

Zur Parameterschätzung mit unterschiedlichen Koordinatendarstellungen

Michael Lösler

Zusammenfassung

Für die Analyse geodätischer Beobachtungen ist i.A. eine sinnvolle Wahl der Koordinatendarstellung notwendig. Obwohl viele terrestrische Instrumente polare Messelemente registrieren, erfolgt die Auswertung häufig mit abgeleiteten kartesischen Koordinaten, anstatt mit den originären polaren Messelementen. In diesem Beitrag wird mittels sequenzieller quadratischer Programmierung untersucht, unter welcher Voraussetzung die Modellparameter einer Optimierungsaufgabe bezüglich eines Wechsels in der Koordinatendarstellung invariant sind. Am Beispiel einer Regressionsparabel wird gezeigt, dass neben der sachgerechten Transformation des funktionalen und des stochastischen Modells auch für die Zielfunktion eine äquivalente Umformung nötig ist.

Summary

The analysing process of geodetic observations usually requires a decision on the used coordinate representation. Most of the terrestrial measurement instruments register polar observations, but during the analysis process, transformed Cartesian coordinates are often used. In this investigation, the invariance of the estimated parameters regarding a change in the coordinate representation is studied by means of the sequential quadratic programming. Exemplified on a best-fitting parabola, it is shown that the adequate transformation of the functional and the stochastic model is not sufficient to obtain identical estimates, because also an adapted target function is required to get corresponding results.

Schlüsselwörter: Parameterschätzung, polare Koordinaten, kartesische Koordinaten, sequenzielle quadratische Programmierung, Orthogonal-Distance-Fit

1 Einleitung

Die geometrische Erfassung von Objekten erfolgt in den messenden Disziplinen i. A. durch das Erfassen diskreter Objektpunkte. In Abhängigkeit des gewählten Messverfahrens liegen die Koordinaten der registrierten Objektpunkte in polarer oder kartesischer Form vor. Zwischen beiden Darstellungen besteht ein eindeutiger funktionaler Zusammenhang, sodass eine Überführung zwischen beiden Koordinatendarstellungen widerspruchsfrei möglich ist. In der Geodäsie wird diese Überführung auch als 1. bzw. 2. geodätische Hauptaufgabe bezeichnet.

Der Informationsgehalt eines einzelnen Objektpunktes ist häufig zu gering, um bspw. die Geometrie oder die Ausrichtung eines Messobjektes eindeutig zu quan-

tifizieren. Erst das Bereitstellen eines funktionalen Zusammenhangs und das Zusammenführen mehrerer Objektpunkte zu einem gemeinsamen Modell erlauben es, gesuchte Zielgrößen abzuleiten. Die Parameterschätzung zählt hierbei zu den wichtigsten Werkzeugen zur sachgerechten Analyse geodätischer Daten.

Im Auswerte- und Analyseprozess stellt sich somit die Frage, in welcher Form die Koordinaten der Objektpunkte bereitzustellen sind bzw. für welche Koordinatendarstellung das funktionale und das stochastische Modell zu formulieren sind. Die Verwendung von polaren Koordinaten wird häufig bereits durch das eingesetzte Messverfahren motiviert, z.B. wenn die Datenerhebung mit einem Lasertracker, einer Totalstation oder einem Laserscanner realisiert wird. Die Datenanalyse erfolgt dann auf der Basis der originären Beobachtungen. Die bewährten Verfahren zum Aufdecken von möglichen Modellstörungen durch fehlerbehaftete polare Messelemente (z.B. Lehmann und Lösler 2016) oder zur Schätzung von Varianzkomponenten (z.B. Sieg und Hirsch 2000) können direkt eingesetzt werden und erfordern keine Rücktransformation in den Beobachtungsraum.

Für die Verwendung von kartesischen Koordinaten spricht der hohe Anschauungsgrad. Weiterhin erfolgt die Darstellung der Ergebnisse häufig in kartesischen Systemen. So ist bspw. ein geschätzter Deformationsvektor in kartesischer Darstellung deutlich einfacher zu interpretieren als dessen polares Pendant. Ein lineares Modell in kartesischer Darstellung wird in polarer Darstellung i.A. nichtlinear. Das Verwenden von Polarkoordinaten führt somit u.U. zu einer zusätzlichen Nichtlinearität. Hierdurch ist eine Steigerung des numerischen Aufwands zu erwarten, welche insbesondere bei zeitkritischen Verfahren die Verwendung von kartesischen Koordinaten motiviert.

In diesem Beitrag wird untersucht, ob die gewählte Koordinatendarstellung die geschätzten Modellparameter beeinflusst. Insbesondere wird geprüft, ob die geschätzten Modellparameter unabhängig von der gewählten Koordinatendarstellung sind bzw. welche Bedingung erfüllt sein muss, um identische Resultate zu erhalten. Für Messungen mit einem terrestrischen Laserscanner untersuchen Koch und Kargoll (2015) sowohl die Verwendung von polaren als auch die Verwendung von kartesischen Koordinaten zur Detektierung von Ausreißern. Die Autoren zeigen, dass die Ergebnisse des linearisierten Gauß-Helmert-Modells unabhängig von der Koordinatendarstellung sind, wenn die Umformung von kartesischen in polare Koordinaten in linearisierter Form verwendet wird. Die Autoren lassen offen, ob die Ergebnisse auch

bei Verwendung des korrespondierenden nichtlinearen funktionalen Zusammenhangs unabhängig von der gewählten Koordinatendarstellung sind. Dies ist Gegenstand dieser Untersuchung.

Zur Schätzung der Modellparameter wird in Abschnitt 2 zunächst die sequenzielle quadratische Programmierung (SQP) eingeführt. Die SQP zählt zum Standardverfahren in der numerischen Optimierung, um insbesondere Optimierungsaufgaben mit nichtlinearen Nebenbedingungen zu lösen (Geiger und Kanzow 2002, S. 234; Nocedal und Wright 2006, S. 529 f.), und erlaubt eine sehr anschauliche Analyse des hier untersuchten Problems. In Abschnitt 3 werden am Beispiel einer ausgleichenden Parabel die Parameter mittels SQP geschätzt, wobei in den Abschnitten 3.1 und 3.2 zum einen kartesische Koordinaten und zum anderen korrespondierende polare Koordinaten als Beobachtungen verwendet werden. Es zeigt sich, dass die Ergebnisse nicht identisch sind. In Abschnitt 3.3 wird untersucht, woraus dieser Unterschied resultiert und welche Bedingung erfüllt sein muss, damit die Ergebnisse unabhängig von der Wahl der Koordinatendarstellung sind. Abschnitt 4 fasst die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen.

2 Sequenzielle quadratische Programmierung

Die sequenzielle quadratische Programmierung (SQP) zählt in der numerischen Optimierung zur Klasse der wichtigsten Verfahren zum Lösen von Optimierungsaufgaben mit nichtlinearen Nebenbedingungen (vgl. Geiger und Kanzow 2002, S. 234). In der Geodäsie ist die SQP nur wenig verbreitet. Lösler et al. (2019) setzen das Verfahren ein, um die Formparameter des Hauptreflektors eines VLBI-Radioteleskops zu schätzen und um das Lastfall-abhängige Deformationsverhalten zu modellieren. Zur Entwicklung eines Algorithmus zur Bestimmung von Transformationsparametern greift Fang (2015) auf die SQP zurück. Lösler (2020) verwendet die SQP, um die Formparameter eines Zylinders mit elliptischer Grundfläche zu schätzen. Allgemein werden quadratische Programme zur Lösung von Optimierungsaufgaben mit Ungleichheitsrestriktionen eingesetzt. Die Schätzung von zwingend positiven Varianzkomponenten (Amiri-Simkooei 2016) oder Beobachtungsgewichten in der geodätischen Netzaufschließung (Roese-Koerner und Schuh 2014) sind weitere anschauliche Beispiele.

Die zu lösende nichtlineare Optimierungsaufgabe lautet (Nocedal und Wright 2006, S. 530)

$$\min \Omega(\mathbf{u}) \quad (1a)$$

unter der Nebenbedingung

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}. \quad (1b)$$

Hierin ist \mathbf{u} der Vektor der unbekannten Parameter. Die Verknüpfung von Zielfunktion Ω und Nebenbedingung \mathbf{f} erfolgt mittels der Lagrange-Funktion, d.h.,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \nabla \Omega + \lambda^T \mathbf{f}, \quad (2)$$

worin λ den Vektor der Lagrange-Multiplikatoren darstellt. Ist der Gradient der Lagrange-Funktion

$$\nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\lambda}) = \frac{1}{2} \nabla \Omega + \mathbf{J}^T \hat{\lambda} = \mathbf{0}, \quad (2a)$$

$$\nabla_{\lambda} \mathcal{L}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\lambda}) = \mathbf{f} = \mathbf{0}, \quad (2b)$$

so erfüllt der Vektor $[\hat{\mathbf{u}}^T \quad \hat{\lambda}^T]$ die notwendige Optimalitätsbedingung (Geiger und Kanzow 2002, S. 46 f.). Die Matrix \mathbf{J} ist hierbei die Jacobimatrix, welche die ersten partiellen Ableitungen der Nebenbedingung an der Stelle \mathbf{u} enthält, und $\nabla \Omega$ ist der Gradient der Zielfunktion an der Stelle \mathbf{u} . Dass es sich bei $[\hat{\mathbf{u}}^T \quad \hat{\lambda}^T]$ tatsächlich um ein (lokales) Minimum handelt, lässt sich mit Hilfe der Hessematrix prüfen. In diesem Beitrag wird unterstellt, dass neben dem eindeutigen Minimum kein Maximum oder Sattelpunkt existiert. Die hinreichende Bedingung für das Minimum ist somit erfüllt, wenn die erste Ableitung Null wird (Lenzmann und Lenzmann 2004).

Werden geeignete Startwerte $\mathbf{u}^{k=0}, \lambda^{k=0}$ bereitgestellt, so lassen sich die unbekannten Parameter bzw. die Lagrange-Multiplikatoren bekanntermaßen mittels Newton-Verfahren iterativ bestimmen. Das hierbei im k -ten Iterationsschritt zu lösende Gleichungssystem lautet

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L} & \mathbf{J}^T \\ \mathbf{J} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \hat{\lambda} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \nabla \Omega \\ \mathbf{f} \end{bmatrix} \quad (3)$$

mit

$$\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L} = \frac{1}{2} \nabla^2 \Omega + \sum_{i=1} \lambda^{(i)} \mathbf{H}^{(i)}, \quad (4)$$

worin $\Delta \mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^k$ der Zuschlagsvektor der unbekannten Parameter ist und $\nabla^2 \Omega$ bzw. $\mathbf{H}^{(i)}$ die Hessematrizen der Zielfunktion bzw. der i -ten Nebenbedingung an der Stelle \mathbf{u} sind (Nocedal und Wright 2006, S. 532). Die Newton-Iteration wird solange wiederholt, bis die Optimalitätsbedingung erfüllt ist, wobei in jedem Schritt die neuen Iterierten als verbesserte Startlösung fungieren.

Das Berücksichtigen der zweiten partiellen Ableitungen wird bei der sequenziellen quadratischen Programmierung durch das Newton-Verfahren motiviert. Für geeignete Startwerte bzw. gut konditionierte Gleichungssysteme kann quadratische Konvergenz erwartet werden (Geiger und Kanzow 1999, S. 84; Lenzmann und Lenzmann 2007). In diesem Beitrag wird davon ausgegangen, dass diese Voraussetzung erfüllt ist und Mechanismen

zur Schrittweitensteuerung oder Trust-Region-Verfahren nicht benötigt werden. Für Details zu diesen und weiteren Verfahren sei auf die Standardliteratur zur numerischen Optimierung verwiesen (z.B. Geiger und Kanzow 2002, Nocedal und Wright 2006).

3 Parameterschätzung

Am Beispiel einer Regressionsparabel wird im Folgenden geprüft, ob die Schätzwerte durch die gewählte Koordinatendarstellung der Beobachtungen beeinflusst werden. Der hierfür verwendete Datensatz ist Lenzmann und Lenzmann (2004) entnommen und in Tab. 1 zusammengestellt. Es handelt sich um zwei Objektpunkte in kartesischer Darstellung.

Tab. 1: Gegebene kartesische Koordinaten zur Schätzung des Parameters einer Parabel, deren Scheitelpunkt im Koordinatenursprung liegt (Lenzmann und Lenzmann 2004).

	x	y
P_1	2,5	4,8
P_2	4,0	5,0

Die vier Koordinatenkomponenten sind unabhängige und identisch verteilte Zufallsvariablen, sodass ihre Dispersion durch

$$\Sigma_c = \sigma_0^2 \mathbf{I} \quad (5)$$

beschrieben wird. Hierin ist σ_0^2 der Varianzfaktor der Gewichtseinheit und \mathbf{I} stellt eine Einheitsmatrix dar. O.B.d.A. sei $\sigma_0^2 = 1$.

Das funktionale Modell lautet

$$0 = ax_i^2 - y_i \quad (6)$$

und beschreibt eine Parabel, deren Scheitelpunkt im Koordinatenursprung liegt. Der Formparameter a definiert hierbei die Parabelöffnung und x_i bzw. y_i sind beliebige kartesische Koordinaten von Objektpunkten auf der Parabel.

Während Lenzmann und Lenzmann (2004) für die Schätzung von a das Gauß-Helmert-Modell vorschlagen, wird nachfolgend die in Abschnitt 2 eingeführte SQP zur Parameterschätzung verwendet, da diese eine sehr anschauliche Analyse des hier untersuchten Problems ermöglicht. Zunächst wird der Modellparameter a der Regressionsparabel mit kartesischen Koordinaten und anschließend mit Polarkoordinaten bestimmt. Zur besseren Unterscheidung zwischen beiden Modellansätzen werden die jeweils auftretenden Größen mit einem tiefgestellten c bzw. p für den kartesischen bzw. polaren Modellansatz versehen.

3.1 Parabel mit kartesischen Koordinaten

Zur Bestimmung der Regressionsparabel werden die in Tab. 1 gegebenen kartesischen Koordinaten der beiden Objektpunkte als Beobachtungen betrachtet. Durch das Einführen von Beobachtungsverbesserungen \mathbf{v}_c ergibt sich mittels Gl. (6) die in Gl. (1b) zu berücksichtigende Nebenbedingung

$$0 = a_c \left(x_i + v_{x_i} \right)^2 - \left(y_i + v_{y_i} \right). \quad (7)$$

Die zu bestimmenden Parameter dieses Optimierungsproblems setzen sich somit aus dem Formparameter a_c und den vier Verbesserungen \mathbf{v}_c der kartesischen Koordinaten zusammen, d.h.,

$$\mathbf{u}_c^T = \begin{pmatrix} a_c & v_{x_1} & v_{y_1} & v_{x_2} & v_{y_2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Die Zielfunktion in Gl. (1a) ergibt sich durch die Forderung nach minimaler gewichteter Verbesserungsquadratsumme zu

$$\Omega_c = \mathbf{u}_c^T \mathbf{W}_c \mathbf{u}_c = \mathbf{v}_c^T \mathbf{P}_c \mathbf{v}_c, \quad (9)$$

worin $\mathbf{P}_c = \mathbf{I}$ die aus Gl. (5) abgeleitete Gewichtsmatrix ist und

$$\mathbf{W}_c = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_c \end{bmatrix}.$$

Der Gradient der Lagrange-Funktion ergibt sich aus dem Gradienten der Zielfunktion

$$\nabla \Omega_c = 2 \mathbf{W}_c \mathbf{u}_c \quad (10a)$$

und der Jacobimatrix

$$\mathbf{J}_c = \begin{pmatrix} \left(x_1 + v_{x_1}^k \right)^2 & 2a_c^k \left(x_1 + v_{x_1}^k \right) & -1 & 0 & 0 \\ \left(x_2 + v_{x_2}^k \right)^2 & 0 & 0 & 2a_c^k \left(x_2 + v_{x_2}^k \right) & -1 \end{pmatrix}, \quad (10b)$$

welche die partiellen Ableitungen der Nebenbedingungen enthält. Gradient und Jacobimatrix in Gl. (10) sind an der aktuellen Entwicklungsstelle \mathbf{u}_c^k zu bilden. Zur Erstellung der Hessematrix der Lagrange-Funktion in Gl. (4) werden weiterhin die Hessematrix der Zielfunktion

$$\nabla^2 \Omega_c = 2 \mathbf{W}_c \quad (11a)$$

und die Hessematrizen der beiden auftretenden Nebenbedingungen

$$\mathbf{H}_c^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 2(x_1 + v_{x_1}^k) & 0 & 0 & 0 \\ 2(x_1 + v_{x_1}^k) & 2a_c^k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (11b)$$

$$\mathbf{H}_c^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 2(x_2 + v_{x_2}^k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(x_2 + v_{x_2}^k) & 0 & 0 & 2a_c^k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11c)$$

an der Stelle \mathbf{u}_c^k benötigt. Mit den Gl. (10), (11) liegen alle Modellmatrizen vor, sodass sich mittels Gl. (3) die neuen Iterierten ergeben. Für die Startwerte $a_c^{k=0}=1$, $\mathbf{v}_c^{k=0}=\mathbf{0}$ und $\lambda_c^{k=0}=\mathbf{0}$ ergibt sich nach wenigen Iterationen der Lösungsvektor

$$\hat{\mathbf{u}}_c = \begin{pmatrix} 0,456\,218\,63 \\ 0,664\,899\,18 \\ -0,230\,246\,43 \\ -0,623\,169\,90 \\ 0,202\,252\,66 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

für den hier aus Gründen der späteren Vergleichbarkeit eine erhöhte Stellenanzahl gewählt wurde. Für die um $\hat{\mathbf{v}}_c$ verbesserten Objektpunkte erhält man

$$\hat{\mathbf{P}}_{c,1} = \begin{pmatrix} 3,164\,899\,18 \\ 4,569\,753\,57 \end{pmatrix}, \quad (13a)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{c,2} = \begin{pmatrix} 3,376\,830\,10 \\ 5,202\,252\,66 \end{pmatrix}. \quad (13b)$$

Diese Lösung stimmt mit der in Lenzmann und Lenzmann (2004) angegebenen Lösung überein, wobei die geringe Differenz in v_{y_1} auf eine unterschiedliche Rundung der Ergebnisse zurückzuführen ist. Die aus Gl. (9) resultierende gewichtete Verbesserungsquadratsumme lautet $\Omega_c = 0,924\,351\,20$. Die punktbezogenen Verbesserungsvektoren stehen aufgrund des stochastischen Modells senkrecht auf der Parabel, sodass dieses Ergebnis einem sogenannten Orthogonal-Distance-Fit entspricht (Späth 1996). Die Minimierung der orthogonalen Abstände wird häufig als *natürliches Bewertungsmaß* bezeichnet (Wijewickrema et al. 2010), da diese eine einfache geometrische Interpretation der resultierenden Residuen zulässt (z.B. Neitzel et al. 2019).

3.2 Parabel mit polaren Koordinaten

Zur Bestimmung der Regressionsparabel mit Polarkoordinaten sind zunächst die kartesischen Koordinaten der beiden Objektpunkte in Tab. 1 mittels der nichtlinearen Transformation

$$r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}, \quad (14a)$$

$$\phi_i = \text{atan2}(y_i, x_i), \quad (14b)$$

umzuformen, worin r die Strecke und ϕ das Azimut ist. Weiterhin ist die in Gl. (5) angegebene Dispersion Σ_c der kartesischen Koordinaten durch ein geeignetes Verfahren zu transformieren. In der Geodäsie wird hierfür i.A. auf das Varianz-Kovarianz-Fortpflanzungsgesetz

$$\Sigma_p = \mathbf{F} \Sigma_c \mathbf{F}^T \quad (15)$$

zurückgegriffen (Koch 1999, S. 100), worin

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{x_1}{r_1} & \frac{y_1}{r_1} & 0 & 0 \\ -\frac{y_1}{r_1^2} & \frac{x_1}{r_1^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{x_2}{r_2} & \frac{y_2}{r_2} \\ 0 & 0 & -\frac{y_2}{r_2^2} & \frac{x_2}{r_2^2} \end{pmatrix} \quad (16)$$

die Modellmatrix der linearisierten Transformation zwischen kartesischen und polaren Koordinaten darstellt. Mögliche weitere Verfahren werden in (Lösler et al. 2016, 2020) diskutiert. Die Gewichtsmatrix resultiert aus der inversen Dispersion (Koch 1999, S. 104) und ist in diesem Beispiel gegeben durch

$$\mathbf{P}_p = \text{diag}(1 \ 29,29 \ 1 \ 41). \quad (17)$$

Das zu Gl. (6) korrespondierende funktionale Modell mit Polarkoordinaten ergibt sich durch Substitution der inversen Transformation von Gl. (14) zum Wechsel der Koordinatendarstellung

$$x_i = r_i \cos \phi_i, \quad (18a)$$

$$y_i = r_i \sin \phi_i, \quad (18b)$$

zu

$$0 = a(r_i \cos \phi_i)^2 - r_i \sin \phi_i. \quad (19)$$

Die Nebenbedingung des Optimierungsproblems lautet mit Berücksichtigung der polaren Beobachtungsverbesserungen \mathbf{v}_p

$$0 = a_p \left((r_i + v_{r_i}) \cos(\phi_i + v_{\phi_i}) \right)^2 - (r_i + v_{r_i}) \sin(\phi_i + v_{\phi_i}), \quad (20)$$

sodass der Vektor der unbekannten Parameter im polaren Modellansatz gegeben ist durch

$$\mathbf{u}_p^T = \begin{pmatrix} a_p & v_{r_1} & v_{\phi_1} & v_{r_2} & v_{\phi_2} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Die Zielfunktion ergibt sich wiederum aus der Forderung nach minimaler gewichteter Verbesserungsquadratsumme, d.h.,

$$\Omega_p = \mathbf{u}_p^T \mathbf{W}_p \mathbf{u}_p = \mathbf{v}_p^T \mathbf{P}_p \mathbf{v}_p, \quad (22)$$

worin

$$\mathbf{W}_p = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_p \end{bmatrix}.$$

In Übereinstimmung mit den Ausführungen in den Abschnitten 2 und 3.1 ist der Gradient und die Hessematrix der Lagrange-Funktion zu bilden und Gl. (3) iterativ zu lösen. Auf eine explizite Darstellung der einzelnen Modellmatrizen wird hier aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet. Für die Startwerte $a_p^{k=0} = 1$, $\mathbf{v}_p^{k=0} = \mathbf{0}$ und $\lambda_p^{k=0} = \mathbf{0}$ ergibt sich nach wenigen Iterationen der Lösungsvektor

$$\hat{\mathbf{u}}_p = \begin{pmatrix} 0,448\,088\,85 \\ 0,188\,410\,47 \\ -0,128\,489\,55 \\ -0,169\,266\,03 \\ 0,095\,531\,39 \end{pmatrix} \quad (23)$$

und die mit Gl. (18) transformierten Objektpunkte in kartesischer Darstellung

$$\hat{\mathbf{P}}_{p,1} = \begin{pmatrix} 3,202\,173\,50 \\ 4,594\,665\,09 \end{pmatrix}, \quad (24a)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{p,2} = \begin{pmatrix} 3,412\,180\,72 \\ 5,217\,088\,35 \end{pmatrix}. \quad (24b)$$

Die aus Gl. (22) resultierende gewichtete Verbesserungsquadratsumme ist $\Omega_p = 0,921\,890\,75$.

Der geschätzte Modellparameter \hat{a} , die Verbesserungsquadratsumme Ω und die Objektpunktkoordinaten von $\hat{\mathbf{P}}_1$ bzw. $\hat{\mathbf{P}}_2$ können direkt miteinander verglichen werden. Es zeigt sich, dass die Ergebnisse mit kartesischen Koordinaten nicht identisch sind im Vergleich zu den Ergebnissen mit Polarkoordinaten. Es sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass sich diese Unterschiede auch mit dem von Lenzmann und Lenzmann (2004) vorgeschlagenen Gauß-Helmert-Modell ergeben und nicht auf die Verwendung der SQP zurückzuführen ist. Abb. 1 zeigt einen kleinen Ausschnitt der resultierenden Parabeln bei Verwendung kartesischer bzw. polarer Koordinaten sowie die beiden originären und jeweils verbesserten Objektpunkte in kartesischer Darstellung. Beide Graphen differieren infolge unterschiedlich geschätzter Parameter $\hat{\mathbf{u}}$.

3.3 Modifikation der Zielfunktion

Koch und Kargoll (2015) weisen für das linearisierte Gauß-Helmert-Modell nach, dass das Einführen der Transformationsmatrix \mathbf{F} zum Wechsel der Koordinatendarstellung $\mathbf{v}'_p = \mathbf{F}\mathbf{v}_c$ die Ergebnisse nicht beeinflusst. Dies scheint zunächst im Widerspruch zu den abgeleiteten Ergebnissen in Abschnitt 3.1 und 3.2 zu stehen, welche offensichtlich nicht identisch sind. Die Autoren zeigen jedoch nur, dass die Ergebnisse durch das Berücksichtigen

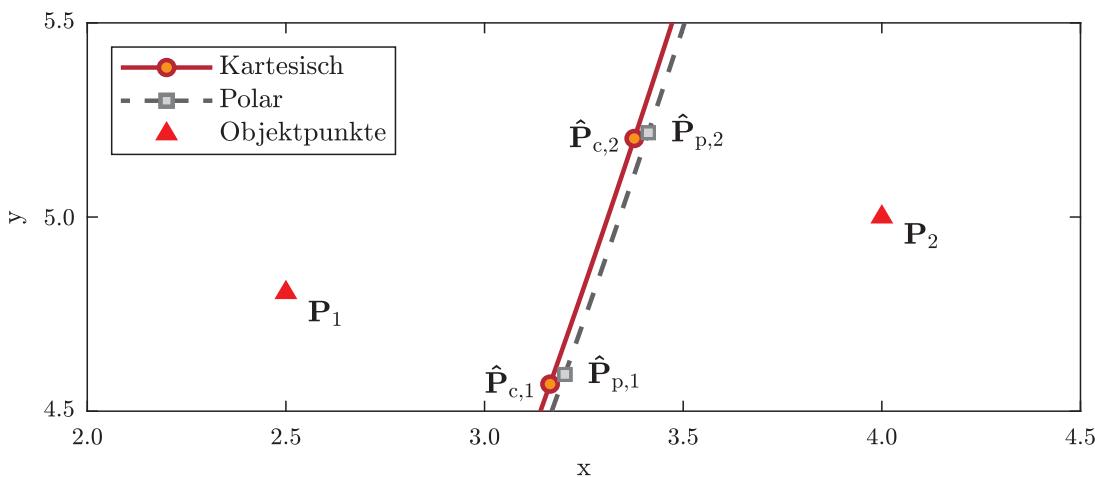


Abb. 1: Ausschnitt der geschätzten Parabeln. Während die Regressionsparabel mit kartesischen Koordinaten als durchgezogene weinrote Linie dargestellt ist, stellt die gestrichelte graue Linie die Parabel mit Polarkoordinaten dar. Rote Kreise bzw. graue Vierecke markieren die verbesserten Beobachtungen im kartesischen bzw. polaren Modellierungsansatz, jeweils in kartesischer Darstellung. Beide Parabeln sind nicht identisch. Rote Dreiecke symbolisieren die originären Objektpunkte, siehe Tab. 1.

von \mathbf{F} im kartesischen Modell invariant sind. Da die Matrix \mathbf{F} in Gl. (16) quadratisch und regulär ist und somit deren Inverse \mathbf{F}^{-1} existiert, ergibt sich durch die lineare Transformation der Verbesserungen \mathbf{v}_c die Zielfunktion

$$\begin{aligned}\Omega'_p &= \mathbf{v}_c^T \mathbf{F}^T (\mathbf{F} \Sigma_c \mathbf{F}^T)^{-1} \mathbf{F} \mathbf{v}_c \\ &= \mathbf{v}_c^T \mathbf{F}^T (\mathbf{F}^T)^{-1} \Sigma_c^{-1} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F} \mathbf{v}_c \\ &= \mathbf{v}_c^T \Sigma_c^{-1} \mathbf{v}_c \\ &= \Omega_c,\end{aligned}\quad (25)$$

welche jedoch nicht identisch ist mit Gl. (22). Die Ergebnisse innerhalb eines verwendeten Modellansatzes sind somit invariant bzgl. der linearen Transformation. Da die Umformungen der Koordinatendarstellungen nach den Gl. (14) bzw. Gl. (18) nichtlinear sind, ergeben sich bei Verwendung von verschiedenen Koordinatendarstellungen unterschiedliche Zielfunktionen. Die Invarianz der Modellparameter kann durch den Wechsel der Koordinatendarstellung daher nicht erwartet werden, wie die Ergebnisse in den Abschnitten 3.1 und 3.2 zeigen.

Im Folgenden soll eine Möglichkeit aufgezeigt werden, die Ergebnisse des polaren Modellansatzes mittels kartesischer Koordinaten zu schätzen. Die Nebenbedingung nach Gl. (7) bleibt hierbei unverändert, sodass sich die Jacobimatrix \mathbf{J}_c und die Hessematrizen \mathbf{H}_c entsprechend der Gl. (10b), (11b), (11c) ergeben. Weiterhin wird das vorgegebene stochastische Modell nach Gl. (5) übernommen.

Die in Gl. (9) angegebene Zielfunktion Ω_c ist hingegen so zu modifizieren, dass diese äquivalent zur Zielfunktion Ω_p ist. Abb. 2 zeigt schematisch die hierfür notwendige Bedingung zwischen den polaren und den kartesischen Verbesserungen, wenn diese ein identisches Optimierungsproblem parametrieren. Es ist leicht abzulesen, dass sich mit Hilfe des nichtlinearen funktionalen Zusammenhangs in Gl. (14) die kartesischen Verbesserungen $\bar{\mathbf{v}}_c$ durch äquivalente polare Verbesserungen $\mathbf{v}_p = \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_c)$ ausgedrückt lassen, d.h.,

$$v_{r_i} = \sqrt{(x_i + \bar{v}_{x_i})^2 + (y_i + \bar{v}_{y_i})^2} - \sqrt{x_i^2 + y_i^2}, \quad (26a)$$

$$v_{\phi_i} = \text{atan}2(y_i + \bar{v}_{y_i}, x_i + \bar{v}_{x_i}) - \text{atan}2(y_i, x_i). \quad (26b)$$

Wird $\mathbf{v}_p = \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_c)$ in Gl. (22) substituiert, folgt die modifizierte Zielfunktion für das kartesische Modell

$$\bar{\Omega}_c = \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_c)^T \mathbf{P}_p \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_c). \quad (27)$$

Durch Bildung des Gradienten $\nabla \bar{\Omega}_c$ und der Hessematrix $\nabla^2 \bar{\Omega}_c$ der modifizierten Zielfunktion $\bar{\Omega}_c$ an der Stelle $\bar{\mathbf{u}}_c^k$ werden die unbekannten Parameter gemäß Gl. (3) mittels Newton-Verfahren bestimmt. Für die Startwerte $\bar{a}_c^{k=0} = 1$, $\bar{\mathbf{v}}_c^{k=0} = \mathbf{0}$ und $\bar{\lambda}_c^{k=0} = \mathbf{0}$ ergibt sich

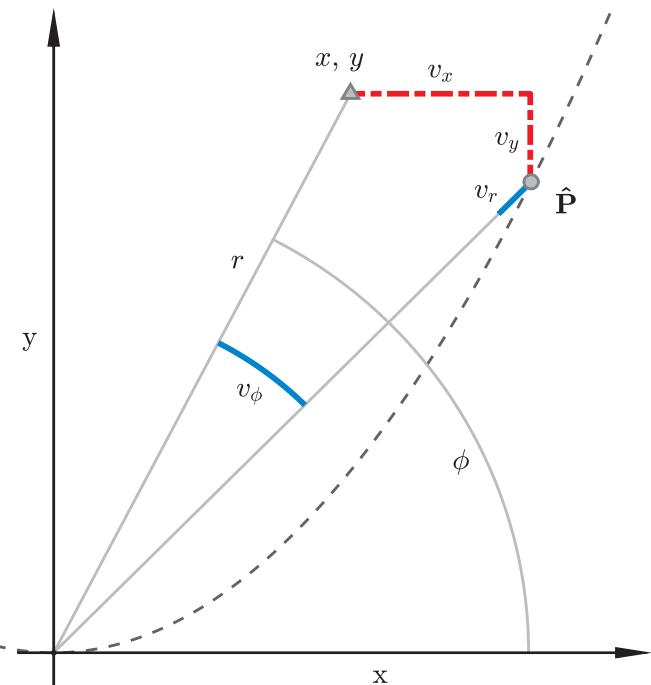


Abb. 2: Zu berücksichtigende geometrische Bedingung zwischen den polaren und den kartesischen Verbesserungen. Die Parabel ist dunkelgrau gestrichelt dargestellt. Rot dargestellt sind die kartesischen Verbesserungen v_x, v_y , blau dargestellt sind die polaren Verbesserungen v_r, v_ϕ . Beide Koordinatendarstellungen beschreiben nur dann ein identisches Optimierungsproblem, wenn ihre Berücksichtigung $\hat{\mathbf{P}}$ ergibt.

$$\hat{\mathbf{u}}_c = \begin{pmatrix} 0,448\,088\,85 \\ 0,702\,173\,50 \\ -0,205\,334\,91 \\ -0,587\,819\,28 \\ 0,217\,088\,35 \end{pmatrix} \quad (28)$$

sowie

$$\hat{\mathbf{P}}_{c,1} = \begin{pmatrix} 3,202\,173\,50 \\ 4,594\,665\,09 \end{pmatrix}, \quad (29a)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{c,2} = \begin{pmatrix} 3,412\,180\,72 \\ 5,217\,088\,35 \end{pmatrix}. \quad (29b)$$

Die modifizierte Verbesserungsquadratsumme ist $\bar{\Omega}_c = 0,921\,890\,75$. Wie ein Vergleich mit den Ergebnissen in Abschnitt 3.2 zeigt, sind diese erwartungsgemäß nun identisch.

Auch bei Verwendung von Polarkoordinaten lassen sich die Ergebnisse des kartesischen Modells reproduzieren. Ausgehend von Gl. (9) kann die modifizierte Zielfunktion mittels Abb. 2 und Gl. (18) leicht abgelesen werden, d.h.,

$$\bar{\Omega}_p = \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_p)^T \mathbf{P}_c \epsilon(\bar{\mathbf{v}}_p), \quad (30)$$

worin $v_c = \varepsilon(\bar{v}_p)$ die nichtlineare Transformation der polaren Verbesserungen in kartesische Verbesserungen beschreibt, d.h.,

$$v_{x_i} = (r_i + \bar{v}_{r_i}) \cos(\phi_i + \bar{v}_{\phi_i}) - r_i \cos \phi_i, \quad (31a)$$

$$v_{y_i} = (r_i + \bar{v}_{r_i}) \sin(\phi_i + \bar{v}_{\phi_i}) - r_i \sin \phi_i. \quad (31b)$$

Für die Startwerte $\bar{a}_p^{k=0} = \mathbf{1}$, $\bar{v}_p^{k=0} = \mathbf{0}$ und $\bar{\lambda}_p^{k=0} = \mathbf{0}$ ergibt sich

$$\hat{\bar{u}}_p = \begin{pmatrix} 0,456\,218\,63 \\ 0,146\,684\,34 \\ -0,125\,550\,62 \\ -0,200\,994\,42 \\ 0,098\,992\,19 \end{pmatrix} \quad (32)$$

sowie die verbesserten Objektpunktkoordinaten in kartesischer Darstellung

$$\hat{\bar{P}}_{p,1} = \begin{pmatrix} 3,164\,899\,18 \\ 4,569\,753\,57 \end{pmatrix}, \quad (33a)$$

$$\hat{\bar{P}}_{p,2} = \begin{pmatrix} 3,376\,830\,10 \\ 5,202\,252\,66 \end{pmatrix}. \quad (33b)$$

Die modifizierte Verbesserungsquadratsumme lautet $\bar{\Omega}_p = 0,924\,351\,20$. Ein Vergleich mit den Ergebnissen in Abschnitt 3.1 und mit den publizierten Ergebnissen in Lenzmann und Lenzmann (2004) zeigt, dass diese wiederum identisch sind. Die mittels Gl. (31) transformierten kartesischen Verbesserungen stehen aufgrund von Gl. (5) senkrecht auf der Parabel, sodass dieses Ergebnis wiederum einem Orthogonal-Distance-Fit entspricht.

Die Parameter eines Optimierungsproblems sind somit unabhängig von der gewählten Koordinatendarstellung. Identische Ergebnisse ergeben sich jedoch nur, wenn neben dem funktionalen und dem stochastischen Modell auch die Zielfunktion sachgerecht transformiert wird. Um zu prüfen, welche Koordinatendarstellung aus numerischen Gründen zu empfehlen ist, bietet sich eine Bewertung der Kondition der Gleichungssysteme an. Die Kondition beschreibt hierbei die Sensitivität eines Gleichungssystems gegenüber kleinen Störungen, die z.B. durch Computerarithmetiken hervorgerufen werden (z.B. Golub und Loan 2013, S. 88).

Die Kondition einer regulären symmetrischen Matrix lässt sich allgemein durch das Verhältnis zwischen dem betragsmäßig größten und dem betragsmäßig kleinsten Eigenwert

$$\kappa_2 = \frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|} \quad (34)$$

ausdrücken und wird auch als Spektralkondition bezeichnet (Geiger und Kanzow 1999, S. 327). Numerisch

Tab. 2: Kondition κ_2 der untersuchten Gleichungssysteme in Abhängigkeit der gewählten Koordinatendarstellung. Zur Identifizierung der einzelnen Modelle ist die Zielfunktion Ω angegeben.

Modellansatz	Ω_c	Ω_p	$\bar{\Omega}_c$	$\bar{\Omega}_p$
Kondition κ_2	9	50	9	47

stabile Gleichungssysteme sind unempfindlich gegenüber kleinen Störungen und besitzen eine kleine Konditionszahl κ_2 . Sie werden als gut konditioniertes Problem bezeichnet. Weist ein Gleichungssystem hingegen eine hohe Konditionszahl κ_2 auf, so spricht man von einem schlecht konditionierten Problem. Bei der Verwendung von iterativen Lösungsverfahren weisen schlecht konditionierte Gleichungssysteme häufig ein ungünstigeres Konvergenzverhalten auf oder führen zu Divergenz (Kupferer 2004, Pyzara et al. 2011). Startwerte sind in diesem Fall sorgsam zu wählen, und der Einsatz geeigneter Präkonditionierungsverfahren zur Verbesserung der Kondition ist empfehlenswert (Kanzow 2005, S. 250 ff.).

Tab. 2 fasst die Konditionszahlen der untersuchten Gleichungssysteme zusammen. Die jeweilige Zielfunktion symbolisiert hierbei die einzelnen Modelle. Für die beiden Modelle mit kartesischen Koordinaten kann eine kleinere Konditionszahl abgelesen werden als für die korrespondierenden Modelle mit Polarkoordinaten. Die Parametrierung mit kartesischen Koordinaten ist demnach für die hier untersuchten Modelle numerisch stabiler und zu empfehlen.

4 Zusammenfassung

In diesem Beitrag wurde geprüft, ob die Wahl der Koordinatendarstellung die Schätzwerte beeinflusst oder ob identische Ergebnisse zu erwarten sind. In Abschnitt 3 konnte am Beispiel einer Regressionsparabel anschaulich demonstriert werden, dass die geschätzten Modellparameter bzgl. eines Wechsels in der Koordinatendarstellung nicht invariant sind, wenn der nichtlineare Zusammenhang zwischen den Koordinatendarstellungen in der Zielfunktion unberücksichtigt bleibt, siehe auch Abb. 1.

Wie Abschnitt 3.3 zeigt, lassen sich durch eine geeignete Modifikation der Zielfunktion die Schätzwerte unabhängig von der gewählten Koordinatendarstellung der Beobachtungen bestimmen. Identische Ergebnisse können demnach nur erwartet werden, wenn neben dem funktionalen und dem stochastischen Modell auch die Zielfunktion sachgerecht transformiert wird. Insbesondere können die Ergebnisse eines sogenannten Orthogonal-Distance-Fit auch unter Berücksichtigung von Polarkoordinaten reproduziert werden (vgl. Lösler und Eschelbach 2020).

Da sich die geschätzten Parameter bei identischen Eingangsdaten in Abhängigkeit der gewählten Zielfunktion

ändern, kann es zu unterschiedlichen Interpretationen der Ausgleichungsergebnisse kommen. Insbesondere sind im Grenzbereich gegensätzliche Aussagen möglich, z.B. bei der Toleranzprüfung von Werkstücken oder der Deformationsanalyse. Eine Empfehlung, welche Zielfunktion möglicherweise geeigneter ist, bleibt Gegenstand weiterer Untersuchungen und ist nicht Teil dieser Arbeit. Unabhängig von der gewählten Zielfunktion empfiehlt sich aus numerischen Gründen die Verwendung von kartesischen Koordinaten für die in diesem Beitrag untersuchten Modelle. Die hierbei resultierenden Gleichungssysteme sind numerisch stabiler und weisen eine bessere Kondition gegenüber den korrespondierenden polaren Modellen auf.

Zur Parameterschätzung wurde in Abschnitt 2 die sequentielle quadratische Programmierung eingeführt, da diese eine sehr anschauliche Analyse des hier untersuchten Problems zulässt. Die SQP zählt zu den Standardverfahren in der numerischen Optimierung und wird insbesondere bei Optimierungsaufgaben mit nichtlinearen Nebenbedingungen empfohlen (Geiger und Kanzow 2002, S. 234; Nocedal und Wright 2006, S. 529 f.). Die Parameter werden iterativ durch das Lösen von quadratischen Teilproblemen geschätzt. Das Berücksichtigen der zweiten partiellen Ableitungen wird bei der SQP durch das Newton-Verfahren motiviert. Für geeignete Startwerte bzw. ein gut konditioniertes Gleichungssystem kann quadratische Konvergenz erwartet werden (Geiger und Kanzow 1999, S. 84; Lenzmann und Lenzmann 2007).

Danksagung

Für wertvolle Hinweise und Anregungen bedanke ich mich ganz herzlich bei Hermann Bähr, David Koch und Karl Foppe. Diese Arbeit ist Teil des internationalen Projektes *GeoMetre (Large-scale dimensional measurements for geodesy)*, JRP 18SIB01 und wurde aus Mitteln des von den Teilnehmerstaaten kofinanzierten EMPIR-Programms und aus dem Forschungs- und Innovationsprogramm der Europäischen Union *Horizon 2020* finanziert.

Literatur

- Amiri-Simkooei, A. R. (2016): Non-negative least-squares variance component estimation with application to GPS time series. In: *Journal of Geodesy* 90(5), 451–466. DOI: 10.1007/s00190-016-0886-9.
- Fang, X. (2015): Weighted total least-squares with constraints: a universal formula for geodetic symmetrical transformations. In: *Journal of Geodesy* 89(5), 459–469. DOI: 10.1007/s00190-015-0790-8.
- Geiger, C., Kanzow, C. (1999): Numerische Verfahren zur Lösung unrestriktierter Optimierungsaufgaben. Berlin, Heidelberg: Springer. DOI: 10.1007/978-3-642-58582-1.
- Geiger, C., Kanzow, C. (2002): Theorie und Numerik restriktiver Optimierungsaufgaben. Berlin, Heidelberg: Springer. DOI: 10.1007/978-3-642-56004-0.
- Golub, G.H., Loan, C.F.V. (2013): Matrix Computations. 4. Aufl. Baltimore, Maryland, USA: The Johns Hopkins University Press. ISBN: 978-1-4214-0794-4.
- Kanzow, C. (2005): Numerik linearer Gleichungssysteme: Direkte und iterative Verfahren. Berlin, Heidelberg: Springer. DOI: 10.1007/b138019.
- Koch, K.-R. (1999): Parameter Estimation and Hypothesis Testing in Linear Models. Berlin, Heidelberg: Springer. DOI: 10.1007/978-3-662-03976-2.
- Koch, K.-R., Kargoll, B. (2015): Outlier detection by the EM algorithm for laser scanning in rectangular and polar coordinate systems. In: *Journal of Applied Geodesy* 9(3), 162–173. DOI: 10.1515/jag-2015-0004.
- Kupferer, S. (2004): Verschiedene Ansätze zur Schätzung einer ausgleichenden Raumgeraden. In: *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten* 5(111), 162–170. ISSN: 0002-5968.
- Lehmann, R., Lösler, M. (2016): Multiple Outlier Detection: Hypothesis Tests versus Model Selection by Information Criteria. In: *Journal of Surveying Engineering* 142(4), 04016017. DOI: 10.1061/(asce)su.1943-5428.0000189.
- Lenzmann, L., Lenzmann, E. (2004): Strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells. In: *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten* 111(2), 68–73.
- Lenzmann, L., Lenzmann, E. (2007): Zur Lösung des nichtlinearen Gauß-Markov-Modells. In: *zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement* 132(2), 108–110. ISSN: 1618-8950.
- Lösler, M. (2020): Modellierung und Bestimmung eines elliptischen Zylinders. In: *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten* 127(2), 87–93. ISSN: 0002-5968.
- Lösler, M., Bähr, H., Ulrich, T. (2016): Verfahren zur Transformation von Parametern und Unsicherheiten bei nicht-linearen Zusammenhängen. In: *Photogrammetrie – Laserscanning – Optische 3D-Messtechnik*. Hrsg.: T. Luhmann, C. Schumacher. Beiträge der 16. Oldenburger 3D-Tage 2016. Offenbach: Wichmann, 274–285. ISBN: 978-3-87907-604-8.
- Lösler, M., Eschelbach, C. (2020): Orthogonale Regression – Realität oder Isotropie? In: *tm – Technisches Messen*. DOI: 10.1515/tme-2020-0063.
- Lösler, M., Haas, R., Eschelbach, C., Greiwe, A. (2019): Gravitational Deformation of Ring-Focus Antennas for VGOS – First Investigations at the Onsala Twin Telescopes Project. In: *Journal of Geodesy* 93(10), 2069–2087. DOI: 10.1007/s00190-019-01302-5.
- Lösler, M., Lehmann, R., Neitzel, F., Eschelbach, C. (2020): Bias in Least-Squares Adjustment of Implicit Functional Models. In: *Survey Review*, 1–12. DOI: 10.1080/00396265.2020.1715680.
- Neitzel, F., Ezhov, N., Petrovic, S. (2019): Total Least Squares Spline Approximation. In: *Mathematics* 7(5), 462. DOI: 10.3390/math7050462.
- Nocedal, J., Wright, S. J. (2006): Numerical Optimization. 2. Aufl. New York: Springer. DOI: 10.1007/978-0-387-40065-5.
- Pyzara, A., Bylina, B., Bylina, J. (2011): The influence of a matrix condition number on iterative methods. In: *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology, (FedCSIS)*. Hrsg.: M. Ganzha, L. A. Maciaszek, M. Paprzycki. Stettin, Polen: IEEE, 459–464. ISBN: 978-83-60810-22-4.
- Roeße-Koerner, L., Schuh, W.-D. (2014): Convex optimization under inequality constraints in rank-deficient systems. In: *Journal of Geodesy* 88(5), 415–426. DOI: 10.1007/s00190-014-0692-1.
- Sieg, D., Hirsch, M. (2000): Varianzkomponentenschätzung in ingenieurgeodätischen Netzen – Teil 1. Theorie. In: *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten* 3(107), 82–90. ISSN: 0002-5968.
- Späth, H. (1996): Orthogonal Squared Distance Fitting with Parabolas. In: *Proceedings of the IMACS-GAMM International Symposium on Numerical Methods and Error Bounds*. Hrsg.: G. Alefeld, J. Herzberger. Bd. 89. Mathematical Research. Berlin: Akademie Verlag, 261–269. ISBN: 978-3-05501696-7.
- Wijewickrema, S., Esson, C., Papliński, A. (2010): Orthogonal Distance Least Squares Fitting: A Novel Approach. In: *Computer Vision, Imaging and Computer Graphics – Theory and Applications*. Hrsg.: A. K. Ranjordras, J. M. Pereira, H. J. Araújo, J. M. R. S. Tavares. 68. Berlin, Heidelberg: Springer. Kap. Computer Vision Theory and Applications (VISAPP), 255–268. DOI: 10.1007/978-3-642-11840-1_19.

Kontakt

Michael Lösler
Frankfurt University of Applied Sciences
Laboratory for Industrial Metrology
Nibelungenplatz 1, 60318 Frankfurt am Main
michael.loesler@fb1.fra-uas.de