

Total Least Squares (TLS) im Kontext der Ausgleichung nach kleinsten Quadraten am Beispiel der ausgleichenden Geraden

Frank Neitzel und Svetozar Petrovic

Zusammenfassung

In diesem Beitrag wird eine ausgleichende Gerade in der Ebene behandelt, bei der beide Koordinatenkomponenten mit zufälligen Fehlern behaftete Messgrößen sind. Es wird gezeigt, dass eine sachgerechte Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate dasselbe Ergebnis liefert wie die entsprechende Anwendung von Total Least Squares (TLS), da in beiden Fällen dieselbe Zielfunktion minimiert wird. Somit kann TLS nicht als eine neue Ausgleichungsmethode angesehen werden, sondern lediglich als eine weitere Möglichkeit zur Formulierung von Ausgleichungsproblemen, die gleichberechtigt neben dem Gauß-Markov- und dem Gauß-Helmert-Modell einzustufen ist. Die so genannte TLS-Problemstellung für die ausgleichende Gerade kann daher durch eine korrekte Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells gelöst werden. Anders lautende Auffassungen in der Literatur lassen sich darauf zurückführen, dass lediglich eine näherungsweise Auswertung des Gauß-Helmert-Modells betrachtet wird. Anhand eines numerischen Beispiels wird die sachgerechte Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells für die ausgleichende Gerade gezeigt.

Summary

In this paper the adjustment of a straight-line in plane is considered for the case when both coordinate components are observations and therefore affected by random errors. It is shown that an appropriate application of the least-squares method yields the same result as the corresponding Total Least Squares (TLS) approach due to the fact that the same target function is minimised. Hence, TLS cannot be regarded as a new method of adjustment. It can simply be classified as another approach for modelling a least-squares problem in addition to the Gauss-Markov or the Gauss-Helmert model. Therefore, the so called TLS problem for the straight-line can be solved by a rigorous evaluation of the nonlinear Gauss-Helmert model. Contrary opinions in the literature are due to the fact that therein an approximate evaluation of the Gauss-Helmert model is carried out, only. A numerical example for an appropriate evaluation of the nonlinear Gauss-Helmert model for the straight-line case is given.

1 Einführung

In einem beträchtlichen Teil der englischsprachigen Literatur zur mathematischen Statistik wird zwischen »Least Squares« (LS) und »Total Least Squares« (TLS) unterschieden, siehe z.B. Golub und van Loan (1980), van Huff

und Vandewalle (1991, S. 27 ff.). Betrachtet wird ein überbestimmtes *lineares* Modell

$$\mathbf{l} \approx \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad (1)$$

in dem die Unbekannten \mathbf{x} über die Funktionalmatrix \mathbf{A} mit den Beobachtungen \mathbf{l} verknüpft sind. Aufgrund unvermeidlicher Messfehler kann das Gleichungssystem (1) nur näherungsweise erfüllt werden. Unter der Annahme, dass die Messfehler lediglich zufälligen Charakter aufweisen, und der Annahme, dass sich alle Messfehler lediglich auf die Komponenten des Beobachtungsvektors \mathbf{l} beziehen, bietet es sich an, den Verbesserungsvektor \mathbf{v} einzuführen

$$\mathbf{l} + \mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (2)$$

und die Zielfunktion

$$\sum_{i=1}^n v_i v_i = \mathbf{v}^T \mathbf{v} \quad (3)$$

zu minimieren, wobei mit n die Anzahl der Beobachtungen bezeichnet ist. Sind die Beobachtungen l_i ungleichgewichtig und korreliert, wird auf bekannte Weise eine Gewichtsmatrix \mathbf{P} eingeführt. In der genannten Literatur zur mathematischen Statistik heißt diese Ausgleichung »Least Squares« (LS), was dem linearen Gauß-Markov-Modell (GM-Modell), siehe Niemeier (2002, S. 117 ff.), entspricht. Im Gegensatz dazu schließt der Begriff »Methode der kleinsten Quadrate« von Anfang an, d.h. seit etwa zwei Jahrhunderten, nichtlineare Probleme ein, siehe Gauß (1809, S. 215).

Trifft man nach der Festlegung der Funktionalmatrix \mathbf{A} die Entscheidung, dass auch Elemente dieser Matrix als Beobachtungen angesehen werden sollen, kann die Inkonsistenz des Gleichungssystems (1) folglich nur sinnvoll behoben werden, indem Verbesserungen sowohl am Vektor \mathbf{l} als auch an den entsprechenden Elementen a_{ij} der Funktionalmatrix \mathbf{A} angebracht werden. Daraus resultiert das konsistente Gleichungssystem

$$\mathbf{l} + \mathbf{v} = \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \quad (4)$$

mit

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} a_{11} + v_{11} & a_{12} + v_{12} & \dots & a_{1m} + v_{1m} \\ a_{21} + v_{21} & a_{22} + v_{22} & \dots & a_{2m} + v_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} + v_{n1} & a_{n2} + v_{n2} & \dots & a_{nm} + v_{nm} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

wobei mit m die Anzahl der Unbekannten bezeichnet ist. Die zu minimierende Zielfunktion ergibt sich zu

$$\sum_{i=1}^n v_i v_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m v_{ij} v_{ij}. \tag{6}$$

Entsprechende Gewichtsmatrizen können gegebenenfalls berücksichtigt werden. Diese Ausgleichung wird in der angesprochenen Literatur zur mathematischen Statistik als »Total Least Squares« (TLS) bezeichnet. Anzumerken ist, dass je nach Aufgabenstellung nicht immer alle Spalten der Funktionalmatrix mit Verbesserungen zu versehen sind. Für die Lösung von TLS-Problemen werden in der Literatur Lösungsalgorithmen angegeben, die zumeist auf einer Singulärwertzerlegung¹ beruhen, siehe z. B. Golub und van Loan (1980), van Huffel und Vandewalle (1991, S. 29 ff.).

Ein Blick in die geodätische Literatur der letzten Zeit zeigt, dass sich der Einsatz von TLS auch in der Geodäsie wachsender Beliebtheit erfreut, und es stellt sich die Frage, worin diese Popularität begründet liegt. Dieser Umstand liegt offensichtlich darin begründet, dass die Ergebnisse einer TLS-Ausgleichung als »besser« gegenüber einer LS-Ausgleichung angesehen werden, in dem Sinne, dass nur eine TLS-Ausgleichung »zufrieden stellende« bzw. »realistischere« Schätzwerte für die unbekannt Parameter liefert, siehe hierzu z. B. Schaffrin et al. (2006) bzw. Akyilmaz (2007).

Auf Grundlage dieser Ausgangssituation verfolgt dieser Beitrag am Beispiel der ausgleichenden Geraden folgende Ziele:

1. Es soll geklärt werden, ob es sich bei TLS um eine neue Ausgleichungsmethode handelt oder lediglich um ein weiteres Ausgleichungsmodell innerhalb der Methode der kleinsten Quadrate.
2. Es soll geklärt werden, ob die Aussage, dass TLS gegenüber LS die »besseren« Ergebnisse liefert, gerechtfertigt ist.
3. Des Weiteren soll gezeigt werden, dass sich die so genannte TLS-Lösung durch eine strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells (GH-Modell) erzielen lässt.

Das Beispiel der ausgleichenden Geraden wurde ausgewählt, da dieses vielfach dazu verwendet wird, um TLS-Problemstellungen zu veranschaulichen, siehe z. B. Golub und van Loan (1980), Kupferer (2005, S. 84 ff.), Schaffrin et al. (2006) und Schaffrin (2007).

Anzumerken ist, dass bereits in Schaffrin (2007) darauf hingewiesen wird, dass sich die TLS-Lösung für die ausgleichende Gerade sowohl im GH-Modell, siehe Niemeier (2002, S. 152 ff.), als auch im GM-Modell erzielen lässt. Ebenfalls in Schaffrin (2007) wird die TLS-Lösung durch

Auswertung des GM-Modells ausführlich gezeigt, daher widmet sich dieser Beitrag im weiteren Verlauf der sachgerechten Auswertung des GH-Modells.

2 Total Least Squares im Kontext der Methode der kleinsten Quadrate

Betrachtet wird das funktionale Modell einer Geraden in der Ebene, die nicht parallel zur y -Achse verläuft, in der Form

$$y_i = a x_i + b, \tag{7}$$

mit $i = 1, \dots, k$, wobei mit k die Anzahl der Punkte auf der Geraden bezeichnet ist. Die Unbekannten sind die Steigung a und der Achsabschnitt b . Liegen $k > 2$ Punkte auf der Geraden vor, sind die Unbekannten mit Hilfe einer Ausgleichung zu bestimmen, woraus drei verschiedene Aufgabenstellungen resultieren können.

Aufgabenstellung 1:

Bestimme die Parameter a und b unter der Voraussetzung, dass es sich bei den Werten y_i um mit zufälligen Fehlern behaftete Beobachtungen und bei den Werten x_i um fehlerfreie Größen handelt. Die Varianzen und Kovarianzen der Beobachtungen sind zu berücksichtigen.

Ein Beispiel für diese Aufgabenstellung ist eine Signalregistrierung in gewissen Zeitabständen, wobei die Zeitmessung wesentlich genauer als die Signalregistrierung ist und deshalb als praktisch fehlerfrei betrachtet werden darf.

Bei dieser Aufgabenstellung sind die Verbesserungen v_{y_i} einzuführen und man erhält die linearen Beobachtungsgleichungen

$$y_i + v_{y_i} = a x_i + b, \tag{8}$$

die sich mit

$$\mathbf{l} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_{y_1} \\ \vdots \\ v_{y_k} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_k & 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

in die Matrixschreibweise (2) überführen lassen. Unter Berücksichtigung der Gewichtsmatrix \mathbf{P} für die Beobachtungen y_i ergibt sich die zu minimierende Zielfunktion zu

$$\mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}. \tag{10}$$

Die Parameterschätzung erfolgt mit Hilfe einer Auswertung des linearen GM-Modells. Die Lösung dieser Ausgleichung nach kleinsten Quadraten ist identisch mit der LS-Lösung.

¹ Eng.: singular value decomposition (SVD)

Aufgabenstellung 2:

Bestimme die Parameter a und b unter der Voraussetzung, dass es sich bei den Werten x_i um mit zufälligen Fehlern behaftete Beobachtungen und bei den Werten y_i um fehlerfreie Werte handelt. Die Varianzen und Kovarianzen der Beobachtungen sind zu berücksichtigen.

In diesem Fall sind die Verbesserungen v_{x_i} einzuführen und man erhält

$$y_i = a(x_i + v_{x_i}) + b. \quad (11)$$

Mit Hilfe der Substitutionen

$$c = \frac{1}{a}, \quad d = -\frac{b}{a} \quad (12)$$

erhält man die transformierten linearen Beobachtungsgleichungen

$$x_i + v_{x_i} = c y_i + d, \quad (13)$$

die wieder in die Matrizenschreibweise (2) überführt werden können, mit

$$\mathbf{l} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_{x_1} \\ \vdots \\ v_{x_k} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} y_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ y_k & 1 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Die zu minimierende Zielfunktion lautet

$$\mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}, \quad (15)$$

wobei mit \mathbf{P} die Gewichtsmatrix der Beobachtungen x_i bezeichnet ist. Die Parameterschätzung erfolgt im linearen GM-Modell; die Lösung ist wiederum identisch mit der entsprechenden LS-Lösung.

Aufgabenstellung 3:

Bestimme die Parameter a und b unter der Voraussetzung, dass es sich sowohl bei den Werten x_i als auch bei den Werten y_i um mit zufälligen Fehlern behaftete Beobachtungen handelt. Die Varianzen und Kovarianzen der Beobachtungen sind zu berücksichtigen.

Ein Beispiel für diese Aufgabenstellung ist die Messung von Koordinaten y_i, x_i eines geradlinigen Objektes mit Hilfe der Orthogonal Aufnahme.

Bei dieser Aufgabenstellung sind die Verbesserungen v_{x_i} und v_{y_i} einzuführen und man erhält

$$y_i + v_{y_i} = a(x_i + v_{x_i}) + b. \quad (16)$$

Fasst man die Verbesserungen im Vektor

$$\mathbf{v} = [v_{y_1} \quad \cdots \quad v_{y_k} \quad v_{x_1} \quad \cdots \quad v_{x_k}]^T \quad (17)$$

und die Genauigkeitsrelationen der Beobachtungen y_i, x_i in einer entsprechenden Gewichtsmatrix \mathbf{P} zusammen,

ergibt sich erneut die zu minimierende Zielfunktion

$$\mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}. \quad (18)$$

Dieses Ausgleichungsproblem kann nicht im linearen GM-Modell gelöst werden, da das funktionale Modell nicht in die Form (2) überführt werden kann. Folglich existiert keine LS-Lösung für diese Aufgabenstellung. Stellt man (16) um, erhält man mit

$$a(x_i + v_{x_i}) + b - (y_i + v_{y_i}) = 0 \quad (19)$$

eine implizite Form der funktionalen Beziehungen, die als bedingte Beobachtungen mit Unbekannten (Helmert 1924, S. 285 ff.) den Allgemeinfall der Ausgleichungsrechnung darstellt, wobei es unerheblich ist, ob es sich um lineare oder nichtlineare funktionale Beziehungen handelt. Die Lösung dieser Ausgleichung nach kleinsten Quadraten erhält man durch eine Auswertung des GH-Modells, was in Abschnitt 3 gezeigt wird.

Dieser Lösungsweg wird jedoch in der zitierten Literatur zur mathematischen Statistik nicht eingeschlagen. Nach der Feststellung, dass die LS-Lösung für die Aufgabenstellung 3 nicht existiert, wird ein Lösungsweg namens TLS eingeführt. Ausgangspunkt für die TLS-Ausgleichung ist die Bereitstellung eines *linearen* funktionalen Modells. Für die weiteren Betrachtungen wird das funktionale Modell (8) zugrunde gelegt, in dem zunächst nur die Werte y_i als Beobachtungen angesehen werden, so dass die Funktionalmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_k & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

resultiert. Anzumerken ist, dass auch das funktionale Modell in der Form (13) als Ausgangspunkt verwendet werden kann, was dazu führen würde, dass in der ersten Spalte der Funktionalmatrix die Werte y_i stehen. In Schaffrin (2007) wird gezeigt, dass beide Modelle identische Ausgleichungsergebnisse liefern.

Da bei der Aufgabenstellung 3 neben den Werten y_i auch die Werte x_i als fehlerbehaftete Beobachtungen angesehen werden, ergibt sich die Notwendigkeit, dass die Elemente der ersten Spalte der Funktionalmatrix mit Verbesserungen zu versehen sind. Somit ergibt sich das neue funktionale Modell

$$\mathbf{l} + \mathbf{v} = \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \quad (21)$$

mit

$$\mathbf{l} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_{y_1} \\ \vdots \\ v_{y_k} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} x_1 + v_{x_1} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_k + v_{x_k} & 1 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

Die zu minimierende Zielfunktion wird festgelegt wie in (18). Die sachgerechte Formulierung der zugrunde liegenden Aufgabenstellung wird somit über einen *Umweg* erreicht, der sich wie folgt darstellt:

- Betrachtet wird zunächst das lineare Modell der Geradengleichung aus (8).
- Die Tatsache, dass auch die Werte x_i fehlerbehaftete Beobachtungen sind, wird im *Nachhinein* durch Anbringen von Verbesserungen an der ersten Spalte der Funktionalmatrix berücksichtigt.

Letztendlich resultiert aus der TLS-Formulierung der Aufgabenstellung 3 wieder ein Ausgleichungsproblem mit nichtlinearen Normalgleichungen, dessen Lösung identisch ist mit der Auswertung des GH-Modells. Da in beiden Fällen die identische Zielfunktion (18) minimiert wird, erhält man jeweils die Gerade, deren Summe der quadrierten Abstände von den gegebenen Punkten minimal ist.

Daraus folgt, dass TLS keine neuartige Ausgleichungsmethode ist, sondern lediglich ein weiteres Ausgleichungsmodell im Rahmen der Methode der kleinsten Quadrate, das in dem betrachteten Beispiel gleichberechtigt neben dem nichtlinearen GM- und dem nichtlinearen GH-Modell steht, siehe hierzu das folgende Ablaufschema einer Ausgleichungsaufgabe:

1. Definition der Aufgabenstellung

In diesem Schritt sind die zu bestimmenden Unbekannten auszuwählen und es ist festzulegen, welche der Eingangsgrößen als fehlerbehaftete Beobachtungen und welche als feste Parameter angesehen werden sollen. Des Weiteren ist über die Art der Messfehler zu entscheiden, z. B. durch die Annahme, dass diese lediglich zufälligen Charakter aufweisen.

2. Auswahl des funktionalen Modells

Es ist ein funktionales Modell auszuwählen, das in geeigneter Weise die Beobachtungen, die Unbekannten und die festen Parameter miteinander verknüpft.

3. Auswahl des stochastischen Modells

Die Genauigkeitsrelationen zwischen den Beobachtungen sind durch die Bereitstellung einer entsprechenden Gewichtsmatrix zu modellieren.

4. Auswahl der Ausgleichungsmethode

Aus der Art der Messfehler resultiert die zu minimierende Zielfunktion, z. B. $\mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}$ im Falle zufälliger Messfehler, was in der Geodäsie als Methode der kleinsten Quadrate bezeichnet wird.

5. Auswahl eines Ausgleichungsmodells

In Abhängigkeit von der Aufgabenstellung sowie des funktionalen und stochastischen Modells ist ein geeignetes Ausgleichungsmodell zu wählen, wobei folgende Modelle gleichberechtigt nebeneinander stehen.

- Lineares oder nichtlineares GM-Modell für explizite lineare bzw. nichtlineare funktionale Zusammenhänge zwischen den Beobachtungen und den Unbekannten. Das lineare GM-Modell wird in der

englischsprachigen Fachliteratur vielfach mit LS bezeichnet.

- Lineares oder nichtlineares GH-Modell für explizite oder implizite lineare bzw. nichtlineare funktionale Zusammenhänge zwischen den Beobachtungen und den Unbekannten.
- TLS-Modell für explizite lineare funktionale Zusammenhänge zwischen einem Teil der Beobachtungen und den Unbekannten.

6. Berechnung der Zahlenergebnisse

Je nach gewähltem Ausgleichungsmodell resultiert ein Gleichungssystem (i. d. R. Normalgleichungssystem), das es mit einem Verfahren der numerischen Mathematik unter Beachtung von Stabilitätskriterien möglichst effizient zu lösen gilt. Als Lösungsverfahren können, neben vielen anderen, folgende Verfahren zum Einsatz kommen:

- Gauß-Newton-Verfahren,
- Newton-Raphson-Verfahren,
- Singulärwertzerlegung,
- Heuristische Optimierungsverfahren.

Zu Punkt 5. ist anzumerken, dass zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems im TLS-Modell Verfahren unter besonderer Berücksichtigung von Stabilitätsproblemen, der numerischen Günstigkeit und der Effizienz entwickelt wurden, siehe z. B. Golub und van Loan (1980), van Huffel und Vandewalle (1991, S. 29 ff.). Speziell zur Lösung der ausgleichenden Geraden im TLS-Modell sei auf Schaffrin et al. (2006) und Schaffrin (2007) verwiesen.

Diese Aspekte sind sehr wichtig und der dazugehörige Beitrag der genannten Literaturquellen kann kaum überschätzt werden. Dennoch, welches Verfahren zur Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems verwendet wird, hängt nicht davon ab, welches Ausgleichungsmodell verwendet wird. Obwohl sich innerhalb der Ausgleichungsrechnung die Gauß-Newton-Iteration etabliert hat, war sie nie das ausschließliche Lösungsverfahren, siehe z. B. Schwarz et al. (1968, S. 78 ff.) sowie Lawson und Hanson (1974).

Zum Abschluss soll noch auf die in der Literatur vertretene Meinung eingegangen werden, dass die Ergebnisse einer TLS-Ausgleichung »besser« sind als die einer LS-Ausgleichung, in dem Sinne, dass sie zu »realistischeren« Schätzwerten für die unbekannt Parameter führt. Mit einem Blick auf die aus Aufgabenstellung 1 resultierende LS-Ausgleichung und die aus Aufgabenstellung 3 resultierende TLS-Ausgleichung ist jedoch unmittelbar einsichtig, »[...] dass LS und TLS nicht zwei unterschiedliche Methoden sind, sondern Anwendungen der gleichen Methode (Ausgleichung nach kleinsten Quadraten) auf zwei unterschiedliche Aufgabenstellungen. Dadurch erübrigt sich jede Diskussion, welche der beiden »Methoden« besser ist. Es ist nur notwendig, immer die vorliegende Aufgabenstellung zu modellieren und nicht etwas völlig anderes.« (Petrovic 2003, S. 56).

und der Widerspruchsvektor

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} -a^0 v_{x_1}^0 + v_{y_1}^0 + a^0 (x_1 + v_{x_1}^0) + b^0 - (y_1 + v_{y_1}^0) \\ -a^0 v_{x_2}^0 + v_{y_2}^0 + a^0 (x_2 + v_{x_2}^0) + b^0 - (y_2 + v_{y_2}^0) \\ \vdots \\ -a^0 v_{x_r}^0 + v_{y_r}^0 + a^0 (x_r + v_{x_r}^0) + b^0 - (y_r + v_{y_r}^0) \end{bmatrix} \\
 = \begin{bmatrix} a^0 x_1 + b^0 - y_1 \\ a^0 x_2 + b^0 - y_2 \\ \vdots \\ a^0 x_r + b^0 - y_r \end{bmatrix} \quad (33)$$

aufgestellt werden. Aus der Lösung des linearen Gleichungssystems (28) kann man die Schätzwerte für die Unbekannten berechnen, die Verbesserungen erhält man aus (29). Die Lösungen $\hat{\mathbf{v}}$, $\hat{\mathbf{x}}$ werden im nächsten Iterationsschritt als Näherungen \mathbf{v}^0 , \mathbf{x}^0 verwendet.

Dass die Formulierung des Ausgleichungsproblems im GH-Modell für das betrachtete Beispiel einer Formulierung als TLS-Problemstellung entspricht, ist daraus ersichtlich, dass überall, wo in den bereitzustellenden Matrizen Beobachtungen auftreten, jeweils die entsprechenden Näherungswerte für die Verbesserungen angebracht werden, siehe (32) und (33). Die Tatsache, dass der Widerspruchsvektor (33) letztendlich keine Näherungswerte für die Verbesserungen mehr enthält, stellt einen Sonderfall dar, der nicht verallgemeinert werden darf, siehe hierzu Lenzmann und Lenzmann (2004b).

Anmerkung: Jede Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen mit Unbekannten (GH-Modell) lässt sich in eine Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen (GM-Modell) überführen, siehe z.B. Helmert (1924, S. 285 ff.), Mikhail und Gracie (1981), Meissl (1982). Daher kann jede TLS-Problemstellung wahlweise auch im GM-Modell bearbeitet werden, wobei wieder auf eine sachgerechte Linearisierung zu achten ist. Der Ausgleichungsansatz für die Berechnung der ausgleichenden Geraden im GM-Modell für den Fall, dass neben den Werten y_i auch die Größen x_i als Beobachtungen angesehen werden, wird in Bopp und Krauss (1977) beschrieben. In Reinking (2001) wird im Kontext der Diskussion um die »Bestimmung eindeutiger Transformationsparameter« eine ausführliche Darstellung der Formeln angegeben. Schaffrin (2007) greift diese Formeln auf und präsentiert einen modifizierten Lösungsalgorithmus.

4 Numerisches Beispiel

Das folgende numerische Beispiel mit den in Tab. 1 aufgeführten Koordinaten ist Kupferer (2005, S. 91) entnommen. Die Aufgabenstellung besteht darin, eine ausglei-

chende Gerade durch die Punkte 1 bis 4 zu berechnen, wobei die Koordinaten x_i , y_i als gleichgewichtige und unkorrelierte Beobachtungen angesehen werden. Die Aufgabe entspricht somit der Aufgabenstellung 3 aus Abschnitt 2.

Tab. 1: Beispieldatensatz

i	x_i	y_i
1	0	0
2	1	1
3	2	4
4	3	9

Die Punkte, durch die eine ausgleichende Gerade berechnet werden soll, liegen in diesem Beispiel auf einer Parabel mit dem Abplattungsfaktor 1 durch den Ursprung des Koordinatensystems. Anhand dieses Beispiels, in dem das funktionale Modell sehr schlecht zu den Daten passt, wurde in Kupferer (2005, S. 91 ff.) versucht zu zeigen, dass die Lösung einer ausgleichenden Geraden im GH-Modell nicht mit der TLS-Lösung übereinstimmt. Die in Kupferer (2005, S. 91) angegebenen Ergebnisse sind in Tab. 2 aufgeführt.

Tab. 2: Ergebnisse aus Kupferer (2005, S. 91)

Ergebnisse	TLS	GH
Steigung \hat{a}	3.241	3.000
Achsenabschnitt \hat{b}	-1.362	-1
Verbesserungsquadratsumme $\mathbf{v}^T \mathbf{v}$	0.372	0.400

Man erkennt deutlich die Abweichungen zwischen der TLS-Lösung und der angegebenen Lösung des GH-Modells.

Nun soll die Aufgabenstellung durch eine strenge Auswertung des nichtlinearen GH-Modells gelöst werden. Die erforderlichen Näherungswerte für die Unbekannten werden zunächst durch eine Geradenausgleichung mit fehlerfreien x -Werten berechnet. Diese ergeben sich zu $a^0 = 3.0$ und $b^0 = -1.0$. Als Näherungswerte für die Verbesserungen wird $v_{x_i}^0 = v_{y_i}^0 = 0$ gewählt. Mit den in Abschnitt 3 vorgestellten Formeln erhält man nach einigen Iterationen die in Tab. 3 aufgeführte Lösung.

Tab. 3: Lösung der strengen Auswertung des GH-Modells

Ergebnisse	GH, streng
Steigung \hat{a}	$\hat{a} = 3.241804$, $\sigma_{\hat{a}} = 0.678679$
Achsenabschnitt \hat{b}	$\hat{b} = -1.362705$, $\sigma_{\hat{b}} = 1.254155$
Verbesserungsquadratsumme $\mathbf{v}^T \mathbf{v}$	0.372946

Vergleicht man die Ergebnisse der strengen Auswertung des nichtlinearen GH-Modells mit der TLS-Lösung in Tab. 2, ist festzustellen, dass in beiden Fällen die sach-

gerechte Lösung einer Ausgleichungsaufgabe gemäß der Aufgabenstellung 3 aus Abschnitt 2 erzielt wurde².

Berechnet man die ausgleichende Gerade mit den in Reinking (2001) aufgeführten Formeln im GM-Modell, erhält man, da beide Lösungswege äquivalent sind, dieselben Ergebnisse wie in Tab. 3 aufgeführt, die über die dargestellten Nachkommastellen hinaus im Rahmen der Rechenschärfe übereinstimmen.

5 Diskussion der Ergebnisse

Wie kommt es aber nun dazu, dass in Kupferer (2005, S. 91) bei der Lösung der Aufgabenstellung im GH-Modell die in Tab. 2 aufgeführten abweichenden Ergebnisse erzielt wurden? Die Antwort liefert ein Blick auf Seite 85 in Kupferer (2005). Dort wird die Funktionalmatrix \mathbf{A} mit

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_k & 1 \end{bmatrix} \quad (34)$$

angegeben. Ein Vergleich mit der Funktionalmatrix der strengen Auswertung des GH-Modells (32) zeigt, dass die Verbesserungen, die an die Beobachtungen x_i anzubringen sind, nicht berücksichtigt wurden. Verwendet man aber die Funktionalmatrix \mathbf{A} in der Form (34), erhält man nicht die strenge Lösung des nichtlinearen GH-Modells, sondern lediglich eine *Näherungslösung*, die einer Linearisierung an der Stelle $\mathbf{v}^0 = \mathbf{0}$ entspricht. Anzumerken ist, dass diese Näherungslösung vielfach in der Literatur zu finden ist, wie Lenzmann und Lenzmann (2004a) unter Angabe entsprechender Literaturquellen darlegen.

Wie stark das Ergebnis der Ausgleichung von einer näherungsweise Linearisierung verfälscht wird, hängt davon ab, wie groß die Residuen im Verhältnis zu den Beobachtungen sind. Koch (2004) argumentiert am Beispiel der räumlichen Helmert-Transformation mit variablen Koordinaten in Start- und Zielsystem, dass die Residuen der Koordinaten klein sind im Vergleich zu den Koordinaten selbst und man bei Vorliegen guter Näherungswerte auch mit einer genäherten Linearisierung eine »korrekte« Lösung erhält. Diese Feststellung zeigt sich auch in den numerischen Untersuchungen in Kupferer (2005, S. 86 ff.), in denen die Näherungslösung des GH-Modells erst mit zunehmendem Messrauschen und groben Fehlern in den Beobachtungen stärker von der sachgerechten Lösung der zugrunde liegenden Aufgabenstellung abweicht. Weitere Vergleiche zwischen der Näherungslösung und der stren-

gen Lösung sind in Bopp und Krauss (1978) anhand von Beispielen zum ausgleichenden Kreis, zur ausgleichenden Parabel und zur ausgleichenden Ebene zu finden.

Sind die Abweichungen der Näherungslösung zur strengen Lösung des GH-Modells in vielen Fällen sehr klein und somit von rein akademischem Interesse, so ändert sich diese Situation, wenn das angesetzte funktionale Modell sehr schlecht oder gar nicht zu den Beobachtungen passt. Da derartige Beispiele gerne verwendet werden, um die Anwendung von TLS zu veranschaulichen, siehe Kupferer (2005, S. 91) und Schaffrin et al. (2006), treten Residuen auf, die im Verhältnis zu den Beobachtungen beträchtliche Größenordnungen annehmen und somit zum Versagen der näherungsweise Auswertung des GH-Modells führen. Löst man dann z. B. die Aufgabenstellung 3 aus Abschnitt 2 mit der näherungsweise Auswertung des nichtlinearen GH-Modells, erhält man die in Tab. 2 aufgeführten abweichenden Ergebnisse.

Fazit: Was in Kupferer (2005, S. 91) aufgezeigt wird, ist nicht das Versagen des GH-Modells, sondern lediglich das Versagen der *näherungsweise* Auswertung des nichtlinearen GH-Modells im Falle großer Residuen. So genannte TLS-Problemstellungen lassen sich problemlos durch eine strenge Auswertung des nichtlinearen GH-Modells sachgerecht bearbeiten, was am Beispiel der ausgleichenden Geraden gezeigt wurde. Eine äquivalente Formulierung des Ausgleichungsproblems im GM-Modell ist ebenfalls möglich.

6 Schlussbetrachtung

Nach einer kurzen Einführung in die aus der mathematischen Statistik stammende TLS-Terminologie wurde das Beispiel der ausgleichenden Geraden betrachtet. Je nachdem, ob die Werte y_i , die Werte x_i oder jeweils beide Werte als fehlerbehaftete Beobachtungen angesehen werden, resultieren drei unterschiedliche Aufgabenstellungen, die sich allesamt durch eine Ausgleichung nach kleinsten Quadraten sowohl im GM- als auch im GH-Modell sachgerecht lösen lassen.

Diese Lösungswege werden in der Literatur zur mathematischen Statistik und neuerdings vielfach auch in der geodätischen Literatur nicht berücksichtigt, vielmehr wird der Fall, dass es sich bei den Werten y_i und x_i um fehlerbehaftete Beobachtungen handelt, als TLS-Problemstellung behandelt. Da bei der TLS-Ausgleichung jedoch dieselbe Zielfunktion minimiert wird wie bei einer Ausgleichung nach kleinsten Quadraten, kann TLS nicht als eine neue Ausgleichungsmethode angesehen werden, vielmehr stellt TLS lediglich eine weitere Möglichkeit der Formulierung von Ausgleichungsproblemen *innerhalb* der Methode der kleinsten Quadrate dar. TLS kann somit als Ausgleichungsmodell angesehen werden, das gleichberechtigt neben dem GM- und dem GH-Modell einzu-stufen ist.

² Dass die Ergebnisse in Tab. 3 bei einer Rundung auf drei Nachkommastellen von denen in Tab. 2 abweichen, liegt daran, dass in Kupferer (2005, S. 91) die Ergebnisse offensichtlich unsachgemäß gerundet wurden. In der gleichen Publikation wird auf S. 93 die Verbesserungsquadratsumme mit $\mathbf{v}^T \mathbf{v} = 0.3729$ angegeben.

Positiv hervorzuheben ist, dass zur Berechnung der Zahlenergebnisse einer Ausgleichung im TLS-Modell numerische Verfahren unter besonderer Berücksichtigung von Stabilitätsproblemen, der numerischen Günstigkeit und der Effizienz entwickelt wurden. Da sich derartige Überlegungen aber z.B. auf eine Ausgleichung im GM-Modell übertragen lassen, ergibt sich aus diesem Aspekt keine besondere Stellung einer Ausgleichung im TLS-Modell.

Die Diskussion, ob TLS »bessere« Ergebnisse liefert als eine LS-Ausgleichung, erübrigt sich, da jeweils andere Größen als fehlerbehaftete Beobachtungen in die Ausgleichung eingeführt werden und somit die zugrunde liegenden Aufgabenstellungen unterschiedlich sind.

Die sachgerechte Lösung der so genannten TLS-Problemstellung für die ausgleichende Gerade wurde anhand der strengen Auswertung des nichtlinearen GH-Modells gezeigt. Wie bei allen nichtlinearen Ausgleichungsproblemen, die mit Hilfe einer Linearisierung iterativ gelöst werden sollen, stellt sich die Frage nach einer sachgerechten Linearisierung und Iteration. Eine Lösung dieses Problems bietet auf einfache und unmittelbar einsichtige Weise die in Lenzmann und Lenzmann (2004a) vorgestellte strenge Auswertung des nichtlinearen GH-Modells unter Verwendung linearisierter Bedingungsgleichungen, bei der die Linearisierung an der Stelle der Näherungswerte \mathbf{x}^0 und \mathbf{v}^0 erfolgt.

Da sich jedes GH-Modell in ein äquivalentes GM-Modell überführen lässt, können TLS-Problemstellungen alternativ im GM-Modell bearbeitet werden. Die entsprechenden Formeln für die ausgleichende Gerade werden in Reinking (2001) und Schaffrin (2007) vorgestellt.

Die Ansicht, dass es durch eine Auswertung des GH-Modells, insbesondere bei großen Residuen der Beobachtungen, nicht gelingt, die Lösung einer Auswertung des TLS-Modells zu erzielen, wurde anhand eines numerischen Beispiels aus Kupferer (2005, S. 91) untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass das abweichende Zahlenergebnis einzig und allein darin begründet liegt, dass lediglich eine näherungsweise Auswertung des nichtlinearen GH-Modells zugrunde gelegt wurde, die einer Linearisierung an der Stelle $\mathbf{v}^0 = \mathbf{0}$ entspricht.

Die in diesem Beitrag am Beispiel der ausgleichenden Geraden vorgenommene Einordnung von TLS innerhalb der Methode der kleinsten Quadrate kann natürlich ebenso anhand anderer Anwendungsbeispiele erfolgen. Dies erscheint ratsam, da sich die TLS-Terminologie bereits auf weitere klassische Aufgabenstellungen der Geodäsie, wie z.B. der Koordinatentransformation, ausgebreitet hat.

Literatur

Akyilmaz, O.: Total Least Squares Solution of Coordinate Transformation. *Survey Review*, 39 (303), 68–80, 2007.
 Böck, R.: Allgemeinste Formulierung der Ausgleichsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadratsummen. *ZfV* 86, S. 43–45 und S. 98–106, 1961.

Bopp, H.; Krauss, H.: Die strenge Bestimmung einer ausgleichenden Geraden bei korrelierten Beobachtungen nach der Methode der kleinsten Quadrate. *ZfV* 102, S. 261–270, 1977.
 Bopp, H.; Krauss, H.: Strenge oder herkömmliche bedingte Ausgleichung mit Unbekannten bei nichtlinearen Bedingungsgleichungen? *AVN* 84, S. 27–31, 1978.
 Gauß, C.F.: *Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium*. Hamburg, F. Perthes und I.H. Besser, 1809.
 Golub, G.H.; van Loan, C.: An Analysis of the Total Least-Squares Problem. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Volume 17 Issue 6, pp. 883–893, 1980.
 Helmert, F.-R.: *Die Ausgleichsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadrate*. 3. Auflage, Teubner-Verlag, Leipzig, Berlin, 1924.
 Huffel, van, S.; Vandewalle, J.: *The Total Least Squares Problem, Computational Aspects and Analysis*. SIAM, Philadelphia, 1991.
 Koch, K.-R.: Kommentare zur Veröffentlichung »Strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells«. *AVN* 111, S. 276–277, 2004.
 Kupferer, S.: Zur korrekten Linearisierung von nichtlinearen GH-Modellen. *AVN* 111, S. 394–396, 2004.
 Kupferer, S.: Anwendung der Total-Least-Squares-Technik bei geodätischen Problemstellungen. Universität Karlsruhe (TH), Schriftenreihe des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik 2005, 1, Universitätsverlag Karlsruhe, 2005.
 Lawson, C.L.; Hanson, R.J.: *Solving Least Squares Problems*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
 Lenzmann, L.; Lenzmann, E.: Strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells. *AVN* 111, S. 68–73, 2004a.
 Lenzmann, L.; Lenzmann, E.: Erwiderung auf die Kommentare von Karl-Rudolf Koch zu unserer Veröffentlichung »Strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells« in der *AVN* 2/2004. *AVN* 111, S. 277–278, 2004b.
 Lenzmann, L.; Lenzmann, E.: Stellungnahme zu dem Beitrag »Zur korrekten Linearisierung von nichtlinearen GH-Modellen« von Stephan Kupferer. *AVN* 112, S. 114, 2005.
 Meissl, P.: Least Squares Adjustment: A Modern Approach. *Mitteilungen der geodätischen Institute der TU Graz*, Folge 43, 1982.
 Mikhail, E.M.; Gracie, G.: *Analysis and Adjustment of Survey Measurements*. Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1981.
 Niemeier, W.: *Ausgleichsrechnung*. Walter de Gruyter, Berlin, New York, 2002.
 Petrovic, S.: Parameterschätzung für unvollständige funktionale Modelle in der Geodäsie. *Deutsche Geodätische Kommission, Reihe C, Heft Nr. 563*, München, 2003.
 Pope, A.J.: Some Pitfalls to be Avoided in the Iterative Adjustment of Nonlinear Problems. *Proceedings of the 38th Annual Meeting of the American Society of Photogrammetry*, Washington, D.C., pp. 449–477, 1972.
 Reinking, J.: Anmerkung zu »Zur Bestimmung eindeutiger Transformationsparameter«. *ZfV* 126, S. 295–296, 2001.
 Schaffrin, B.; Lee, I.; Felus, Y.; Choi, Y.: Total Least-Squares (TLS) for Geodetic Straight-Line and Plane Adjustment. *Bollettino di Geodesia e Scienze Affini*, No. 3, 2006, pp. 141–165, 2006.
 Schaffrin, B.: Connecting the Dots: The Straight-Line Case Revisited. *zfv* 132, S. 385–394, 2007.
 Schwarz, H.R.; Rutishauser, H.; Stiefel, E.: *Numerik symmetrischer Matrizen*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1968.

Anschrift der Autoren

Prof. Dr.-Ing. Frank Neitzel
 i3mainz – Institut für Raumbezogene Informations- und Messtechnik
 Fachhochschule Mainz
 Holzstraße 36, 55116 Mainz
 Tel.: +49 (0)6131 2859-625, Fax: +49 (0)6131 2859-615
 neitzel@geoinform.fh-mainz.de

Privatdozent Dr. habil. Svetozar Petrovic
 GeoForschungsZentrum Potsdam
 Department 1: Geodäsie und Fernerkundung
 Sektion 1.3: Gravitationsfeld und Erdmodelle
 Telegrafenberg C3, 14473 Potsdam
 Tel.: +49 (0)331 288-1741, Fax: +49 (0)331 288-1169
 sp@gfz-potsdam.de