab-Matrix für Höhennetz, Variante B

1	0	0	0	1
0	1	0	0	0.55
-1	1	0	0	-0.5
0	-1	1	0	1
-1	0	1	0	0.5
-1	0	0	1	-0.5
0	0	1	-1	1

Tabelle 13 stellt die resultierende Fehlermatrix dar. Im Vergleich zur Variante A

Tabelle 13: Delta-Matrix für Höhennetz, Variante B

0.00402630	0.00209832	0.00602037	0.00206134	-0.00394959
-0.00388183	-0.00202303	-0.00580435	-0.00198738	0.00380788
0.00245741	0.00128069	0.00367446	0.00125812	-0.00241059
-0.00144576	-0.00075346	-0.00216179	-0.00074019	0.00141822
0.00101164	0.00052722	0.00151267	0.00051793	-0.00099237
0.00051630	0.00026907	0.00077201	0.00026433	-0.00050647
0.00049534	0.00025815	0.00074066	0.00025360	-0.00048590

wurden die Beobachtungen nun so konstruiert, dass ihre Beträge im Bereich der Einträge in der Designmatrix liegen. Die kombinierte Matrix $[A; b]$ ist also recht homogen strukturiert, die Vektoren weisen keine bevorzugte Tendenz auf (wie vorher in Richtung der letzten Komponente). Es zeigt sich, dass die Verbesserungen nun relativ gleichmäßig verteilt sind. Das stützt die Erklärung der Ergebnisse von Variante A, da nun keine Komponente besonders ausgeprägt ist und es dementsprechend auch keinen Grund gibt, diese besonders zurückhaltend zu verbessern. Des Weiteren kann man eine Tendenz zu größeren Verbesserungen in den ersten beiden Zeilen erkennen. Ist deshalb in diesen Zeilen ein Fehler zu vermuten? Der nächste Test soll dies klären.

Variante C Es gelten die selben Sollwerte wie in Variante B, allerdings wird nun jede Beobachtung um 1 mm verfälscht; der grobe Fehler von 5 cm unterbleibt zunächst. Tabelle 14 präsentiert die Fehlermatrix dieser Variante.

Tabelle 14: Delta-Matrix für Höhennetz, Variante C

0.00010044	0.00005010	0.00015064	0.00005007	-0.00010049
-0.00010027	-0.00005001	-0.00015039	-0.00004999	0.00010032
0.00001002	0.00000500	0.00001503	0.00000500	-0.00001003
-0.00009027	-0.00004502	-0.00013539	-0.00004500	0.00009032
0.00013048	0.00006508	0.00019570	0.00006505	-0.00013055
-0.00004011	-0.00002001	-0.00006016	-0.00002000	0.00004013
-0.00004014	-0.00002002	-0.00006020	-0.00002001	0.00004016

Es wurden hier Fehler in der Größenordnung der Standardabweichung bei jeder Beobachtung erzeugt. Es ist vorstellbar, dass sich die Fehlerbeiträge nun homogen verteilen, wie es die Fehler im Beobachtungsmaterial tun. Dem ist allerdings nicht so. Vielmehr zeigt sich eine Tendenz hin zu einzelnen Beobachtungszeilen. Die Auswahl der bevorzugten Zeilen hängt davon ab, wie die Fehler verteilt werden, d. h. welche Widersprüche sie hervorrufen. Das kann man sehr leicht erkennen, wenn man das Vorzeichen eines Fehlers in einer Beobachtung testweise umdreht. Man erhält sofort eine vollständig andere Verteilung der Verbesserungen.

Variante D Abschließend soll eine Berechnung mit den Verfälschungen entsprechend der Standardabweichung (siehe Variante C) und dem groben Fehler von 5 cm (siehe Variante B) erfolgen. Es wurden in dieser Variante Fehler in der Grö-

Tabelle 15: Delta-Matrix für Höhennetz, Variante D

0.00396716	0.00206326	0.00592835	0.00202739	-0.00388890
-0.00382687	-0.00199030	-0.00571871	-0.00195569	0.00375137
0.00237028	0.00123275	0.00354204	0.00121131	-0.00232352
-0.00147729	-0.00076831	-0.00220759	-0.00075496	0.00144814
0.00110043	0.00057231	0.00164443	0.00056236	-0.00107872
0.00045666	0.00023750	0.00068242	0.00023337	-0.00044765
0.00043633	0.00022693	0.00065203	0.00022298	-0.00042772

ßenordnung der Standardabweichung bei jeder Beobachtung erzeugt. Zusätzlich ist ein recht grober Fehler in der zweiten Beobachtung vorhanden. Ein erkennbarer Hinweis auf die zweite Beobachtung ist in der E-Matrix allerdings nicht auszumachen. Verschiedene Rechnungen mit unterschiedlichen groben Fehlern in diversen Kombinationen ergeben ein ähnlich diffuses Bild.

7.4.3 Beurteilung

Das vorliegende Beispiel zeigt, dass Höhenetze prinzipiell nicht für die Anwendung der TLS-Methode geeignet sind. Um eine erwartungstreue Schätzung der Parameter zu erhalten, kann der klassische TLS-Ansatz aufgrund der Struktur der Designmatrix nicht verwendet werden. Eine korrekte Anwendung des gemischten TLS-Ansatzes entspricht wiederum exakt der bekannten LS-Lösung des Gauß-Markov-Modells, so dass hierfür keine Notwendigkeit besteht.

Die Anwendung des klassischen TLS trotz der nicht gegebenen Voraussetzungen bietet dem Anwender ebenfalls keine neuen Erkenntnisse. Grobe Fehler in den Beobachtungen können auch unter optimalen numerischen Bedingungen durch TLS nicht erkannt werden; hier ist der bekannte Ansatz eines statistischen Tests basierend auf einer Modellerweiterung im Gauß-Markov-Modell (siehe 5.1.3) wesentlich günstiger. Wie die Ausführungen zu Variante A zeigen, kann aus der Verteilung der Einträge in der Delta-Matrix der TLS-Berechnung auch nicht zuverlässig geschlossen werden, ob das gewählte mathematische Modell richtig war oder nicht.

Fazit:

Die Verbesserungen aus TLS hängen stark von der Datumsgebung ab (und weniger von den tatsächlichen Fehlern)

Grobe Fehler können nicht zuverlässig entdeckt werden.

Eine Überprüfung des Modells gelingt nicht.

7.5 Fallbeispiel 4

7.5.1 Modell

Das nächste Problem, das bezüglich der Eignung für TLS untersucht werden soll, stammt aus dem Bereich der Lagenetze. Die Graphik 7.5 stellt die vorliegende Situation dar. Von dem lagemäßig zu bestimmenden Neupunkt N wurden die Richtungen r_1 bis r_4 und die Strecken s_1 bis s_4 gemessen. Wie allgemein bekannt, sind die vier Unbekannten x_n , y_n , Orientierung o und Streckenmaßstab m zu ermitteln. Der mathematische Zusammenhang zwischen den Beobachtungen und den Unbekannten ist zunächst nichtlinear

$$\begin{aligned} r_i + v_{r_i} &= \arctan \frac{y_i - y_n}{x_i - x_n} - o \\ s_i + v_{s_i} &= m \sqrt{(x_i - x_n)^2 + (y_i - y_n)^2} \end{aligned} \quad (7.10)$$

und muss nach Taylor in lineare Form gebracht werden, wobei Näherungen für diverse Variablen notwendig sind, die durch eine hochgestellte null kenntlich ge-

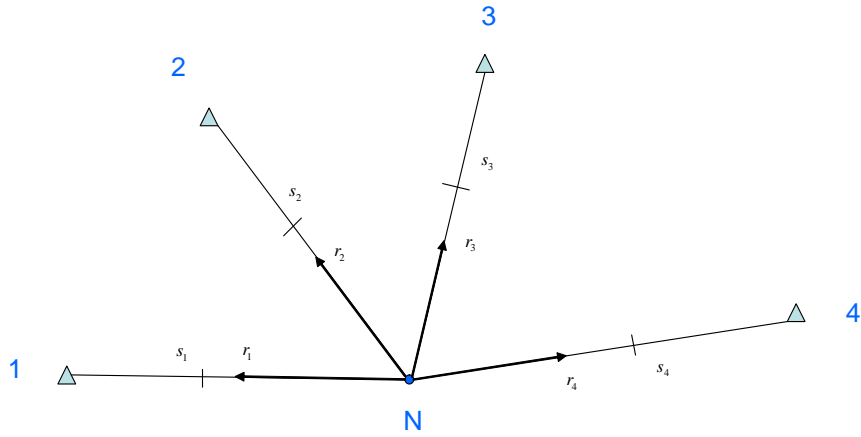


Abbildung 7.5: Freie Stationierung

macht werden.

$$\begin{aligned}
 r_i + v_{r_i} &= r_i^0 - \rho \frac{\cos t_i^0}{s_i^0} dy_n + \rho \frac{\sin t_i^0}{s_i^0} dx_n - do \\
 s_i + v_{s_i} &= s_i^0 + m^0 \sin t_i^0 dy_n - m^0 \cos t_i^0 dx_n + s_i^0 dm
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 r_i^0 &= \text{atan} \frac{y_i - y_n^0}{x_i - x_n^0} - o^0 \\
 s_i^0 &= \sqrt{(x_i - x_n^0)^2 + (y_i - y_n^0)^2}
 \end{aligned}
 \tag{7.11}$$

Es ergibt sich ein Gauß-Markov-Modell

$$\begin{pmatrix}
 -\cos t_1^0 & \sin t_1^0 & 0 & s_1^0 \\
 -\cos t_2^0 & \sin t_2^0 & 0 & s_2^0 \\
 -\cos t_3^0 & \sin t_3^0 & 0 & s_3^0 \\
 -\cos t_4^0 & \sin t_4^0 & 0 & s_4^0 \\
 \rho \frac{\sin t_1^0}{s_1^0} & -\rho \frac{\cos t_1^0}{s_1^0} & -1 & 0 \\
 \rho \frac{\sin t_2^0}{s_2^0} & -\rho \frac{\cos t_2^0}{s_2^0} & -1 & 0 \\
 \rho \frac{\sin t_3^0}{s_3^0} & -\rho \frac{\cos t_3^0}{s_3^0} & -1 & 0 \\
 \rho \frac{\sin t_4^0}{s_4^0} & -\rho \frac{\cos t_4^0}{s_4^0} & -1 & 0
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 dx_n \\
 dy_n \\
 do \\
 dm
 \end{pmatrix}
 \approx
 \begin{pmatrix}
 s_1 \\
 s_2 \\
 s_3 \\
 s_4 \\
 r_1 \\
 r_2 \\
 r_3 \\
 r_4
 \end{pmatrix}
 -
 \begin{pmatrix}
 s_1^0 \\
 s_2^0 \\
 s_3^0 \\
 s_4^0 \\
 r_1^0 \\
 r_2^0 \\
 r_3^0 \\
 r_4^0
 \end{pmatrix}
 \tag{7.12}$$

$A \qquad \hat{x} \qquad \approx \qquad b$

Bemerkung: Die Näherung für den Maßstab m wird üblicherweise zu 1 gesetzt.

Der Fehlerhaushalt der Matrix $[A; b]$ lässt sich wie folgt charakterisieren: Alle Einträge in der dritten Spalte und die unteren vier Einträge in der vierten Spalte

sind fehlerfrei. Die restlichen Einträge in der Matrix sind über unterschiedliche Funktionen abhängig von σ_{x_n} , σ_{y_n} und der Richtung des Vektors $\vec{P}_i - \vec{N}$. Um korrekte Voraussetzungen für eine TLS-Berechnung zu erhalten, müsste man Zeilen- und Spaltenäquilibrierungsmatrizen finden, so dass der Fehlerhaushalt der Matrix $Z[A; b]S$ homogen wird. Es ist jedoch leicht ersichtlich, dass solche Matrizen aufgrund der uneinheitlichen Fehlersituation in $[A; b]$ nicht angegeben werden können. Somit kann auch bei diesem Beispiel die TLS-Methode nicht angewendet werden, wenn die Schätzung der Parameter erwartungstreu sein soll.

Ähnlich wie in Fallbeispiel 3 kann man auch hier versuchen, die TLS-Berechnung trotzdem durchzuführen, um eventuell Modellfehler aufzudecken. Ein solcher Modellfehler kann zum Beispiel vorliegen, wenn vergessen wurde, den Maßstabsfaktor bei der Modellierung zu berücksichtigen, obwohl er aufgrund der Art der Steckenmessung oder aufgrund von Unterschieden des lokalen und des übergeordneten Koordinatensystems anzubringen wäre. In diesem Fall bietet sich ein gemischter TLS-Ansatz an, bei dem die dritte Spalte als fehlerfrei deklariert und somit nicht verbessert wird. Dem Gedanken der geometrischen Interpretation der TLS-Ausgleichung folgend, könnte sich ein korrektes Modell dergestalt auf die Verbesserungsmatrix $[\Delta A; \Delta b]$ auswirken, dass in keinem Bereich der Matrix Bedarf für signifikant größere Veränderungen besteht und deshalb alle Einträge in der Fehlermatrix in etwa gleich groß sein müssten. Ein falsches Modell würde sich dann erkennen lassen, wenn die Verbesserungsmatrix $[\Delta A; \Delta b]$ nicht homogen ist. Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen statistischen Modellen und verschiedenen systematischen Verfälschungen der Beobachtungen zeigen allerdings auch hier, dass die Verteilung der Verbesserungen in der Matrix $[\Delta A; \Delta b]$ nicht von der Korrektheit des angenommenen mathematischen Modells, sondern vielmehr von der Lage der Festpunkte relativ zum zu bestimmenden Neupunkt und damit von den konkreten Einträgen in der Matrix $[A; b]$ abhängen. Im Übrigen gelten hierfür dieselben Überlegungen wie zu Fallbeispiel 3. Eine tabellarische Präsentation der Verbesserungsmatrizen einzelner Testläufe erübrigt sich.

7.5.2 Beurteilung

Wie man an diesem Beispiel klar erkennen konnte, verhindern blockartige Strukturen in der erweiterten Designmatrix eine Anwendung von TLS im Sinne einer erwartungstreuen Schätzung der Parameter. Der Grund ist der, dass es dann nicht möglich ist, per Zeilen- oder Spaltenskalierung (siehe 6.4) das System $[A; b]$ in ein anderes System zu transformieren, dessen Einträge voneinander unabhängig sind und gleiche Standardabweichung aufweisen.

Der Versuch, in diesem noch recht einfachen Fall Modellfehler über eine Berechnung eines klassischen oder gemischten TLS-Ansatzes zu entdecken schlägt ebenfalls fehl. Es zeigt sich vielmehr, dass die Verteilung der Verbesserungen nicht von der Güte des Modells, sondern vielmehr von der Lage der Punkte zueinander, al-

so von den aktuellen Beobachtungen abhängt. Die Ursache dafür liegt wiederum in den Vorschriften, die der Aufstellung der erweiterten Designmatrix zugrunde liegen und damit in der Blockstruktur der Matrix.

Fazit:

Blockartige Strukturen in der Designmatrix stehen einer Anwendung von TLS als erwartungstreuer Schätzer entgegen.

7.6 Fallbeispiel 5

Aus den vorangegangenen Beispielen, insbesondere den Beispielen zu Höhennetzen und Lagenetzen, wird deutlich, dass eine sinnvolle Applikation der TLS-Methode nur dann möglich ist, wenn die erweiterte Designmatrix $[A; b]$ und damit insbesondere die Designmatrix A keine blockartigen Strukturen aufweist, so dass verschiedene Bereiche mit unterschiedlichen statistischen Verhältnissen existieren. Man muss deshalb den Fokus auf Problemstellungen legen, die einen einheitlichen Aufbau der Designmatrix ergeben. Das ist zum Beispiel bei medizinischen Messreihen der Fall: Die wiederholte Messung eines Phänomens ergibt in der linearisierten Modellierung jeweils eine neue Zeile des Gleichungssystems. Der mathematische Zusammenhang ist für jede Zeile gleich, so dass jede Zeile dieselbe Struktur aufweist. Sofern der Versuchsaufbau im Laufe der mehrmaligen Messung des Experimentes nicht verändert wird, kann das statistische Modell jeder Zeile mit Hilfe einer Varianz-Kovarianz-Matrix angegeben werden. Nun kann durch Spaltenskalierung aus dem System $[A; b]$ ein System $[A; b]S$ erzeugt werden, dessen Zeilen voneinander unabhängig sind, wobei die VKM jeder Zeile des transformierten Systems (zumindest annähernd) die Einheitsmatrix ist. Im geodätischen Kontext gilt dies vor allem für Probleme aus dem Bereich der Formanalyse. Das vorliegende Fallbeispiel widmet sich deshalb der Anwendung von TLS bei der Schätzung einer ausgleichenden Kugel für eine gemessene Punktwolke.

Graphik 7.6 stellt das Prinzip der ausgleichenden Kugel dar. Die gemessenen Punkte (rot) eines Objektes sind fehlerbehaftet und werden im Sinne einer orthogonalen Regression verbessert, so dass das Objekt durch die Parameter der Kugel (blau) optimal beschrieben werden kann. Es gilt der funktionale Zusammenhang

$$(x - x_m)^2 + (y - y_m)^2 + (z - z_m)^2 - r^2 = 0 \quad (7.13)$$

Da es sich bei diesem mathematischen Modell um ein nichtlineares handelt, besteht keine Möglichkeit, TLS auf das Modell direkt anzuwenden. Deshalb wird das Modell der Kugel wie üblich nach Taylor linearisiert, wobei hinreichend gute Näherungen für die Kugelparameter x_m , y_m , z_m und r notwendig sind (eine erste Näherung erhält man auf einfache Weise über den Schnitt der drei Mittelebenen für die Punktpaare $\{1,2\}$, $\{2,3\}$ und $\{3,4\}$). Die Linearisierung an der Stelle der

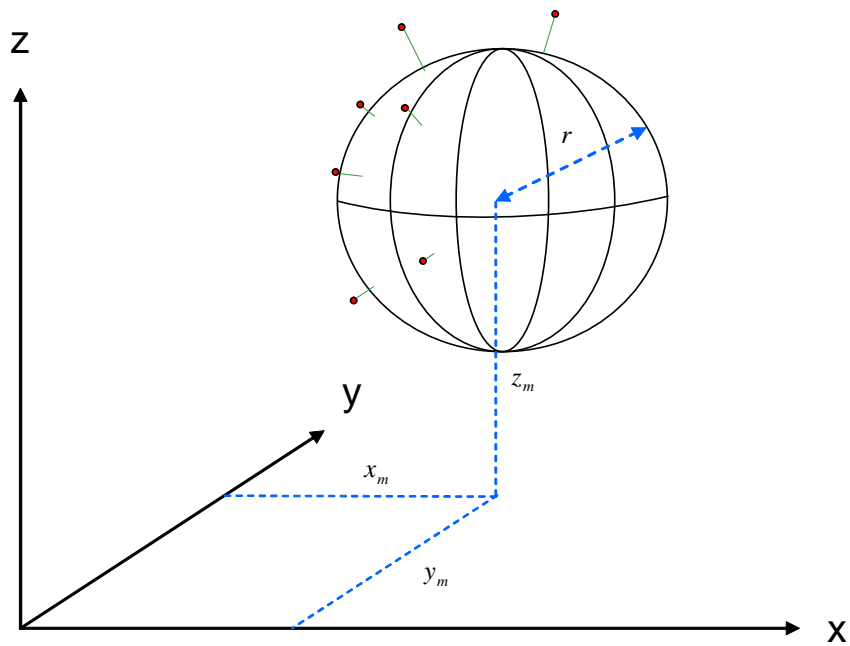


Abbildung 7.6: Parameter der ausgleichenden Kugel

Näherungsparameter ($\hat{\cdot}$) und der Beobachtungen ergibt m Zeilen

$$\begin{aligned}
 0 = & (x_i - \hat{x}_m)^2 + (y_i - \hat{y}_m)^2 + (z_i - \hat{z}_m)^2 - \hat{r}^2 \\
 & - 2(x_i - \hat{x}_m)dx_m - 2(y_i - \hat{y}_m)dy_m - 2(z_i - \hat{z}_m)dz_m - 2\hat{r}dr \\
 & 2(x_i - \hat{x}_m)dx_i + 2(y_i - \hat{y}_m)dy_i + 2(z_i - \hat{z}_m)dz_i
 \end{aligned} \tag{7.14}$$

wobei m die Anzahl der beobachteten Punkte ist. Es handelt sich um ein Gauß-

Helmert-Modell

$$\begin{aligned}
 0 &= Adx + Bv + w \\
 &\text{mit} \\
 dx^T &= (dx_m \quad dy_m \quad dz_m \quad dr) \\
 v^T &= (\cdots \quad v_{x_i} \quad v_{y_i} \quad v_{z_i} \quad \cdots) \\
 w^T &= \begin{pmatrix} \vdots \\ (x_i - \hat{x}_m)^2 + (y_i - \hat{y}_m)^2 + (z_i - \hat{z}_m)^2 - \hat{r}^2 \\ \vdots \end{pmatrix} \\
 B &= \begin{pmatrix} \vdots \\ \cdots \quad 2(x_i - \hat{x}_m) \quad 2(y_i - \hat{y}_m) \quad 2(z_i - \hat{z}_m) \quad \cdots \\ \vdots \end{pmatrix} \\
 A &= \begin{pmatrix} \vdots \\ -2(x_i - \hat{x}_m) \quad -2(y_i - \hat{y}_m) \quad -2(z_i - \hat{z}_m) \quad -2\hat{r} \\ \vdots \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{7.15}$$

Wie aus Kapitel 6.1 ersichtlich ist, setzt TLS ein Gleichungssystem der Art $Ax \approx b$ voraus, was auf das durch Gleichung (7.15) definierte Modell nicht zutrifft. Deshalb muss in einem weiteren Schritt das Gauß-Helmert-Modell (7.15) auf ein Gauß-Markov-Modell zurückgeführt werden. Definiert man

$$\begin{aligned}
 l^* &= F(l, d\hat{x}) = w \\
 A^* &= -A \\
 v^* &= Bv
 \end{aligned} \tag{7.16}$$

so lässt sich Gleichung (7.15) auch durch

$$A^* d\hat{x} = l^* + v^* \tag{7.17}$$

ausdrücken.

Gleichung (7.17) entspricht dem durch die Definition von TLS (siehe 6.2) vorgegebenen Typ, so dass nun eine grundsätzliche Bedingung erfüllt ist, um eine TLS-Berechnung überhaupt durchführen zu können. Die erweiterte Designmatrix $[A; b]$ hat gemäß den Gleichungen (7.15) und (7.16) folgenden Aufbau:

$$[A; b] = [A^*, l^*] = \begin{pmatrix} \vdots \\ 2(x_i - \hat{x}_m) \quad 2(y_i - \hat{y}_m) \quad 2(z_i - \hat{z}_m) \quad 2\hat{r} \quad b_i \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{7.18}$$

wobei $b_i = (x_i - \hat{x}_m)^2 + (y_i - \hat{y}_m)^2 + (z_i - \hat{z}_m)^2 - \hat{r}^2$

Wie bereits in den vorangegangenen Beispielen hinreichend diskutiert wurde, muss zunächst der Fehlerhaushalt der erweiterten Matrix $[A; b]$ angegeben werden. Basierend auf diesen Erkenntnissen kann man dann versuchen, per Zeilen- oder Spaltenskalierung das System $[A; b]$ zu transformieren, so dass die Einträge im transformierten System gleich verteilt und unabhängig voneinander sind.

Bezüglich des Vektors b kann man nach Gleichung (7.16) unter Anwendung des Fehlerfortpflanzungsgesetzes eine komplette VKM angeben:

$$C_b = BC_l B^T \quad (7.19)$$

wobei der Beobachtungsvektor l aus den Koordinaten der gemessenen Punkte besteht.

$$l^T = (\cdots \quad x_i \quad y_i \quad z_i \quad \cdots) \quad (7.20)$$

Damit kann bereits jetzt festgehalten werden, dass eine erwartungstreue Schätzung mittels TLS nicht mehr erfolgen kann, sobald die Matrix C_l voll besetzt ist. Zwar könnte man in einem solchen Fall die letzte Spalte durch Zeilenskalierung mit $C_l^{-\frac{1}{2}}$ vereinheitlichen. Da die VKM C_l jedoch nicht auf die ersten vier Spalten der erweiterten Designmatrix zutrifft, wird die statistische Situation in der transformierten Matrix in diesem Bereich eher verschlechtert als verbessert.

Ist nach streng wissenschaftlichen Gesichtspunkten eine Anwendung von TLS ausgeschlossen, so besteht in der praktischen Formanalyse eventuell dennoch die Möglichkeit TLS einzusetzen: Folgt man den Richtlinien der Norm DIN 32880, so ist die Kofaktormatrix der Beobachtungen als Einheitsmatrix anzusetzen. Das bedeutet, dass man alle beobachteten Punkte als gleich genau betrachtet und eine Korrelation zwischen unterschiedlichen Koordinaten verneint. Unter diesen Annahmen vereinfacht sich auch die Situation im vorliegenden Beispiel erheblich. Zunächst ist

$$\begin{aligned} C_b &= BC_l B^T \\ &= \hat{\sigma}^2 B I B^T \end{aligned} \quad (7.21)$$

und unter Berücksichtigung des mathematischen Modells (7.13)

$$\begin{aligned} \sigma_{b_i}^2 &= \hat{\sigma}^2 [4(x_i - \hat{x}_m)^2 + 4(y_i - \hat{y}_m)^2 + 4(z_i - \hat{z}_m)^2] \\ &\approx 4\hat{r}^2 \hat{\sigma}^2 \end{aligned} \quad (7.22)$$

Stellt man die Varianzen der Einträge der erweiterten Designmatrix in einer Matrix gleichen Aufbaus dar, so erhält man

$$\sigma_{[A;b]}^2 = \begin{pmatrix} & & & & \vdots \\ 4(\sigma_x^2 + \sigma_{\hat{x}_m}^2) & 4(\sigma_y^2 + \sigma_{\hat{y}_m}^2) & 4(\sigma_z^2 + \sigma_{\hat{z}_m}^2) & 4\sigma_{\hat{r}}^2 & 4\hat{r}^2 \hat{\sigma}^2 \\ & & & & \vdots \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

Wie man sieht, spielen die Genauigkeiten der jeweils vorliegenden Näherungen für die Parameter eine wichtige Rolle. Eine sinnvolle Schätzung dieser Genauigkeit ist allerdings während der Iterationen kaum möglich. Um das mathematische Modell der ausgleichenden Kugel bezüglich der vorliegenden Punktwolke zu testen, bietet es sich an, zunächst eine vollständige iterative Berechnung auf Basis des Gauß-Helmert-Modells durchzuführen. Man erhält am Ende Genauigkeitsangaben für die berechneten Parameter, die man dann für die TLS-Skalierung verwenden kann. Nach Gleichung (6.113) wird die Spaltenskalierungsmatrix wie folgt angesetzt:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_{x_m}^2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{\sigma_y^2 + \sigma_{y_m}^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{\sigma_z^2 + \sigma_{z_m}^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sigma_{\hat{r}}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\hat{r}\hat{\sigma}} \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

Nun kann man die erweiterte Designmatrix skalieren ($[A'; b'] = [A; b]S$, siehe (6.118)), so dass der Fehlerhaushalt des Gleichungssystems

$$[A'; b'] \begin{pmatrix} x' \\ -1 \end{pmatrix} \approx 0 \quad (7.25)$$

ausgeglichen sein sollte.

7.6.1 Testrechnungen

Nun ist es interessant zu sehen, wie die ermittelten Zuschläge in der Matrix $[\Delta A'; \Delta b']$ verteilt sind. Nach Kapitel 7.1 könnte eine signifikante Struktur Auskunft darüber geben, ob der mathematische Zusammenhang richtig modelliert wurde oder nicht. Zu diesem Zweck wurden verschiedene Simulationen durchgeführt, deren Ergebnisse in den folgenden Abschnitten vorgestellt werden.

Variante A In einer ersten Variante wurden per Zufallsgenerator Punktwolken unterschiedlicher Größe für eine Kugel errechnet und mit einem einheitlichen Rauschen belegt. Grobe Fehler existieren zum jetzigen Zeitpunkt nicht. Tabelle 16 zeigt die Elemente der Deltamatrix des skalierten Systems $[\Delta A'; \Delta b']$ einer dieser Rechnungen (siehe Gleichung (7.25)). Es zeigt sich wieder, dass die Elemente der Deltamatrix trotz korrektem Modell und Abwesenheit grober Fehler keine einheitliche Struktur aufweisen. Diese Aussage könnte nur für die ersten vier Spalten getroffen werden; die letzte Spalte fällt deutlich aus dem Rahmen. Wenn man Gleichung (7.18) näher betrachtet, dann findet man die Erklärung für dieses Verhalten des TLS-Schätzers: Die Elemente der letzten Spalte werden nach $(x_i -$

Tabelle 16: Delta-Matrix (korrektes Modell, Rauschen, keine groben Fehler)

-1.0E-10	2.3E-10	4.3E-11	9.9E-11	-1.1E-3
5.3E-11	-1.2E-10	-2.2E-11	-5.1E-11	5.6E-4
-3.1E-10	6.9E-10	1.3E-10	3.0E-10	-3.4E-3
1.0E-10	-2.2E-10	-4.1E-11	-9.6E-11	1.1E-3
-4.4E-10	9.7E-10	1.8E-10	4.3E-10	-4.7E-3
9.3E-10	-2.1E-9	-3.9E-10	-9.0E-10	1.0E-2
-6.1E-10	1.3E-9	2.5E-10	5.8E-10	-6.5E-3
2.0E-10	-4.5E-10	-8.5E-11	-2.0E-10	2.2E-3
7.6E-10	-1.7E-9	-3.1E-10	-7.3E-10	8.1E-3
5.1E-10	-1.1E-9	-2.1E-10	-4.9E-10	5.5E-3
-8.8E-10	1.9E-9	3.6E-10	8.4E-10	-9.4E-3
-2.2E-10	4.8E-10	9.0E-11	2.1E-10	-2.3E-3

$\hat{x}_m)^2 + (y_i - \hat{y}_m)^2 + (z_i - \hat{z}_m)^2 - \hat{r}^2$ ermittelt. Der Erwartungswert des Ausdrucks ist null, wobei die unvermeidlichen Messfehler in den Variablen x_i , y_i und z_i dafür sorgen, dass dieser Erwartungswert selten exakt erreicht wird. Die anderen Spalten der Matrix $[A'; b']$ erhalten durch (7.18) jedoch Werte, die deutlich von null abweichen. Wie bereits in Fallbeispiel 3 und 4 diskutiert wurde, erreicht der Schätzer sein Ziel der Rangreduzierung mit dem geringsten Aufwand, wenn er den betragsmäßig kleinsten Komponenten die größten Verbesserungen zuteilt. Folgerichtig ergibt sich die Deltamatrix aus Tabelle 16.

Variante B In der nun beschriebenen Variante wurde zunächst in gleicher Weise eine größere Anzahl an verrauschten Punktwolken für eine Kugel erzeugt. Um zu sehen, ob der TLS-Schätzer einen groben Fehler identifizieren kann, wurde jeweils beim ersten Punkt ein grober Fehler im Bereich der zehnfachen Standardabweichung der Punktkoordinaten erzeugt. Die weitere Berechnung erfolgte analog zu Variante A. Die resultierende Deltamatrix einer dieser Berechnungen ist in Tabelle 17 dargestellt. Der grobe Fehler im ersten Punkt sticht wie in Fallbeispiel 3 nicht deutlich hervor. Zwar ist der oberste Wert in der letzten Spalte, der dem Punkt mit dem groben Fehler zuzuordnen ist, mit $4.7E-2$ der dem Betrag nach GröÙte in der gesamten Spalte. Die Verbesserung des (regulären) zweiten Punktes ist mit $4.6E-2$ jedoch nur unwesentlich kleiner, so dass beim Betrachten der Matrix kaum auf einen groben Fehler im ersten Punkt geschlossen werden kann.

Zum Vergleich mit Tests nach konventionellen Methoden wurde für dieselbe Punktwolke eine ausgleichende Kugel über ein Gauß-Helmert-Modell berechnet (siehe (7.15)). Im Zuge dessen wurde für jeden Punkt ein mehrdimensionaler Beobachtungstest durchgeführt (Herleitung siehe Kapitel 5.2.3). Tabelle 18 stellt die Ergebnisse aus der Berechnung des Gauß-Helmert-Modells dar. Betrachtet

Tabelle 17: Delta-Matrix (korrektes Modell, Rauschen, grober Fehler im ersten Punkt)

-1.9E-7	-3.6E-9	1.2E-8	-1.2E-7	4.7E-2
-1.8E-7	-3.5E-9	1.1E-8	-1.2E-7	4.6E-2
2.6E-8	5.0E-10	-1.6E-9	1.7E-8	-6.5E-3
4.6E-8	8.7E-10	-2.8E-9	3.0E-8	-1.1E-2
5.2E-8	9.9E-10	-3.2E-9	3.4E-8	-1.3E-2
5.2E-8	9.9E-10	-3.2E-9	3.4E-8	-1.3E-2
1.2E-7	2.3E-9	-7.4E-9	7.8E-8	-3.0E-2
-3.9E-8	-7.4E-10	2.4E-9	-2.5E-8	9.6E-3
-3.0E-8	-5.8E-10	1.9E-9	-2.0E-8	7.6E-3
-4.9E-8	-9.3E-10	3.0E-9	-3.2E-8	1.2E-2
1.2E-7	2.2E-9	-7.1E-9	7.5E-8	-2.9E-2
7.9E-8	1.5E-9	-4.9E-9	5.1E-8	-2.0E-2

Tabelle 18: Punkte, Verbesserungen und statistische Tests der Punkte

Punktindex	Testwert	krit. Wert	Signifikanz?
1	68.4	7.9	ja
2	32.3	7.9	ja
3	0.6	7.9	nein
4	1.9	7.9	nein
5	2.4	7.9	nein
6	2.1	7.9	nein
7	13.4	7.9	ja
8	1.5	7.9	nein
9	0.8	7.9	nein
10	2.0	7.9	nein
11	11.5	7.9	ja
12	5.8	7.9	nein

man die Testwerte der einzelnen Punktbeobachtungen, so stellt man fest, dass der erste (fehlerhafte) Punkt einen Wert von 68.4 aufweist. Er liegt sehr deutlich über dem kritischen Wert von 7.9, so dass der Punkt eindeutig als Ausreißer klassifiziert wird. Verschmierungseffekte (siehe [52]) und die Größe des groben Fehlers sorgen dafür, dass auch andere Punkte als fehlerhaft angesehen werden. Ihre Testwerte erreichen jedoch maximal 32.3 und liegen damit deutlich unter dem Wert für Punkt 1. Eliminiert man nach der Strategie des iterativen Datasnoopings den ersten Punkt und führt erneut eine Ausgleichung durch, dann wird unter den verbliebenen Punkten kein grober Fehler mehr angezeigt.

Wie man an dem Beispiel sehen kann, weist der statistische Test auf der Grundlage des Gauß-Helmert-Modells deutlich auf den groben Fehler hin, wohingegen aus den Ergebnissen aus der TLS-Berechnung kaum auf einen vorliegenden groben Fehler geschlossen werden kann. Der Test nach Kapitel 5.2.3 ist deshalb zur Beurteilung der Beobachtungen vorzuziehen.

Das vorgestellte Beispiel wurde beispielhaft aus einer Simulationsreihe von hundert zufällig erzeugten Kugelpunktwolken ausgewählt. Bei allen anderen Testrechnungen ergab sich ein ähnliches Bild, auch wenn die Zahlenwerte naturgemäß schwanken. In Tabelle 19 werden die Extremwerte und die Mittelwerte für die Kenngrößen in den TLS- respektive GH-Berechnungen zusammengefasst. Bei allen Beispielen ergab sich ein ähnliches Bild wie in dem oben präsentierten Ergebnis.

Tabelle 19: Kennzahlen der Simulationsreihe

	Minimum	Maximum	Mittelwert
Delta-Matrix-Element	0.027	0.092	0.067
GH-Testwert	14.919	117.266	70.102

Variante C Nun wird eine Situation erzeugt, in der das komplette mathematische Modell falsch gewählt wurde. Zu diesem Zweck wird in die Ausgleichung der Kugel eine Punktwolke eingeführt, die einen Zylinder repräsentiert. Die Deltamatrix, die sich aus dieser Berechnung ergibt, wird durch Tabelle 20 wiedergegeben. Man erkennt sofort, dass die durch TLS ermittelten Verbesserungen wesentlich größer sind als diejenigen aus Variante A oder B, bei denen das mathematische Modell richtig war. Lagen die Verbesserungen der ersten vier Spalten bei den vorangegangenen Beispielen im Mittel bei E-8, so erreichen sie nun Beträge im Bereich E-2. Es stellt sich nun die Frage, ob die vergleichsweise hohen Werte ausschließlich durch das falsche Modell verursacht werden oder ob eine ähnliche Situation auch bei einem richtigen Modell vorkommen kann.

Variante D Um die offene Frage aus Variante C zu klären, wurden verschiedene Simulationen mit Kugelkoordinaten berechnet, die sich durch die Stärke des

Tabelle 20: Delta-Matrix (falsches Modell)

-4.8E-3	3.3E-3	-2.8E-2	-1.0E-2	5.0E-1
-5.9E-2	4.1E-2	-3.4E-1	-1.2E-1	6.1E0
2.0E-3	-1.4E-3	1.2E-2	4.1E-3	-2.1E-1
-3.4E-2	2.4E-2	-2.0E-1	-7.1E-2	3.5E0
5.1E-2	-3.5E-2	3.0E-1	1.1E-1	-5.2E0
-1.8E-3	1.2E-3	-1.0E-2	-3.7E-3	1.8E-1
2.3E-2	-1.6E-2	1.3E-1	4.7E-2	-2.3E0
3.7E-2	-2.6E-2	2.2E-1	7.8E-2	-3.9E0
9.4E-3	-6.5E-3	5.5E-2	1.9E-2	-9.7E-1
3.8E-2	-2.6E-2	2.2E-1	7.9E-2	-3.9E0
7.2E-3	-4.9E-3	4.2E-2	1.5E-2	-7.4E-1
-6.5E-2	4.5E-2	-3.8E-1	-1.4E-1	6.7E0

Rauschens voneinander unterscheiden. Tabelle 21 stellt die Deltamatrix einer dieser Berechnungen dar. Vergleicht man diese Deltamatrix mit der aus Variante C,

Tabelle 21: Delta-Matrix (richtiges Modell, sehr starker Rausch)

-9.6E-2	-3.0E-3	-2.3E-3	7.7E-2	-3.2E0
1.2E-1	3.7E-3	2.9E-3	-9.7E-2	4.1E0
-1.1E-1	-3.3E-3	-2.6E-3	8.7E-2	-3.6E0
1.3E-2	4.0E-4	3.1E-4	-1.0E-2	4.3E-1
6.6E-2	2.0E-3	1.6E-3	-5.3E-2	2.2E0
3.2E-2	9.9E-4	7.8E-4	-2.6E-2	1.1E0
2.9E-2	8.9E-4	7.0E-4	-2.3E-2	9.6E-1
-1.2E-2	-3.8E-4	-3.0E-4	9.9E-3	-4.1E-1
-5.5E-2	-1.7E-3	-1.4E-3	4.5E-2	-1.9E0
-4.3E-2	-1.3E-3	-1.0E-3	3.5E-2	-1.4E0
6.7E-2	2.1E-3	1.6E-3	-5.4E-2	2.3E0
-1.7E-2	-5.2E-4	-4.1E-4	1.4E-2	-5.7E-1

dann muss man feststellen, dass sich beide Ergebnisse stark ähneln. Die Bereiche, in denen sich die Verbesserungen beider Varianten bewegen, sind identisch. Damit ist eine Situation vorhanden, deren Ergebnis trotz richtigem mathematischem Modell nicht von den Berechnungen zu unterscheiden ist, bei denen ein völlig falscher mathematischer Zusammenhang vorlag. Im Umkehrschluss kann von einer Deltamatrix, wie sie in Variante C präsentiert wurde, nicht zwingend auf eine falsche Modellierung geschlossen werden.

7.6.2 Beurteilung

Das dargestellte Fallbeispiel zeigt deutlich, dass die TLS-Methode im Kontext der Formanalyse kaum sinnvoll anzuwenden ist.

Zunächst muss man feststellen, dass bereits bei der Modellbildung wesentliche Vereinfachungen zu treffen sind, um eine TLS-Berechnung überhaupt durchführen zu können. Zunächst war es nötig, das Gauß-Helmert-Modell, das der Kugel zugrunde liegt, in ein Gauß-Markov-Modell zu überführen. Schon dadurch wird eine statistische Beurteilung der eingeführten Beobachtungen erschwert, weil deren Verbesserungen nach der Umformung (7.16) nicht mehr direkt vorliegen. Danach musste man feststellen, dass die Voraussetzungen für TLS überhaupt nur dann vorliegen können, wenn die Kovarianzmatrix der Beobachtungen eine Einheitsmatrix ist (siehe (7.19)). Selbst dann ist die vorliegende Fehlersituation nur genähert homogen (siehe (7.23)), so dass auch die Spaltenskalierungsmatrix nach (7.24) streng genommen nur eine Vermutung darstellt.

Zudem zeigen die dargestellten Beispiele, dass weder ein vorhandener grober Fehler noch eine falsche Modellbildung zuverlässig erkannt werden kann. Bei einem groben Fehler heben sich die Verbesserungen in den entsprechenden Bereichen der Deltamatrix nicht deutlich genug von den übrigen ab. Bei einer falschen Modellierung sind zwar die Verbesserungen allgemein deutlich zu groß; wie Variante D zeigt, kann das allerdings auch durch starkes Rauschen verursacht worden sein.

Fazit:

Erwartungstreue ist nicht gegeben.

Grobe Fehler in Beobachtungen können mit dem GH-Test besser aufgedeckt werden.

Modellfehler können mit TLS nicht zuverlässig erkannt werden.

7.7 Erkenntnisse aus den Fallbeispielen

Die vorangegangenen Fallbeispiele illustrierten die Eigenschaften des TLS-Ansatzes im Kontext geodätischer Problemstellungen. Die gewonnenen Erkenntnisse werden nun noch einmal in Bezug auf die Fragen zusammengefasst, die in Kapitel 7.1 formuliert worden sind.

Effizienz Bezüglich der grundsätzlichen Berechnungsweisen TLS über eine Singulärwertzerlegung (TLS-SVD), TLS über Rückführung auf ein Gauß-Helmert-Modell (TLS-GH) und Gauß-Helmert-Modell (GH) ist zu bemerken, dass vor allem die iterative Berechnung von TLS-GH verhältnismäßig speicherintensiv ist. Das liegt vor allem an dem neuen Beobachtungsvektor l' , dessen Länge nun $(n + 1) \times m$ beträgt (anstatt n wie im ursprünglichen Modell). Auch die Matrix B ist hier ausgesprochen groß, wenn auch spärlich besetzt. Zudem muss B bei

jedem Schleifendurchlauf neu gebildet werden. Die klassische TLS-Berechnung über eine Singulärwertzerlegung hat gegenüber den beiden iterativen Verfahren GH und TLS-GH den Vorteil, dass die Berechnung der Parameter in einem Schritt vollzogen ist. Auf der anderen Seite ist die reine Berechnung der Singulärwertzerlegung verhältnismäßig aufwändig, so dass der Vorteil des direkten Verfahrens gegenüber der iterativen Berechnung teilweise wieder verloren geht. Das GH-Modell liegt vom Berechnungsaufwand zwischen TLS-SVD und TLS-GH, wobei die Berechnungsdauer stark von der Güte der eingeführten Näherungsparameter abhängt. Im Normalfall, also bei gutartigen Problemen und nicht ganz abwegigen ersten Näherungen, benötigt man jedoch selten mehr als zehn Iterationen, bis keine signifikante Verbesserung der geschätzten Parameter mehr eintritt.

Bei Performance-Tests mit praktischen Beispielen normaler Dimension zeigt sich, dass die Unterschiede der reinen Rechenzeiten von TLS-SVD, TLS-GH und GH eher theoretischer Natur sind. Eine Implementierung aller drei Algorithmen ohne spezielle Effizienzsteigerungen aus Kenntnis der inhärenten Struktur der beteiligten Matrizen in Java lässt erkennen, dass die Ausgabe der Ergebnisse auf die Konsole in allen Fällen länger dauerte als die Berechnung der Parameter selbst. Auch eine Bedienung der Bibliotheken mittels einer GUI, die auf den Swing-Klassen basiert macht deutlich, dass das Antwortzeit-Verhalten des Systems überwiegend vom Thread-Handling der Oberfläche abhängen; die Berechnungsdauer spielt keine merkliche Rolle. Insofern ist aus der Sicht des Praktikers keiner der drei Ansätze grundsätzlich schneller als der andere, sofern es sich um normal dimensionierte Probleme handelt.

Steigt die Anzahl der Beobachtungen stark an, wie zum Beispiel bei der Auswertung von Laser-Scanner-Daten, wo Zehntausende von Objektpunkten innerhalb kürzester Zeit gemessen werden, dann sind vor allem Probleme beim Speicherbedarf zu erwarten. Durch die Anwendung von Sparse-Techniken bei der Behandlung der beteiligten Matrizen kann die TLS-GH Berechnung sicherlich wesentlich optimiert werden. Das ist schon durch die große, aber dünn besetzte und strukturiert aufgebaute B -Matrix zu erwarten. Auch der symmetrische Aufbau der Normalgleichungsmatrix verspricht Verbesserungspotenzial. Letzteres trifft auch auf die gewöhnliche GH-Berechnung zu. Gegenstand dieser Arbeit war jedoch die Untersuchung der grundsätzlichen Eignung der TLS-Technik für geodätische Problemstellungen und nicht die Untersuchung von Optimierungsmöglichkeiten durch Anwendung von Sparse- und anderen Techniken. Aus diesem Grund wird nicht weiter auf den speziellen Aspekt der Berechnung von großen speicherintensiven TLS- bzw. GH-Problemen eingegangen.

Empfindlichkeit gegenüber Ausreißern Anhand der Fallbeispiele 1 und 2 (siehe 7.2 und 7.3) lässt sich sehr gut das Verhalten des klassischen TLS-Algorithmus bei qualitativ unterschiedlichen Beobachtungen beurteilen. In beiden Beispielen wird eine ausgleichende Gerade berechnet, weil die Erwartungswerte

einer gemischten TLS-Berechnung (siehe Kapitel 6.2.3) und der bekannten GH-Berechnung (siehe 5.2.1) hier identisch sind. Da die GH-Berechnung in diesem Fall hinreichend untersucht ist, kann man deren Ergebnisse als Referenz für die TLS-Berechnung auffassen. Aufgrund verschiedener Aussagen in mathematischer Standardliteratur (z. B. [49]) ist zu erwarten, dass die Schätzung der Parameter mittels TLS immer unzuverlässiger wird, je stärker die Beobachtungen verfälscht sind.

Im ersten Fallbeispiel besitzen die eingeführten Beobachtungen die Eigenschaft, dass ihre Sollwerte tatsächlich auf einer Geraden liegen. Das angenommene Modell einer ausgleichenden Geraden ist richtig gewählt. Verschiedene Berechnungen mit leicht verrauschten Beobachtungen in Kombination mit groben Fehlern in einer Beobachtung zeigen, dass die TLS-Berechnung im Kontext der angenommenen statistischen Parameter dieselben Schätzungen wie die GH-Berechnung hervorbringt, ungeachtet eines vorliegenden Rauschens oder grober Fehler in den Beobachtungen. Wenn man die Verbesserungsquadratsumme als Maß für die Qualität der Schätzung betrachtet, so ist die TLS-Schätzung im unverrauschten Fall ohne grobe Fehler identisch mit der GH-Berechnung, in allen anderen Fällen sogar besser. Dabei wird die Differenz der Verbesserungsquadratsummen größer, je stärker die Beobachtungen verfälscht worden sind. Somit ist die TLS-Berechnung nicht etwa anfällig gegenüber falschen Beobachtungen, sondern im Gegenteil unempfindlicher als der bekannte GH-Ansatz.

Im zweiten Fall wurden für die Geradenschätzung Beobachtungen eingeführt, die in Wirklichkeit auf einer Parabel liegen. Das mathematische Modell der Ausgleichung ist unpassend. Hinsichtlich der Schätzung einer Geraden liegen also nun ausschließlich grobe Fehler vor. Verschiedene Tests mit zufällig erzeugten Parabelpunkten zeigen, dass die Schätzung der Parameter aus der TLS-Berechnung hinsichtlich der Minimierung der Verbesserungsquadratsumme deutlich besser ist als die der GH-Berechnung. Auch die geschätzten Parameter unterscheiden sich nun signifikant. Auch wenn die Schätzwerte aufgrund des falschen Modells letztlich irrelevant sind, so zeigt das Beispiel doch deutlich, dass der TLS-Ansatz mit groben Fehlern wesentlich besser zurechtkommt als das GH-Modell. Die GH-Berechnung ist in diesem Fall gar nicht mehr in der Lage, die Minimumsbedingung zu erfüllen, was die Existenz der besseren und deutlich unterschiedlichen Schätzung aus dem TLS-Ansatz beweist.

Die beiden Beispiele zeigen, dass der klassische TLS-Ansatz nicht empfindlich auf ungenaue Beobachtungen reagiert. Vielmehr ist seine Schätzung zuverlässiger als die bekannte iterative Berechnung über ein GH-Modell.

Genauigkeit der Parameterschätzung In mathematischer Literatur (z. B. [3, Seite 177]) ist bisweilen von einer Genauigkeitssteigerung von 10 bis 15% die Rede, wenn man statt des LS- den TLS-Ansatz zur Parameterschätzung verwen-

det. Das hört sich für einen Geodäten sehr vielversprechend an, da man in der Geodäsie die Werte der Parameter immer mit ihren Genauigkeitsangaben verbindet und deshalb grundsätzlich an Verfahren interessiert ist, die eine höhere Genauigkeit versprechen. Die Verifizierung der oben genannten Aussage gestaltet sich jedoch schwierig. Zunächst definiert der Ausdruck „Genauigkeitssteigerung von X%“ kein nachprüfbares Kriterium: Ist damit die unterschiedliche Erfüllung der Minimumsbedingung gemeint? Oder die Schätzwerte der Parameter im Vergleich zu den Sollwerten? Unter welchen Bedingungen soll der Vergleich gezogen werden? Die betreffenden Literaturstellen ([3], [49]) geben leider keine genaueren Hinweise darauf, wie die Aussage zu verstehen ist. Betrachtet man die gängigen Anwendungen von TLS ([50], [13], [12], [49], etc.), dann fällt allerdings auf, dass der LS-Ansatz häufig durch ein Gauß-Markov-Modell $Ax \approx b$ behandelt wird. Von der Anwendung des wesentlich flexibleren Gauß-Helmert-Modells ist nicht die Rede. Unter diesem Gesichtspunkt lässt sich die Behauptung einer Genauigkeitssteigerung erklären. Man betrachte wiederum den einfachen Fall der ausgleichenden Geraden

$$y = mx + b \quad (7.26)$$

Zur Ermittlung der LS-Lösung wird in [49] der Modellansatz

$$A \begin{pmatrix} \hat{m} \\ \hat{b} \end{pmatrix} = y + v_y \quad (7.27)$$

mit $A = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots \\ x & 1 \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix}$

gewählt. Es handelt sich um ein einfaches Gauß-Markov-Modell; nur die Y-Koordinaten werden verbessert, die X-Koordinaten bleiben unverändert (siehe 2.1). Dem wird der gemischte TLS-Ansatz

$$([A; y] - [\Delta A; \Delta y]) \begin{pmatrix} \hat{m} \\ \hat{b} \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (7.28)$$

gegenübergestellt. Das Prinzip der TLS-Schätzung für diesen Fall stellt das Bild 2.3 graphisch dar. Die Autoren geben an, dass die TLS-Schätzung der Geradenparameter \hat{m} und \hat{b} exakter ist als die der LS-Schätzung, und gehen dabei von der Voraussetzung aus, dass die Koordinatenwerte beider Achsen, also sowohl die X- als auch die Y-Werte der beobachteten Stützpunkte der Geraden, ungenau sind und deshalb verbessert werden sollten.

Zweifelsohne ist unter dem skizzierten statistischen Modell eine orthogonale Regression, wie sie der gemischte TLS-Ansatz hervorbringt, zur Lösung des Schätzproblems geeignet und wird zuverlässigere Ergebnisse hervorbringen als der Ansatz eines Gauß-Markov-Modells nach (7.27), wo nur die Y-Komponenten der

gemessenen Punkte verbessert werden und die Tatsache unberücksichtigt bleibt, dass die X-Koordinaten keineswegs fehlerfrei sind. Allerdings heißt das zunächst nur, dass bei (7.27) ein falsches Modell gewählt wurde und nicht, dass das LS-Prinzip hier grundsätzlich falsch wäre. In der Tat ist über den Ansatz eines Gauß-Helmert-Modells eine orthogonale Regression auf LS-Basis ohne weiteres zu realisieren. Wie das Fallbeispiel 1 zeigt, ist der Unterschied zwischen den Ergebnissen der TLS- und der passenden GH-Ausgleichung zu vernachlässigen, wenn das mathematische Modell passend war. Wenn keine groben Fehler in den Beobachtungen vorliegen, unterscheiden sich die nach beiden Methoden ermittelten Parametersätze lediglich im Bereich E-9, die einzelnen Verbesserungen stimmen auf etwa E-8 überein und die Verbesserungsquadratsummen, also das eigentliche Ausgleichungsziel, sind im Rahmen der Rechengenauigkeit identisch.

Von einer grundsätzlich exakteren Schätzung mittels TLS im Vergleich zu LS kann man also nicht ausgehen. Vielmehr resultieren die augenscheinlich besseren Ergebnisse in den genannten Beispielen aus einem falschen Modellansatz zur Lösung des LS-Problems. Zu diesem Schluss kommt im Übrigen auch Petrović in [40, Seite 54 ff]. Er vertritt die Meinung, dass LS und TLS lediglich Spezialfälle einer korrekten Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate sind, und zieht die Konsequenz, dass „LS und TLS nicht zwei unterschiedliche Methoden sind, sondern Anwendungen der gleichen Methode (Ausgleichung nach kleinsten Quadraten) auf zwei unterschiedliche Aufgabenstellungen“. Es ist also nicht eine der beiden Methoden besser als die andere, es ist nur wichtig, das zum Problem passende mathematische Modell zu wählen.

Geeignete Problemstellungen für TLS Das Fallbeispiel 3 zeigt deutlich, dass sich einfache Höhenetze nicht für die Berechnung durch TLS eignen. Der klassische TLS-Ansatz (siehe Kapitel 6.1) kann nicht angesetzt werden, weil die Struktur der Designmatrix dies verhindert (Vorhandensein fehlerfreier Elemente). Wendet man den gemischten TLS-Ansatz nach Kapitel 6.2.3 an, was mathematisch korrekt ist, dann erhält man eine Lösung, die exakt der eines gewöhnlichen Gauß-Markov-Ansatzes entspricht. Dann stellt sich allerdings die Frage nach dem Sinn der Einführung dieser neuen Berechnungsmethode.

Lagenetze eignen sich ebenfalls nicht zur Berechnung der Unbekannten nach der TLS-Methode, wie Fallbeispiel 4 vor Augen führt. Vielmehr wurde deutlich, dass blockartige Strukturen der Designmatrix einer erwartungstreuen Berechnung der Unbekannten entgegen stehen, weil dann die notwendigen statistischen Voraussetzungen (siehe 6.4) nicht hergestellt werden können.

Nach den Analysen der Lage- und Höhenetzberechnungen wurde deutlich, dass eine Anwendung von TLS überhaupt nur dann sinnvoll sein kann, wenn die Fehlersituation in der Designmatrix entweder eine Zeilen- oder eine Spaltenstruktur, aber keine Blockstruktur aufweist. Diese Forderung führt zum Bereich der Form-

analyse, wo die Zeilen der Designmatrix üblicherweise nach dem selbem Muster aufgebaut sind. Somit sollte es möglich sein, durch eine Spaltenskalierung an ein (transformiertes) Gleichungssystem zu kommen, dessen Fehlerhaushalt homogen ist. Allerdings zeigen die Ausführungen zur Modellierung am Beispiel der ausgleichenden Kugel, dass bereits bei diesem einfachen Modell zahlreiche Vereinfachungen nötig sind, um überhaupt eine TLS-Berechnung durchführen zu können. Eine erwartungstreue Schätzung per TLS kann deshalb nicht gelingen. Liegen zudem noch Restriktionen bezüglich der Unbekannten vor, wie es im Bereich der Formanalyse durchaus üblich ist, dann scheidet ein TLS-Ansatz völlig aus.

Anwendungen ohne exakte Einhaltung der TLS-Voraussetzungen Wie bereits angesprochen ist in gängiger Literatur zu TLS häufig davon die Rede, dass TLS auch dann angewendet werden kann, wenn die statistischen Voraussetzungen nicht zu hundert Prozent erfüllt sind [49, Seite 91]. Aus diesem Grund wurde versucht, anhand der Struktur der Verbesserungsmatrix aus der TLS-Berechnung Rückschlüsse auf grobe Fehler oder komplett falsche Modellierungen zu ziehen. Dem liegt der Gedanke zugrunde, dass im Zuge der TLS-Berechnung der Rang der Matrix $[A; b]$ mit möglichst minimalem Aufwand um eins verkleinert wird. Wie die Ausführungen in 6.1.3 zeigen, kann man die Spalten der Matrix $[A; b]$ als Vektoren auffassen, die so aufeinander zu bewegt werden, dass sie im nächstkleineren Subraum liegen, wobei die Bewegung insgesamt möglichst klein sein soll. Ist keine künstliche Verzerrung in Form grober Fehler oder eines falschen Modells vorhanden, so müssten die Bewegungen der Vektoren relativ ähnlich ausfallen, die Verbesserungen in der Deltamatrix also in etwa gleich groß sein. Umgekehrt sollte ein grober Fehler dazu führen, dass ein Bereich der Matrix größeren Bedarf an Verbesserung hat als andere Bereiche. Dies sollte sich in der Deltamatrix widerspiegeln.

Die Fallbeispiele 3, 4 und 5 zeigen allerdings deutlich, dass solche Rückschlüsse aus der Deltamatrix zumindest fragwürdig sind. So fallen bei groben Fehlern die Verbesserungen an den entsprechenden Stellen der Designmatrix nicht oder nicht deutlich größer aus als in den übrigen Bereichen. Wenn sich das Problem durch ein Gauß-Markov- oder ein Gauß-Helmert-Modell ausdrücken ließ, dann wären die bekannten Suchstrategien nach groben Fehlern (siehe 5.1.3 und 5.2.3) wesentlich zuverlässiger als die Betrachtung der Deltamatrix aus der TLS-Ausgleichung. Bei den Testrechnungen zu den Lagenetzen konnte man erkennen, dass die Verteilung der Verbesserungen weniger von der Qualität der Modellierung als von der Lagerung der Punkte zueinander, also von den Beobachtungen an sich abhängt. Aus den Beispielen zur Formanalyse wurde zudem deutlich, dass es außerordentlich problematisch ist, den TLS-Ansatz durchzuführen, wenn es sich bei der Modellierung um ein Gauß-Helmert-Modell handelt. Um dies tun zu können, sind sehr viele Vereinfachungen nötig, so dass eine Interpretation der Berechnungsergebnisse schwierig ist.

Die Tatsache, dass die TLS-Berechnung in einem Schritt ohne Iterationen durchgeführt werden kann, wäre durchaus ein großer Vorteil. Interessant ist in diesem Zusammenhang der Vergleich des TLS- und des GH-Ansatzes zur Berechnung einer ausgleichenden Geraden (Fallbeispiel 2). Das Beispiel zeigt, was bei einer iterativen Berechnung wie beim GH-Modell passieren kann. Die TLS-Methode kennt diese Probleme nicht.

Des Weiteren ist zu bemerken, dass TLS keine vorherige Berechnung von Näherungsparametern erfordert, wenn im funktionalen Zusammenhang Produkte von Unbekannten und Beobachtungen auftreten (siehe Beispiel der ausgleichenden Geraden). Würde man hier mit einem GH-Modell operieren, käme man aufgrund der notwendigen Linearisierung nach Taylor nicht ohne Näherungsparameter aus. Da die Ermittlung von guten Näherungen für die Parameter oftmals schwierig ist, muss diese Tatsache als Vorteil von TLS gelten.

Die genannten Vorteile (keine Näherungsparameter, keine Iterationen) sind jedoch letztendlich bedeutungslos, wenn die Schätzung nicht erwartungstreu erfolgen oder zumindest zusätzliche Informationen zu groben Fehlern oder zum Modell liefern kann.

8 Zusammenfassung

Die Methode der kleinsten Quadrate hat eine lange Tradition in der linearen Ausgleichsrechnung. Im Lauf der Zeit entstanden unterschiedliche Standardmodelle (Gauß-Markov-Modell, Gauß-Helmert-Modell, ...), adäquate Berechnungsverfahren wurden entwickelt. Die Ergebnisse beschränken sich dabei nicht nur auf die optimalen Werte für die unbekannt Parameter des jeweils vorliegenden Modells. Durch leichte Modelländerungen ist es zum Beispiel auch möglich und üblich, die Beobachtungen, die der Berechnung zugrunde lagen, auf statistischer Basis zu testen. Dennoch wird es immer offene Fragen geben. Ein Beispiel ist die Qualität der zugrunde gelegten Modellbildung: Letztendlich basiert jedes Modell auf Vermutungen. Ob die Modellbildung richtig war oder nicht, kann die lineare Ausgleichsrechnung mit den bekannten Verfahren nur schlecht beantworten. Man wird deshalb neuen Berechnungsverfahren immer aufgeschlossen gegenüberstehen. Vielleicht ermöglicht ein neues Verfahren neue Erkenntnisse bezüglich des Prozesses der Parameterschätzung, oder die Qualität bereits bekannter Ergebnisse kann verbessert werden.

Ein relativ junges Ausgleichungsverfahren ist die Total-Least-Squares-Methode. Erst etwa 1980 begann man im mathematischen Umfeld, die Eigenschaften dieser Methode genauer zu untersuchen. Bei verschiedenen Anwendungen wurde der TLS-Methode eine Überlegenheit gegenüber der Ausgleichung nach den kleinsten Quadraten attestiert. Von bemerkenswerten Steigerungen der Genauigkeit war

die Rede. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass der Fokus häufig auf der reinen Parameterschätzung lag; statistische Eigenschaften der Beobachtungen oder der Parameter spielten eine eher untergeordnete Rolle. Nun werden im geodätischen Bereich Werte für Parameter oder Beobachtungen selten getrennt von ihren statistischen Eigenschaften betrachtet. Deshalb stellte sich die Frage, inwieweit die TLS-Methode im geodätischen Umfeld in der Lage ist, entscheidende Beiträge zur Parameterschätzung zu leisten.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Anwendung von TLS bei Problemstellungen, die in der Geodäsie häufig auftreten.

Nach einem kurzen Vorwort wird der Leser in Kapitel 2 über ein einfaches Beispiel mit der Idee, die TLS zugrunde liegt vertraut gemacht. Hier erfolgt bereits ein kurzer Vergleich mit der Ausgleichung nach den kleinsten Quadraten.

Kapitel 3 gibt einen Überblick über bereits erfolgreiche Anwendungen der TLS-Ausgleichung aus den unterschiedlichsten Wissensgebieten.

Bevor das TLS-Prinzip genauer untersucht werden kann, ist es nötig, bestimmte Grundlagen aus dem Bereich der numerischen Mathematik darzustellen, ohne die die Arbeitsweise der TLS-Ausgleichung nicht nachvollzogen werden kann. Deshalb stellt Kapitel 4 die wichtigsten Begriffe zu Normen von Vektoren und Matrizen vor, erläutert die Kondition einer Matrix, erklärt den Sinn und die Berechnung von QR-Zerlegungen, präsentiert die für TLS unerlässliche Singulärwertzerlegung und formuliert das wichtige Eckart-Young-Mirsky Theorem.

Anschließend folgt in Kapitel 5 eine knappe Rekapitulierung von Modellen, die für die Berechnung der später vorgestellten Beispiele üblicherweise verwendet werden. Ein bislang fehlender Standardweg zur Berechnung von statistischen Tests für mehrdimensionale Beobachtungen beim Gauß-Helmert-Modell wurde im Verlauf dieser Arbeit entwickelt und ist Teil dieses Kapitels.

Nachdem die Grundlagen vorhanden sind, kann die TLS-Technik in Kapitel 6 analysiert werden. Zunächst wird das klassische TLS-Problem behandelt, das sich dadurch auszeichnet, dass alle Elemente des Systems fehlerbehaftet sind. Anschließend wird dargelegt, wie der Algorithmus zu modifizieren ist, wenn bestimmte Spalten des Gleichungssystems als fehlerfrei bekannt sind und deshalb nicht verbessert werden dürfen. Im weiteren Verlauf werden die statistischen Eigenschaften von TLS-Problemen behandelt, und es wird erläutert, wie TLS-Probleme modifiziert werden können, um die optimalen statistischen Voraussetzungen zu erfüllen. Da es sich zeigte, dass die Standardverfahren zur Modifikation bei vielen Problemen nicht ausreichen, um TLS über den klassischen Weg korrekt durchzuführen, wird ein alternativer Weg dargestellt, um frei skalierbare TLS-Probleme zu behandeln.

Kapitel 7 stellt anhand verschiedener praktischer Beispiele die Anwendung von TLS in typisch geodätischen Problemstellungen vor. Dabei werden unterschiedliche Aspekte wie Effektivität, Verhalten bei groben Fehlern, Genauigkeit der

Schätzung, geeignete Modelle und mögliche Anwendungen ohne Einhaltung der statistischen Voraussetzungen behandelt. Dabei zeigt sich zunächst, dass entgegen den Erwartungen die TLS-Berechnung wesentlich unempfindlicher gegenüber groben Fehlern ist als die iterative Berechnung über Gauß-Markov- oder Gauß-Helmert-Modelle. Das lässt sich sehr gut am Fall der ausgleichenden Geraden zeigen, weil hier die Erwartungswerte der Parameter bei TLS und Gauß-Helmert gleich sind. Am Beispiel eines einfachen Höhennetzes wird schnell klar, dass sich TLS hier nicht sinnvoll anwenden lässt. Der klassische Ansatz kann nicht gewählt werden, und der gemischte TLS-Ansatz liefert letztendlich identische Ergebnisse wie die bekannte Lösung über ein Gauß-Markov-Modell. Bei der Suche nach groben Fehlern im Beobachtungsmaterial oder in der Modellbildung können die Ergebnisse aus der TLS-Berechnung keine neuen Hinweise geben. Das Beispiel der Lagenetze führt deutlich die Grenzen der Anwendung von TLS vor Augen. Es wird klar, dass TLS kaum sinnvoll angesetzt werden kann, wenn die Designmatrix Blockstrukturen aufweist, weil dem dann vorliegenden inhomogenen Fehlerhaushalt kaum durch Zeilen- oder Spaltenskalierung des Systems beizukommen ist. Aus diesem Grunde wurde versucht, TLS im Bereich der Formanalyse erfolgreich anzusetzen. Die Zeilen der Designmatrizen werden hier häufig nach demselben Muster aufgebaut, so dass eine klare Spaltenstruktur vorliegt. Dadurch ergab sich die Chance, mittels einer Spaltenskalierung zu einem System zu gelangen, das die optimalen Voraussetzungen für eine unverzerrte Schätzung per TLS erfüllt. Es zeigte sich jedoch, dass zahlreiche Vereinfachungen zu treffen sind, bis eine TLS-Berechnung durchgeführt werden kann. Zudem kann eine Skalierungsmatrix nur dann aufgestellt werden, wenn die Kovarianzmatrix der Beobachtungen eine Einheitsmatrix ist. Stellt allein diese Forderung schon eine zu große Einschränkung dar, so muss weiter festgehalten werden, dass selbst dann die Skalierungsmatrix nur in grober Näherung richtig ist.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die TLS-Methode keine entscheidende Verbesserung im Kontext der Parameterschätzung darstellt. Es ist bei zahlreichen Problemstellungen nicht möglich, TLS als erwartungstreuen Schätzer einzusetzen. Das liegt vor allem an der Forderung, dass jedes Element in der Matrix $[A; b]$ die gleiche Standardabweichung aufweisen soll und dass alle Elemente voneinander unabhängig sein müssen. Diese Forderung ist mit den zur Verfügung stehenden Mitteln der Zeilen- und Spaltenskalierung nur in wenigen Fällen oder unter starken Vereinfachungen zu erfüllen. Außerdem sieht man anhand der praktischen Beispiele, dass keine neuen Erkenntnisse bei der Suche nach groben Fehlern oder bei der Analyse des Modells gewonnen werden können. Gerade letzterer Punkt ist bedauerlich, weil die herkömmlichen Ansätze kaum Rückmeldung über die Qualität der Modellierung geben. Die Tatsache, dass TLS neben den Verbesserungen für die Beobachtungen auch Verbesserungen für die Designmatrix schätzt, die ja letztendlich das Modell repräsentiert, gab Anlass zur Hoffnung, dass durch die Struktur der Verbesserungsmatrix Rückschlüsse auf die Qualität

der Designmatrix möglich sind. Es zeigte sich jedoch, dass dieser Zusammenhang nicht herstellbar ist.

A Technische Daten

Die Rechnungen wurden auf Windows-Rechnern in verschiedenen Konfigurationen durchgeführt. Beim Vergleich der Ergebnisse auf den unterschiedlichen Plattformen sind keine Unterschiede erkennbar. Es wird nun die Hardware- und Softwarekonfiguration aufgelistet, auf der die in der Dissertation dargestellten Beispiele berechnet wurden.

A.1 Hardware

Systemhersteller Maxdata

Systemtyp X86-basierter PC

Prozessor x86 Family 15 Modell 3 Stepping 4 GenuineIntel 3000 Mhz

Prozessorbezeichnung Intel Pentium IV

BIOS-Version/Datum Phoenix Technologies, LTD 6.00 PG, 02.12.2004

SMBIOS-Version 2.3

A.2 Software

Betriebssystemname Microsoft Windows XP Professional

Version 5.1.2600 Service Pack 2 Build 2600

Java-Runtime 1.5.0_02

Compiler compliance level 1.4

IDE Eclipse Version 3.1 M4

Der Quellcode (mitsamt der zugehörigen class-Files) der im Zuge der Arbeit angefertigten Bibliotheken (Gauß-Helmert-Modell mit mehrdimensionalem Beobachtungstest, Total least squares mit Erweiterungen, Formanalyse verschiedener quadratischer Formen, diverse Tools) steht unter

http://www.gik.uni-karlsruhe.de/fileadmin/mitarbeiter/kupferer/TLS/Quellen_Dissertation.zip

zum Download zur Verfügung. Das Archiv enthält des Weiteren die Bibliothek JAMA und die relevanten Archive von JSci, auf die die oben genannten Quellen zurückgreifen.

Des Weiteren sind alle Berechnungsklassen enthalten, die den in der Arbeit vorgestellten Beispielen zugrunde liegen. Der interessierte Leser kann damit die vorgestellten Ergebnisse leicht nachvollziehen. Die Berechnungen können ohne jegliche Programmierkenntnisse gestartet werden, indem die zugehörigen Batch-Files per Doppelklick gestartet werden.

Die Batch-Dateien sind folgendermaßen zugeordnet:

Example1.bat entspricht den vier Varianten aus Kapitel 7.2,

Example2a.bat liefert die Berechnungen zu Kapitel 7.3, Tabelle 5,

Example2b.bat dient zur Analyse des Beispiels nach Gleichung 7.5 in Kapitel 7.3,

Example3.bat behandelt das Höhennetz aus Kapitel 7.4,

Example5a.bat steht für die Berechnungsvariante A in Kapitel 7.6,

Example5b.bat führt je einen Einzeltest nach Kapitel 7.6, Variante B aus,

Example5b2.bat entspricht dem Test nach Kapitel 7.6, Variante B, Tabelle 19,

Example5c.bat gehört zu Kapitel 7.6, Variante C und

Example5d.bat zu Kapitel 7.6, Variante D.

Darüber hinaus bietet es sich an, die Quellen mit Hilfe einer gängigen IDE (Eclipse, etc.) zu verwalten, um die einzelnen Berechnungsschritte noch detaillierter zu verfolgen oder andere Analysen anzustellen. Die erarbeiteten Bibliotheken sind für den allgemeinen Einsatz konzipiert und eignen sich deshalb gut für eigene Untersuchungen.

Literatur

- [1] Abatzoglo, T.J.; Mendel, J.M.; Harada G.A.: The constrained total least squares technique and its applications to harmonic superresolution. In: *IEEE Trans. Signal Processing* 39 (1991), S. 1070-1087
- [2] Baarda, W.: *A Testing Procedure for Use in Geodetic Networks*. Netherlands Geodetic Commission, Publications on Geodesy, 1968
- [3] Bjoerk, A.: *Numerical Methods for Least Squares Problems*. Philadelphia: Siam, 1996
- [4] Bronstein, I.N.; Semendjajew, K.A.; Grosche, G. (Hrsg.); Ziegler, V. (Hrsg.): *Taschenbuch der Mathematik*. 25. durchgesehene Auflage. Frankfurt: Verlag Harry Deutsch, 1991
- [5] Caspary, W.; Wichmann, K.: *Lineare Modelle*. München, Wien: Oldenbourg Verlag, 1994
- [6] Datta, B.N.: *Numerical Linear Algebra and Applications*. Pacific Grove, USA: Brooks/Cole Publishing Company, 1995
- [7] Demmel, J.W.: The smallest perturbation of a submatrix which lowers the rank and constrained total least squares problems. In: *Journal on Numerical Analysis* 24 (1987), S. 199-206
- [8] Dinter, G.: *Generalisierte Orthogonalzerlegungen in der Ausgleichsrechnung*. Heft 599, Reihe C, München: Verlag der Bayrischen Akademie der Wissenschaften, 2002. - ISBN 3 7696 9598 4
- [9] Drixler, E.: *Analyse der Form und Lage von Objekten im Raum*. Heft 409, Reihe C, München: Verlag der Bayrischen Akademie der Wissenschaften, 1993. - ISBN 3 7696 9454 6
- [10] Eckart, G.; Young, G.: The approximation of one matrix by another of lower rank. In: *Psychometrika* 1 (1936), Nr. 3, S. 211-218
- [11] Fassbender, H.: *Einführung in die Numerik*. URL <http://www.tu-bs.de/institute/numerik/Lehre/Numerik/gliederung.html>. - 2003
- [12] Felus, Y.; Schaffrin, B.: Fitting Variogram Models using Total Least-Squares. In: *Journal of Computers and Geosciences*. - eingereicht 2003
- [13] Fisher, G.W.: Matrix analysis of metamorphic mineral assemblages and reactions. In: *Contributions to Mineralogy and Petrology* 102 (1990), S. 69 - 77

- [14] Gander, W.; Golub, G.H.; Strelbel, R.: *Least-Squares Fitting of Circles and Ellipses*. BIT 34 (1994), S. 558-578
- [15] Garbe, C.S.; Spies, H.; Jähne, B.: Mixed OLS-TLS for the Estimation of Dynamic Processes with a Linear Source Term. In: *Proceedings of the 24th DAGM Symposium, Lecture Notes in Computer Science 2449* (2002), S. 463-471
- [16] Golub, G.H.; Hoffman, A.; Stewart, G.W.: A Generalization of the Eckart-Young-Mirsky Matrix Approximation Theorem. In: *Linear Algebra and its Applications* 88/89 (1987), S. 317-327
- [17] Golub, G.H.; van Loan, C.F.: An analysis of the total least squares problem. In: *Journal on Numerical Analysis* 17 (1980), S. 883-893
- [18] Golub, G.H.; van Loan, C.F.: *Matrix computations*. 2nd ed. Baltimore, Usa: John Hopkins University Press, 1989.
- [19] Grafarend, E.; Schaffrin, B.: *Ausgleichsrechnung in linearen Modellen*. Mannheim: BI Wissenschaftsverlag, 1993. - ISBN 3 411 16381 X
- [20] Haardt, M.: Structured Least Squares to Improve the Performance of ESPRIT-Type Algorithms. In: *IEEE Transactions on Signal Processing* 45 (1997), Nr. 3
- [21] Hämmerlin, G.; Hoffmann, K.H.: *Numerische Mathematik*. 4. Auflage. Berlin: Springer-Verlag, 1994. - ISBN 3 540 58033 6
- [22] Haußecker, H.; Garbe, C.; Spies, H.; Jähne, B.: A total least squares for low-level analysis of dynamic scenes and processes. In: *DAGM* (1999), S. 240-249
- [23] Hermus, K.; Verhelst, W.; Wambacq, P.; Jähne, B.: Perceptual Audio Modeling based on Total Least Squares Algorithms. In: *Proceedings of the 112th Convention of the Audio Engineering Society (AES)* (2002), Convention Paper 5571
- [24] Higham, N.J.: *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Philadelphia: SIAM, 1996
- [25] Höllig, K.: *Numerik* URL http://mo.mathematik.uni-stuttgart.de/kurse/kurs5/index_full.html. - März 2003
- [26] Höpcke, W.: *Fehlerlehre und Ausgleichsrechnung*. Berlin, New York: de Gruyter, 1980
- [27] Koch, K.R.: *Parameterschätzung und Hypothesentests*. Dritte Auflage, Bonn: Dümmler Verlag, 1997

- [28] Kreyszig, E.: *Statistische Methoden und ihre Anwendungen*. 4., unveränd. Nachdr. der 7. Auflage. Göttingen : Vandenhoeck und Ruprecht, 1991. - ISBN 3 525 40717 3
- [29] Kupferer, S.: Mehrdimensionale Beobachtungstests bei Gauß-Helmert-Modellen. In: *Allgemeine Vermessungs Nachrichten* (2004), Nr. 7/2004, S. 264-270
- [30] Lawson, C.L.; Hanson, R.J.: *Solving Least Squares Problems*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, 1974. - ISBN 0 13 822585 0
- [31] Mastronardi, N.; Lemmerling, P.; Van Huffel, S.: Fast structured total least squares algorithm for solving the basic deconvolution problem. In: *Journal On Matrix Analysis and Applications* 22 (2000), Nr. 2
- [32] Middendorf, M.; Nagel, H.: Empirically Convergent Adaptive Estimation of Grayvalue Structure Tensors. In: *Proceedings 24th DAGM Symposium 2002 (DAGM-02), Lecture Notes in Computer Science* (2002), S. 66-74
- [33] Mirsky, L.: Symmetric gauge functions and unitarily invariant norms. In: *The Quarterly Journal of Mathematics* 11 (1960), S. 50-59
- [34] Mota, C.; Stuke, I.; Barth, E.: Analytic Solutions for Multiple Motions. In: *Proceedings of the 2001 International Conference on Image Processing 2* (2001), S. 917-920
- [35] Mühlich, M.; Mester, R.: A considerable improvement in pure parameter estimation using TLS and equilibration. In: *Pattern Recognition Letters* 22 (2001), S. 1181-1189
- [36] Mühlich, M.; Mester, R.: Improving Motion and Orientation Estimation Using an Equilibrated Total Least Squares Approach. In: *Proceedings IEEE International Conference on Image Processing (ICIP 2001) III* (2001), S. 640-643
- [37] Mühlich, M.; Mester, R.: The Role of Total Least Squares in Motion Analysis. In: *Proc. European Conference on Computer Vision (ECCV 98), Lecture Notes on Computer Science* 2 (1998)
- [38] Ottersten, B.; Viberg, M.; Kailath, T.: Asymptotic analysis of the total least squares ESPRIT algorithm. In: *Proc. 33rd SPIE International Technical Symposium, Advanced Algorithms and Architectures for Signal Processing IV* (1989), S. 146-157
- [39] Paige, C.; Strakos, Z.: Scaled total least squares fundamentals. In: *Numerische Mathematik* 91 (2002), Nr. 1, S. 117-146

- [40] Petrovic, S.: *Parameterschätzung für unvollständige funktionale Modelle in der Geodäsie*. Heft 563, Reihe C, München: Verlag der Bayrischen Akademie der Wissenschaften, 2003 - ISBN 3 7696 50026
- [41] Schaffrin, B.; Felus, Y.: On Total Least-Squares Adjustment With Constraints. In: *Proceedings to IUGG General Ass.* (2003)
- [42] Schaffrin, B.: A Note on Constrained Total Least-Squares Estimation. In: *Computational Statistics and Data Analysis* - eingereicht Okt 2003
- [43] Schön, S.: *Statistische Methoden zur Identifikation quadratischer Formen im Rahmen von Industrievermessungen*. Karlsruhe, Geodätisches Institut, 1999
- [44] Schmitt, G.: *Speichertechnische und numerische Probleme bei der Auflösung großer geodätischer Normalgleichungssysteme*. Reihe C, Heft 195: DGK, 1973
- [45] Schwarz, H.R.: *Numerische Mathematik*. Stuttgart: B.G. Teubner, 1997.
- [46] Spies, H.; Garbe, C.S.: *Dense Parameter Fields from Total Least Squares*. In: *Proceedings 24th DAGM Symposium 2002 (DAGM-02), Lecture Notes in Computer Science* (2002), S. 379-386
- [47] Steil, J.: *Numerische Methoden in der Informatik*. URL <http://www.techfak.uni-bielefeld.de/~jsteil/html/script/numscript/> - Aug 2000
- [48] Thompson, R.C.: Principal submatrices IX: Interlacing inequalities for singular values of submatrices. In: *Linear Algebra and its Applications* 5 (1972), S. 1-12
- [49] Van Huffel, S.; Vandervalle, J.: The Total Least Squares Problem: Computational Aspects and Analysis. In: *Frontiers in Applied Mathematics* 9 (1991)
- [50] Van Huffel, S.; Vandervalle, J.; De Roo, M.Ch.; Willems, J.L.: Reliable and efficient deconvolution technique based on total linear least squares for calculating the renal retention function. In: *Medical and Biological Engineering and Computing* 25 (1987), S. 26-33
- [51] Van Huffel, S.: *Analysis of the total least squares problem and its use in parameter estimation*. Katholieke Universiteit Leuven, Dept. of Electrical Engineering, Diss., 1987
- [52] Van Mierlo, J.: *Ausgleichsrechnung: Parametertests und Zuverlässigkeit der Parameter*. Karlsruhe, Geodätisches Institut, 1995
- [53] Van Mierlo, J.: *Freie Netzausgleichung*. Karlsruhe, Geodätisches Institut