

Zur Einordnung der geodätischen Ausgleichungsrechnung in der numerischen Optimierung

On the Classification of Geodetic Adjustment Computation in Numerical Optimization

Michael Lösler

Zusammenfassung

Die geodätische Ausgleichungsrechnung ist vor allem durch ihre Problemfokussierung und Lösungsorientierung charakterisiert. So wird das Modell einer bedingten Ausgleichung verwendet, wenn ein parameterfreier funktionaler Zusammenhang vorliegt. Lassen sich die Beobachtungen hingegen explizit als Funktionen der unbekannten Parameter darstellen, wird das Optimierungsproblem in der Regel im Gauß-Markov-Modell formuliert. Für den Allgemeinfall eines impliziten funktionalen Zusammenhangs zwischen den Beobachtungen und den Parametern existiert das Gauß-Helmert-Modell. Durch diese Aufteilung entsteht häufig der Eindruck, dass es sich um eigenständige und voneinander unabhängige Modelle handelt. In der numerischen Optimierung ist diese Klassifizierung bisweilen unüblich. In diesem Beitrag werden mittels sequenzieller quadratischer Programmierung die Grundformen der geodätischen Ausgleichungsrechnung im Kontext der numerischen Optimierung betrachtet und auf ein gemeinsames Modell zurückgeführt. Weiterhin werden numerische Verfahren aufgezeigt, die den notwendigen Approximationsalgorithmus zur Bestimmung der Lösung bereitstellen, und am Beispiel einer orthogonalen Regression demonstriert.

Schlüsselwörter: Numerische Optimierung, Ausgleichungsrechnung, sequenzielle quadratische Programmierung, Orthogonale Regression, Newton-Verfahren, Newton-artige Verfahren, BFGS

Summary

Geodetic adjustment computation is characterized by a strong problem-based and solution-oriented representation. The conditional equation model is applied, for instance, if the functional relationships are parameter-free. If the observations are explicit functions of the parameters, the Gauss-Markov model is commonly used. The Gauss-Helmert model refers to the general case of adjustment and deals with an implicit functional relation between the observations and the parameters to be estimated. This classification promotes the assumption that the geodetic basic models of adjustment calculus are independent from each other. However, in numerical optimization, such a classification is unusual. In this investigation, the sequential quadratic programming is introduced to classify the geodetic basic models in the framework of numerical optimization. It is shown that the models used in geodetic adjustment are based on a generalized model. Using

the example of an orthogonal regression, the sequential quadratic programming is demonstrated using various numerical approaches.

Keywords: Numerical Optimization, Least-Squares Adjustment, Sequential Quadratic Programming, Orthogonal-Distance-Fit, Newton's method, Newton-type methods, BFGS

1 Einleitung

Die Auswertung von redundant beobachteten Messdaten erfolgt in der Geodäsie im Allgemeinen durch eine Ausgleichungsrechnung. Liegt ein parameterfreies Modell vor, in dem ausschließlich Beobachtungen auftreten, lässt sich das Problem durch die Ausgleichungsaufgabe nach bedingten Beobachtungen beschreiben (z. B. Lenzmann und Lenzmann 2004). Ist hingegen jede Beobachtung explizit als funktionaler Zusammenhang der zu schätzenden Parameter darstellbar, wird im Allgemeinen auf das Gauß-Markov-Modell zurückgegriffen (z. B. Lenzmann und Lenzmann 2007). Kann der funktionale Zusammenhang zwischen den Beobachtungen und den Parametern nur implizit formuliert werden, greift das Gauß-Helmert-Modell, welches auch als »Allgemeinfall der Ausgleichungsrechnung« bezeichnet wird (Wolf 1978). Diese drei Grundformen lassen sich bei Bedarf durch zusätzliche Restriktionen erweitern (Jäger et al. 2005). Die geodätische Ausgleichungsrechnung ist demnach anwendungsorientiert aufgebaut.

Die auftretenden Gleichungen im funktionalen Modell und in den zusätzlichen Restriktionen sind in praktisch allen Anwendungen nichtlinear, und eine geschlossene analytische Lösung existiert nur in einigen wenigen Fällen. Hierzu zählt u. a. die Parameterbestimmung bestimmter Kurven und Flächen im Kontext der Formanalyse (Malissiovas et al. 2016), aber auch für einige Transformationsprobleme existieren geschlossene Lösungen (Lehmann und Lösler 2024). Im Allgemeinen wird die Lösung iterativ durch das Newton-Verfahren oder ein Newton-artiges Lösungsverfahren wie beispielsweise das Gauß-Newton-Verfahren oder ein Quasi-Newton-Verfahren herbeigeführt. Während die gewählte Grundform den funktionalen Zusammenhang charakterisiert, stellt das eingesetzte Lösungsverfahren den Approximationsalgorithmus

zur numerischen Bestimmung der Lösung bereit. Das Lösungsverfahren ist demnach unabhängig von der vorliegenden Grundform.

Die Parameterschätzung ist ein Teilgebiet der numerischen Optimierung. In der Literatur zur numerischen Optimierung – wie z. B. Nocedal und Wright (2006), Geiger und Kanzow (2002) oder Boyd und Vandenberghe (2004) – wird nicht zwischen den genannten Grundformen unterschieden und Bezeichnungen wie das Gauß-Helmert-Modell sind bisweilen unüblich. Durch das Aufteilen in die drei Grundformen entsteht bei der praktischen Anwendung häufig auch der Eindruck, dass es sich um eigenständige und voneinander unabhängige Modelle handelt, wie Linkwitz (1960) kritisch anmerkt. Diese unterschiedlichen Sichtweisen und Terminologien erschweren insbesondere den fachlichen Austausch bei interdisziplinären Projekten und Kooperationen.

In der numerischen Optimierung zählt die sequenzielle quadratische Programmierung (SQP) zur Klasse der wichtigsten Verfahren zum Lösen von Optimierungsaufgaben mit nichtlinearen Nebenbedingungen. In diesem Beitrag wird die SQP verwendet, um die geodätische Ausgleichungsrechnung im Kontext der numerischen Optimierung zu betrachten. In Ergänzung zu der Darstellung von Linkwitz (1960), der die verschiedenen Ausgleichungsformen in der Geodäsie wahlweise auf die vermittelnde oder die bedingte Ausgleichung zurückführt, wird in diesem Beitrag gezeigt, dass sich die geodätische Ausgleichungsrechnung als Spezialfall innerhalb der Klasse von Optimierungsproblemen darstellen lässt und alle Ausgleichungsformen auf ein gemeinsames Modell zurückgeführt werden können.

In Abschnitt 2 wird zunächst die sequenzielle quadratische Programmierung zum Lösen eines konvexen Optimierungsproblems eingeführt, welches numerisch mit dem Newton-Verfahren gelöst wird. Abschnitt 3 beschreibt mit dem Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno-Algorithmus (BFGS) ein Quasi-Newton-Verfahren, welches in der numerischen Optimierung häufig alternativ zum Newton-Verfahren verwendet wird, um das Bilden der zweiten partiellen Ableitungen zu umgehen, die das Newton-Verfahren benötigt. Die Grundformen der geodätischen Ausgleichungsrechnung werden in Abschnitt 4 auf ein spezielles Optimierungsproblem zurückgeführt. Dieses Optimierungsproblem wird in Abschnitt 5 genutzt, um zwei Interpretationen einer orthogonalen Regression zu veranschaulichen. Abschnitt 6 fasst diesen Beitrag zusammen.

2 Sequenzielle quadratische Programmierung

In der numerischen Optimierung gehört die sequenzielle quadratische Programmierung zur Klasse der wichtigsten Verfahren zum Lösen von konvexen Optimierungsaufgaben mit nichtlinearen Nebenbedingungen (Geiger und

Kanzow 2002, S. 234). Unter Verwendung der Lagrange-Funktion lassen sich Optimierungsprobleme sowohl mit Gleichungen als auch mit Ungleichungen in den Nebenbedingungen effizient lösen. Ungleichungen treten in der Geodäsie nur in sehr wenigen Anwendungsbereichen auf, sodass sie bisher keinen Einzug in die geodätischen Lehrbücher gefunden haben und daher auch in diesem Beitrag unberücksichtigt bleiben.

Das zu lösende restringierte Optimierungsproblem sei

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

unter der Nebenbedingung

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

Hierin ist Ω die Zielfunktion, \mathbf{f} die vektorielle Funktion mit m Nebenbedingungen $f^{(i)}$ und \mathbf{u} der Vektor der zu schätzenden Parameter. Beide Funktionen seien zweimal stetig differenzierbar und werden mittels Lagrange-Funktion zusammengeführt, d. h.

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

worin $\boldsymbol{\lambda}$ der Vektor mit den Lagrange-Multiplikatoren ist. Sowohl \mathbf{u} als auch $\boldsymbol{\lambda}$ stellen somit die zu schätzenden Größen dar. Der Faktor $\frac{1}{2}$ vor der Zielfunktion ist aus rein praktischen Gründen eingeführt, hat jedoch keinen Einfluss auf die Lösung.

Die notwendige Bedingung der Extremwertaufgabe fordert, dass der Gradient der Lagrange-Funktion für die Lösungsvektoren $\hat{\mathbf{u}}$ und $\hat{\boldsymbol{\lambda}}$ verschwindet und lautet

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

worin die zweite Zeile aus Konventionsgründen mit -1 multipliziert wurde. Der Gradient der Zielfunktion ist $\nabla_{\mathbf{u}} \Omega(\mathbf{u})$ und $\mathbf{J}_f(\mathbf{u})$ bezeichnet die Jacobimatrix von \mathbf{f} an der Stelle \mathbf{u} . Ist weiterhin die hinreichende Bedingung

$$\mathbf{y}^T \nabla_{\mathbf{uu}}^2 \mathcal{L}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}}) \mathbf{y} > 0, \quad \forall \mathbf{y} \{ \mathbf{J}_f(\hat{\mathbf{u}})^T \mathbf{y} = \mathbf{0}; \mathbf{y} \neq \mathbf{0} \} \quad (4)$$

erfüllt, ist der stationäre Punkt $\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{u}} & \hat{\boldsymbol{\lambda}} \end{bmatrix}^T$ der Lagrange-Funktion ein (lokales) Minimum (Nocedal Wright 2006, S. 332).

Das Newton-Verfahren angewandt auf die notwendige Bedingung in Gl. (3) liefert den Iterationsalgorithmus zur Bestimmung von $\hat{\mathbf{u}}$ und $\hat{\boldsymbol{\lambda}}$. Mit den iterierten \mathbf{u}_k und $\boldsymbol{\lambda}_k$ aus dem k -ten Berechnungsschritt ergeben sich mit

$$\Phi'(\mathbf{u}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_k \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_k \end{bmatrix} = -\Phi(\mathbf{u}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) \quad (5)$$

die korrespondierenden Zuschläge $\Delta \mathbf{u}_k = \mathbf{u}_{k+1} - \mathbf{u}_k$ und $\Delta \lambda_k = \lambda_{k+1} - \lambda_k$ für die unbekannten Parameter und die Lagrange-Multiplikatoren. Hierin enthält die Matrix

$$\Phi'(\mathbf{u}_k, \lambda_k) = \begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}_k, \lambda_k) & -\mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (6)$$

mit

$$\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}_k, \lambda_k) = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \Omega(\mathbf{u}_k) - \sum_{i=1}^m \lambda_k^{(i)} \mathbf{H}_f^{(i)}(\mathbf{u}_k) \quad (7)$$

die partiellen Ableitungen von Φ an der aktuellen Entwicklungsstelle \mathbf{u}_k und λ_k . $\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \Omega(\mathbf{u})$ und $\mathbf{H}_f^{(i)}(\mathbf{u})$ bezeichnen die Hessematrizen der Zielfunktion sowie der i -ten Nebenbedingung $f^{(i)}$, und $\lambda^{(i)}$ symbolisiert den mit $f^{(i)}$ korrespondierenden Lagrange-Multiplikator.

In Übereinstimmung mit den Gln. (3) bis (7) lautet das im k -ten Iterationsschritt zu lösende Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}_k, \lambda_k) & -\mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_k \\ \Delta \lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{u}} \Omega(\mathbf{u}_k) - \mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \lambda_k \\ f(\mathbf{u}_k) \end{bmatrix} \quad (8)$$

Das Newton-Verfahren als lokal konvergentes Verfahren benötigt hinreichend gute Startwerte \mathbf{u}_0 und λ_0 . Unter dieser Voraussetzung kann das Verfahren quadratisch konvergieren (Geiger und Kanzow 2002, S. 238). Erfüllt die Lösung die notwendige und hinreichende Optimalitätsbedingung, so folgt aus dem letzten Iterationsschritt die Lösung $\hat{\mathbf{u}} := \mathbf{u}_{k+1}$ und $\hat{\lambda} := \lambda_{k+1}$ eines (lokalen) Minimums.

Aufgrund der schnellen Konvergenz empfiehlt Späth (2007) den Einsatz des Newton-Verfahrens zum Bestimmen von Transformationsparametern. Lenzmann und Lenzmann (2007) heben – neben dem schnellen Konvergenzverhalten und der einhergehenden Reduktion von rechenaufwändigen Matrixinversionen – den intrinsischen Nachweis für ein lokales Minimum hervor. Sie weisen jedoch auch darauf hin, dass diese Vorteile durch das Bereitstellen der zweiten partiellen Ableitungen erkauft werden.

3 BFGS-Verfahren

Das Anwenden des Newton-Verfahrens (5) erfordert das Bereitstellen der zweiten partiellen Ableitungen. Bei ungünstig gewählten Werten \mathbf{u} und λ kann $\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda)$ schlecht konditioniert sein, sodass das Iterationsverfahren ein ungünstiges Konvergenzverhalten aufweist oder sogar divergiert, wie Schek und Maier (1976) zeigen. Ferner kann es in Abhängigkeit des Optimierungsproblems herausfordernd sein, die zweite Ableitung mit vertretbarem Aufwand zu bilden. Um diese Nachteile zu umgehen, wird in

der numerischen Optimierung häufig auf ein Quasi-Newton-Verfahren zurückgegriffen.

Eines der verbreitetsten Quasi-Newton-Verfahren ist das nach Broyden, Fletcher, Goldfarb und Shanno benannte BFGS-Verfahren, welches nach Geiger und Kanzow (1999, S. 135) als das erfolgreichste aller Quasi-Newton-Verfahren gilt. Eine entsprechende Implementierung ist in zahlreichen Programmpaketen wie beispielsweise der *Optimization Toolbox* in Matlab oder der Python Bibliothek *scipy.optimize.minimize* vorhanden. Insbesondere für große Optimierungsprobleme mit vielen Parametern existieren spezielle Varianten des BFGS-Verfahrens wie z. B. das Limited-memory BFGS-Verfahren (Nocedal und Wright 2006, S. 177 ff.).

Anstatt die Hessematrizen in Gl. (7) explizit zu bilden, approximieren Quasi-Newton-Verfahren diese lediglich, d. h.

$$\mathbf{B} \approx \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}, \lambda), \quad (9)$$

sodass sich der numerische Aufwand reduziert.

Für restringierte Optimierungsaufgaben leitet Powell (1978a) die modifizierte BFGS-Updatevorschrift

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k - \frac{\mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k \Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{B}_k}{\Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k} + \frac{\mathbf{q}_k \mathbf{q}_k^T}{\Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{q}_k} \quad (10)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_k &= \theta_k \mathbf{y}_k + (1 - \theta_k) \mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k, \\ \mathbf{y}_k &= \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L}(\Delta \mathbf{u}_{k+1}, \lambda_k) - \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L}(\Delta \mathbf{u}_k, \lambda_k), \\ \theta_k &= \begin{cases} 1, & \text{falls } \Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{y}_k \geq 0, 2 \Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k \\ \frac{0,8 \Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k}{\Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{B}_k \Delta \mathbf{u}_k - \Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{y}_k}, & \text{ansonsten} \end{cases} \end{aligned}$$

her. Geiger und Kanzow (2002, S. 135 ff.) zeigen, dass jedes Update $\Delta \mathbf{u}_k^T \mathbf{q}_k > 0$ sicherstellt, sodass \mathbf{B}_{k+1} stets symmetrisch und positiv definit ist, sofern \mathbf{B}_k bereits symmetrisch und positiv definit war. Durch Substitution von Gl. (9) in Gl. (6) ergibt sich

$$\Phi'_{\text{BFGS}}(\mathbf{u}_k, \lambda_k) = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_k & -\mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Für weitere Details und Hinweise zur Implementierung des BFGS-Verfahrens sei auf Nocedal und Wright (2006, Kap. 18.3) verwiesen. Ein problemunspezifischer Startwert für \mathbf{B} lautet $\mathbf{B}_0 = \tau \mathbf{I}$ mit $\tau > 0$, womit \mathbf{B}_0 symmetrisch und positiv definit ist (Shanno und Phua 1978). Powell (1978b) zeigt, dass das modifizierte BFGS-Verfahren superlinear konvergiert.

4 Geodätische Ausgleichungsrechnung

Das Modell der bedingten Ausgleichung, das Gauß-Markov-Modell und das Gauß-Helmert-Modell sind geodätische Bezeichnungen, die in der Literatur zur numerischen Optimierung unüblich sind. Im Folgenden wird mittels SQP gezeigt, dass diese drei Grundformen als eine spezielle Optimierungsaufgabe innerhalb der Klasse von Optimierungsproblemen (1) aufgefasst werden können.

Ausgangspunkt der Betrachtung sei Gl. (8), welche durch Subtraktion von $\mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \boldsymbol{\lambda}_k$ in der ersten Zeile auf die gebräuchliche Darstellung

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \mathcal{L}(\mathbf{u}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) & -\mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{u}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{u}} \Omega(\mathbf{u}_k) \\ \mathbf{f}(\mathbf{u}_k) \end{bmatrix} \quad (12)$$

gebracht wurde. Hierdurch werden anstelle der Zuschläge $\Delta \boldsymbol{\lambda}$ die Lagrange-Multiplikatoren direkt geschätzt. Mitunter werden die Lagrange-Multiplikatoren auch als Korrelaten bezeichnet (Wolf 1978). Der Parametervektor $\mathbf{u}^T = [\mathbf{e}^T \quad \mathbf{x}^T]$ in Gl. (1) lässt sich sachlogisch in die Beobachtungsresiduen \mathbf{e} und die Modellparameter \mathbf{x} unterteilen. Ferner sei die quadratische Zielfunktion durch

$$\Omega(\mathbf{u}) = \mathbf{u}^T \mathbf{W} \mathbf{u} \quad (13)$$

gegeben, worin \mathbf{W} eine positiv-semidefinite Matrix ist, welche die Parameter in \mathbf{u} , für die das Minimum in Gl. (1a) gesucht wird, selektiert und gewichtet. Ist das Minimum ausschließlich für die Quadratsumme der gewichteten Residuen zu bilden, so lautet die spezielle Zielfunktion

$$\Omega(\mathbf{e}, \mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \mathbf{e}^T & \mathbf{x}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (14)$$

worin \mathbf{W}_e die positiv-definite Gewichtsmatrix der Residuen ist. Das Festlegen der Gewichtung erfolgt im stochastischen Modell der Ausgleichung und basiert auf der Dispersion der Residuen, für die üblicherweise Normalverteilung $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_0^2 \mathbf{W}_e^{-1})$ unterstellt wird (Koch 1999, S. 104). Hierin bezeichnet σ_0^2 die Varianz der Gewichtseinheit. In diesem Beitrag wird das Residuum im Sinne eines Fehlers interpretiert. Eine alternative aber vollständig äquivalente Darstellung resultiert, wenn anstelle der Residuen \mathbf{e} die Verbesserungen $\mathbf{v} = -\mathbf{e}$ eingeführt werden.

Mit dem Gradienten $\nabla_{\mathbf{u}} \Omega(\mathbf{u}) = 2\mathbf{W}\mathbf{u}$ und der Hessematrix $\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \Omega(\mathbf{u}) = 2\mathbf{W}$ der Zielfunktion folgt für $\boldsymbol{\lambda}_0 = \mathbf{0}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_e & \mathbf{0} & -\mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) & \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{e}_k \\ \Delta \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e \mathbf{e}_k \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{f}(\mathbf{e}_k, \mathbf{x}_k) \end{bmatrix}, \quad (15)$$

worin die Jacobimatrix $\mathbf{J}_f(\mathbf{u}) = [\mathbf{J}_f(\mathbf{e}) \quad \mathbf{J}_f(\mathbf{x})]$ entsprechend der Parameteraufteilung separiert wurde und die

Submatrizen $\mathbf{J}_f(\mathbf{e})$ und $\mathbf{J}_f(\mathbf{x})$ die partiellen Ableitungen von \mathbf{f} an der Stelle \mathbf{e} bzw. \mathbf{x} enthalten. Das Substituieren von $\Delta \mathbf{e}_k = \mathbf{e}_{k+1} - \mathbf{e}_k$ in der ersten und dritten Gleichung führt auf

$$\mathbf{W}_e \mathbf{e}_{k+1} - \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \mathbf{0}, \quad (16a)$$

$$\mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) \mathbf{e}_{k+1} + \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) \Delta \mathbf{x}_k + \mathbf{f}(\mathbf{e}_k, \mathbf{x}_k) - \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k = \mathbf{0}. \quad (16b)$$

Mit dem häufig auch als Widerspruchsvektor bezeichneten Vektor $\mathbf{w} = \mathbf{f}(\mathbf{e}_k, \mathbf{x}_k) - \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k$ lässt sich Gl. (15) sodann umformen zu

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_e & \mathbf{0} & -\mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) & \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{k+1} \\ \Delta \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Liegt mit $\mathbf{u} = \mathbf{e}$ ein parameterfreies Modell vor, ergibt sich mit

$$\begin{bmatrix} \mathbf{W}_e & -\mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{k+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \quad (18)$$

direkt das Modell der bedingten Ausgleichungsrechnung (Lenzmann und Lenzmann 2004). Gl. (15) kann demnach als bedingte Ausgleichung mit zusätzlichen Unbekannten in den Restriktionen interpretiert werden.

Aus Gl. (16a) folgt $\mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{W}_e^{-1} \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \boldsymbol{\lambda}_{k+1}$. Eingesetzt in Gl. (17) ergibt das um die Residuen \mathbf{e} reduzierte Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \\ \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) & \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) \mathbf{W}_e^{-1} \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

welches der gebräuchlichen Darstellung für das Gauß-Helmert-Modell entspricht (Koch 2002, Lenzmann und Lenzmann 2004, Willi et al. 2021).

Aus der zweiten Zeile in Gl. (19) liest man mit $\mathbf{P} = (\mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k) \mathbf{W}_e^{-1} \mathbf{J}_f(\mathbf{e}_k)^T)^{-1}$ weiterhin für die Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = -\mathbf{P}(\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) \Delta \mathbf{x}_k + \mathbf{w})$ ab, wobei eine positiv-definite Matrix \mathbf{P} vorausgesetzt sei. Durch Einsetzen in die erste Zeile folgt das um die Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}$ reduzierte Gleichungssystem

$$(\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{P} \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)) \Delta \mathbf{x}_k = -\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{P} \mathbf{w}. \quad (20)$$

Dieses entspricht der gebräuchlichen Darstellung für das Gauß-Markov-Modell (Jäger et al. 2005, S. 159 f.).

Die Gln. (18) bis (20) entsprechen den drei Grundformen in der Geodäsie. Sie resultieren durch einfaches Umstellen von Gl. (8) unter Berücksichtigung der speziellen Zielfunktion (14). Sie charakterisieren somit das identische

Optimierungsproblem im Sinne von Gl. (1). Dies dürfte der Hauptgrund sein, dass in der Literatur zur numerischen Optimierung nicht zwischen dem Modell der bedingten Ausgleichung, dem Gauß-Markov-Modell oder dem Gauß-Helmert-Modell unterschieden wird.

Modelle mit zusätzlichen Restriktionen sind in Gl. (1) bereits implizit enthalten. Sie resultieren durch eine entsprechende Aufteilung der Nebenbedingung (1b), d. h.

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{e}, \mathbf{x}) \\ \mathbf{f}(\mathbf{e}) \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad (21)$$

sodass hier auf eine explizite Betrachtung verzichtet wird.

Das Bereitstellen der zweiten partiellen Ableitungen wird bei der sequenziellen quadratischen Programmierung durch das Newton-Verfahren motiviert und aufgrund des erhöhten numerischen Aufwands häufig als nachteilig empfunden (Boyd und Vandenberghe 2004, S. 496). Wie Gl. (15) jedoch anschaulich zeigt, kann auf das Bilden der Hessematrizen in Gl. (7) u. U. verzichtet werden, wenn vor jedem Iterationsschritt der Vektor der Lagrange-Multiplikatoren zu $\lambda_k = \mathbf{0}$ gesetzt wird. Das Lösungsverfahren für die SQP entspricht dann einem Gauß-Newton-Verfahren. Das Konvergenzverhalten des Gauß-Newton-Verfahrens hängt vom Optimierungsproblem ab und erlaubt keine generellen Aussagen. Sind jedoch die auftretenden Residuen sehr klein und die Funktionen näherungsweise linear, so konvergiert das Verfahren ähnlich schnell wie das Newton-Verfahren (Nocedal und Wright 2006, S. 255 ff.).

Für das Optimierungsproblem (1) mit der Zielfunktion (14) liefert jedes der angegebenen Lösungsverfahren – Konvergenz vorausgesetzt – trotz unterschiedlicher Matrizen Φ' die identische Lösung für die Modellparameter \mathbf{x} . Bildlich gesprochen nutzen die verschiedenen Lösungsverfahren unterschiedliche Pfade, die jedoch alle zum selben Optimum führen (Xu et al. 2023). Es ist leicht nachzuvollziehen, dass sich auch die Inversen von Φ' in Abhängigkeit vom eingesetzten Lösungsverfahren unterscheiden und allgemein nicht mit der Dispersion von \mathbf{x} gleichzusetzen sind (Jäger et al. 2005, S. 214). Besitzt $\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)$ vollen Spaltenrang, so lautet die Dispersion 1. Ordnung der Modellparameter \mathbf{x} stets

$$\Sigma_{\mathbf{x}} = \left(\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{P} \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_k) \right)^{-1} \quad (22)$$

und entspricht der besten Schätzung für das gelöste lineare Ersatzproblem (Xu et al. 2023). Aufgrund des nichtlinearen funktionalen Zusammenhangs in der Nebenbedingung (1b) sind weder \mathbf{x} noch $\Sigma_{\mathbf{x}}$ erwartungstreu (Lösler et al. 2021, Xu et al. 2023). Die Größe, mit der sich die Verzerrung in den Schätzwerten zeigt, hängt jedoch vom stochastischen Modell ab (Lehmann und Lösler 2018). Durch die hohe Präzision geodätischer Messmittel und die im Allgemeinen kleinen Beobachtungsresiduen ist die Ver-

zerrung jedoch in vielen praktischen Anwendungen vernachlässigbar und Gl. (22) eine hinreichend gute Approximation für die Dispersion der Parameter.

5 Beispiel: Orthogonale Regression

Wird durch eine gegebene Menge an Punkten eine Funktion derart gelegt, dass die Abstände zwischen der Funktion und den einzelnen Punkten senkrecht zur Funktion stehen, so handelt es sich um eine orthogonale Regression (Lösler und Eschelbach 2020). Das Minimieren der orthogonalen Abstände gilt als das natürlichste und beste Fehlermaß innerhalb der Methode der kleinsten Residuenquadratsumme (Wijewickrema et al. 2010). Es liefert nach Sourlier (1995) die aussagekräftigsten Ergebnisse. Zur Fehlerabschätzung beim Berechnen zugeordneter Geometrielemente nach Gauß ist die orthogonale Regression Teil der DIN EN ISO 10360-6 (2009). Insbesondere die einfache Interpretation der punktbezogenen Residuenvektoren motiviert den Einsatz der orthogonalen Regression beispielsweise im Kontext der Deformationsanalyse in der Ingenieurgeodäsie (Neitzel et al. 2019).

Mit den in Lenzmann und Lenzmann (2004) gegebenen $m = 2$ Punkten in Tab. 1 ist eine Regressionsparabel, deren Scheitelpunkt im Ursprung liegt, zu schätzen. Das funktionale Modell dieser Parabel ist gegeben durch

$$0 = a x_i^2 - y_i, \quad (23)$$

worin der Formparameter a die Parabelöffnung definiert und x_i bzw. y_i die kartesischen Koordinaten des i -ten Kurvenpunktes darstellen. Die numerische Lösung erfolgt nachfolgend sowohl mit dem Newton-Verfahren (5) unter Berücksichtigung der zweiten Ableitungen (6) als auch mit dem BFGS-Verfahren mittels approximierter Hessematrix (11). Auf den Einsatz von externen Bibliotheken wird verzichtet, um etwaige Differenzen zwischen den Lösungen besser nachvollziehen und analysieren zu können.

Tab. 1: Gegebene kartesische Koordinaten in Meter zur Schätzung einer Regressionsparabel, deren Scheitelpunkt im Koordinatenursprung liegt (Lenzmann und Lenzmann 2004).

Punkt	x	y
P1	2,5	4,8
P2	4,0	5,0

In Lösler (2020) ist dieses Optimierungsproblem bereits aufgegriffen und mittels SQP anschaulich gelöst worden. Die Residuen werden mit $\mathbf{W}_e = \mathbf{I}$ als unabhängige und identisch verteilte Zufallsvariablen aufgefasst und korrespondieren jeweils mit einer beobachteten Koordinatenkomponente. Das hierbei zu lösende Optimierungsproblem lautet in expliziter Form

$$\min \Omega(\mathbf{u}) = \min \left\{ \sum_{i=1}^m e_{x_i}^2 + \sum_{i=1}^m e_{y_i}^2 \right\} \quad (24a)$$

unter der Nebenbedingung

$$f(\mathbf{u}) = 0 = a(x_i - e_{x_i})^2 - y_i + e_{y_i}, \quad \forall i = 1 \dots m. \quad (24b)$$

Die $u = 5$ zu bestimmenden Parameter sind

$$\mathbf{u}^T = (e_{x_1} \quad e_{x_2} \quad e_{y_1} \quad e_{y_2} \quad a). \quad (24c)$$

Die kartesischen Residuen in Gl. (24c) lassen sich mit

$$e_{x_i} = e_{s_i} \cos \phi_i, \quad (25a)$$

$$e_{y_i} = e_{s_i} \sin \phi_i \quad (25b)$$

durch ihre äquivalente Polardarstellung ausdrücken. Wie Abb. 1 zeigt, handelt es sich bei e_{s_i} und ϕ_i nicht um die korrespondierenden Residuen e_{r_i} und e_{ω_i} der polaren Koordinaten r_i und ω_i des i -ten Punktes, wie sie beim Übergang zwischen Beobachtungsräumen entstünden (Reinking 2022), sondern um die Polardarstellung der kartesischen Residuen e_{x_i} und e_{y_i} .

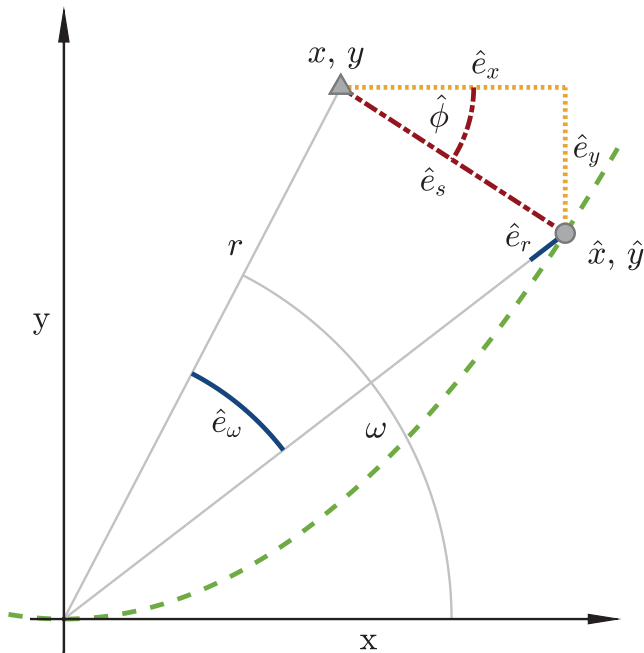


Abb. 1: Zusammenhang zwischen den kartesischen (x, y) -Koordinaten und den korrespondierenden polaren (r, ω) -Koordinaten eines Punktes und deren zugehörigen Residuen (e_x, e_y) bzw. (e_r, e_ω) sowie der polaren Darstellung (e_s, ϕ) der kartesischen Residuen (e_x, e_y) am Beispiel einer Parabel. Die Parabel ist grün gestrichelt. Die kartesischen Residuen (e_x, e_y) sind gelb gepunktet, und deren Polardarstellung (e_s, ϕ) ist als rote Strich-Punkt-Linie dargestellt. Die polaren Residuen (e_r, e_ω) sind blau. Der Lotfußpunkt besitzt die kartesischen (\hat{x}, \hat{y}) -Koordinaten.

Eingesetzt in die Zielfunktion (24a) ergibt

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{u}) &= \sum_{i=1}^m e_{x_i}^2 + \sum_{i=1}^m e_{y_i}^2 \\ &= \sum_{i=1}^m (e_{s_i} \cos \phi_i)^2 + \sum_{i=1}^m (e_{s_i} \sin \phi_i)^2 \\ &= \sum_{i=1}^m e_{s_i}^2, \end{aligned} \quad (26a)$$

da $\cos^2 \phi_i + \sin^2 \phi_i = 1$.

Aus dieser Darstellung wird deutlich, dass ausschließlich die Abstände e_{s_i} zwischen dem jeweiligen Punkt und der Funktion minimiert werden. Der kürzeste Abstand \hat{e}_s ist bekanntlich zwischen einem Punkt und dessen Lotfußpunkt auf der Funktion definiert, sodass das Optimierungsproblem zweifelsfrei eine orthogonale Regression beschreibt. Da es sich bei den kartesischen Residuen um unabhängige und identisch verteilte Zufallsvariablen handelt, sind auch die Abstände e_{s_i} wiederum unabhängige und identisch verteilte Zufallsvariablen (Lösler 2020). Die jeweilige Winkelkomponente ϕ_i ist offensichtlich nicht Teil der Zielfunktion (14). Die nichtlineare Nebenbedingung ergibt sich mittels Gl. (25) zu

$$f(\mathbf{u}) = 0 = a(x_i - e_{s_i} \cos \phi_i)^2 - y_i + e_{s_i} \sin \phi_i, \quad \forall i = 1 \dots m \quad (26b)$$

worin

$$\mathbf{u}^T = (e_{s_1} \quad e_{s_2} \quad \phi_1 \quad \phi_2 \quad a) \quad (26c)$$

die zu schätzenden Parameter des Optimierungsproblems darstellen. Da in der Zielfunktion (14) ausschließlich die Abstände e_{s_i} der Punkte zu berücksichtigen sind, lautet die korrespondierende Selektionsmatrix

$$\mathbf{W} = \text{diag}(1 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0).$$

Während das Optimierungsproblem (24) direkt mit dem in der geodätischen Literatur beschriebenen Gauß-Helmert-Modell gelöst werden kann, wie Lenzmann und Lenzmann (2004) bereits gezeigt haben, gilt dies nicht für das äquivalente Optimierungsproblem (26). Zum einen berücksichtigt die Zielfunktion (26a) nur die Abstände, aber nicht die Winkelkomponenten der Residuen in Polardarstellung, zum anderen wird in der Geodäsie im Allgemeinen ein Modell vorausgesetzt, dass jeder Beobachtung ein individuelles Residuum zuordnet, siehe hierzu die Beiträge von Koch (2002), Lenzmann und Lenzmann (2004) und Willi et al. (2021). Im Optimierungsproblem (26) sind die kartesischen Beobachtungsresiduen jedoch wiederum nicht-lineare Funktionen von Parametern.

Selbstverständlich lassen sich die in diesem einfachen Beispiel auftretenden Unterschiede leicht in einem modifizierten Gauß-Helmert-Modell berücksichtigen. Andererseits stellt sich die Frage, wie viele Modifikationen ein Allgemeinfall benötigt, um noch als solcher zu gelten. Aus

Sicht der numerischen Optimierung spielen diese Überlegungen kaum eine Rolle, da die Gln. (24) und (26) ein Optimierungsproblem im Sinne von Gl. (1) darstellen und mit einem geeigneten Verfahren wie z. B. der SQP gelöst werden.

Zum Lösen des Optimierungsproblems (26) sind geeignete Startwerte sowohl für die Parameter als auch für die Lagrange-Multiplikatoren vorzugeben. Insbesondere würde eine Nullinitialisierung der Abstände und Lagrange-Multiplikatoren in diesem Beispiel auf ein singuläres Gleichungssystem führen und eine Regularisierung erfordern. Mit den gewählten Startwerten

$$\mathbf{u}_0^T = (-0,7 \quad 0,7 \quad 0 \quad 0 \quad 0,5),$$

$$\mathbf{k}_0^T = (-0,3 \quad 0,3)$$

ergibt sich die Lösung

$$\hat{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} -0,703636511785 \\ 0,655169340153 \\ -0,333363854326 \\ -0,313829000452 \\ 0,456218634812 \end{pmatrix}, \quad (27a)$$

$$\hat{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -0,230246428619 \\ 0,202252660185 \end{pmatrix}, \quad (27b)$$

für das Optimierungsproblem mit Residuen in Polardarstellung. Für das gewählte Abbruchkriterium $\|\mathbf{A}\mathbf{u} \quad \mathbf{A}\mathbf{\lambda}\|_\infty \leq 10^{-12}$ benötigt das Newton-Verfahren fünf Iterationen. Das implementierte BFGS-Verfahren konvergiert ebenfalls schnell und repliziert diese Lösung nach sieben Iterationen. Mittels Gl. (25) ergeben sich die Lotfußpunkte

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = \begin{pmatrix} 3,1648991825 \\ 4,5697535714 \end{pmatrix}, \quad (28a)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_2 = \begin{pmatrix} 3,3768300988 \\ 5,2022526602 \end{pmatrix}. \quad (28b)$$

Die geschätzten Parameter und Lagrange-Multiplikatoren des Optimierungsproblems (24) mit kartesischen Residuen lauten in Übereinstimmung mit den publizierten Ergebnissen aus Lenzmann und Lenzmann (2004) und Lösler (2020)

$$\hat{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} -0,664899182452 \\ 0,623169901170 \\ 0,230246428619 \\ -0,202252660185 \\ 0,456218634812 \end{pmatrix}, \quad (29a)$$

$$\hat{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -0,230246428619 \\ 0,202252660185 \end{pmatrix}, \quad (29b)$$

wobei die Startwerte für e_{x_i} und e_{y_i} mittels Gl. (25) gebildet wurden. Das Newton-Verfahren und das BFGS-Verfahren benötigen sechs bzw. zwölf Iterationen für diese Lösung, sodass in diesem speziellen Beispiel das jeweilige Konvergenzverhalten bei beiden Optimierungsproblemen gleichwertig erscheint. Insbesondere sind die jeweils geschätzten Parameter und Lagrange-Multiplikatoren unabhängig vom verwendeten Lösungsalgorithmus.

Durch das Anbringen der geschätzten kartesischen Residuen aus Gl. (29a) an den originären Koordinatenkomponenten in Tab. 1 ergeben sich erwartungsgemäß die in Gl. (28) angegebenen Lotfußpunkte. Beide Lösungen stellen eine orthogonale Regression dar und minimieren die identische Zielfunktion (26a) – jedoch auf unterschiedlichen Wegen. Das Optimierungsproblem (24) minimiert die Vektorkomponenten e_{x_i} und e_{y_i} der punktbezogenen Residuen und somit implizit die Länge e_{s_i} der jeweiligen Residuenvektoren. Im Optimierungsproblem (26) werden hingegen die Längen der Residuenvektoren e_{s_i} direkt minimiert.

6 Zusammenfassung

Die in der Geodäsie verwendeten Ausgleichungsformen, das Modell der bedingten Ausgleichung, das Gauß-Markov-Modell und das Gauß-Helmert-Modell, stellen einen Spezialfall innerhalb der Klasse von Optimierungsproblemen dar, welcher die Quadratsumme der (gewichteten) Residuen minimiert. Die geodätische Sichtweise orientiert sich vornehmlich an der zu lösenden Problemstellung, d. h. dem funktionalen Zusammenhang. Liegt ein parameterfreies Modell vor, wird das Modell einer bedingten Ausgleichung verwendet. Ist hingegen jede Beobachtung explizit als Funktion der Parameter darstellbar, wird in der Regel auf das Gauß-Markov-Modell zurückgegriffen. Das Gauß-Helmert-Modell findet Anwendung, wenn zwischen den Beobachtungen und den Parametern der funktionale Zusammenhang nur implizit gebildet werden kann. Durch diese Aufteilung entsteht bisweilen der Eindruck, dass es sich um eigenständige und voneinander unabhängige Modelle handelt, wie Linkwitz (1960) anmerkt. Wie in diesem Beitrag gezeigt, lassen sich diese drei Grundformen leicht auf ein gemeinsames Modell zurückführen. Dies dürfte einer der Hauptgründe sein, weshalb eine derartige Klassifizierung in der Literatur zur numerischen Optimierung unüblich ist.

Für das Lösen von Optimierungsproblemen wird im Allgemeinen das Newton-Verfahren oder ein Newtonartiges Lösungsverfahren wie beispielsweise das Gauß-Newton-Verfahren oder ein Quasi-Newton-Verfahren eingesetzt. Die Vorteile des Newton-Verfahrens sind das schnelle Konvergenzverhalten und die hierdurch einhergehende Reduktion der rechenaufwändigen Matrixinversionen sowie der intrinsische Nachweis für ein lokales Minimum (Späth 2007, Lenzmann und Lenzmann 2007).

Diese Vorteile werden jedoch durch das Bereitstellen der Hessematrizen erkaufte. Das Bilden der zweiten partiellen Ableitungen ist mitunter sehr herausfordernd, sodass in der Praxis häufig anstelle des Newton-Verfahrens auf ein Newton-artiges Lösungsverfahren zurückgegriffen wird.

Das Gauß-Newton-Verfahren ist hierbei das Standardverfahren in der Geodäsie (Benning 2011, S. 137 f.). Es lässt sich für die Methode der kleinsten Residuenquadratsumme durch eine spezielle Wahl der Lagrange-Multiplikatoren direkt aus dem Newton-Verfahren gewinnen. Neben dem Gauß-Newton-Verfahren bieten Quasi-Newton-Verfahren wie z. B. das BFGS-Verfahren eine interessante Alternative. Im Gegensatz zum Newton-Verfahren wird lediglich eine approximierten Hessematrix verwendet, wodurch sich der numerische Aufwand reduziert. Alle Lösungsverfahren liefern – Konvergenz vorausgesetzt – die gleichen Parameter, und sind unabhängig von der Grundform. Während das eingesetzte Lösungsverfahren den notwendigen Approximationsalgorithmus zur numerischen Bestimmung der Lösung bereitstellt, charakterisiert die gewählte Grundform vornehmlich den funktionalen Zusammenhang in der Geodäsie. Ein Vergleich zwischen einer Lösung, die beispielsweise aus einem Gauß-Markov-Modell resultiert, mit einer Lösung, die durch ein Newton-artiges Verfahren gewonnen wurde, ist demnach unsinnig.

Die orthogonale Regression ist eine vielfach eingesetzte Optimierungsaufgabe, da sich die auftretenden Residuen geometrisch leicht interpretieren lassen. Am Beispiel einer einfachen Regressionsparabel mit zwei kartesischen Punkten wurden zwei Interpretationen dieses Optimierungsproblems mittels SQP dargestellt und unter Verwendung des Newton-Verfahrens und einem BFGS-Verfahren numerisch gelöst. Die erste Variante verwendet die Residuen in polarer Darstellung. Hierdurch lassen sich die Residuen nicht explizit den einzelnen Beobachtungen zuordnen, sodass das Gauß-Helmert-Modell nicht ohne weitere Modifikation anwendbar ist. Die zweite Variante nutzt hingegen kartesische Residuen, die den einzelnen Koordinatenkomponenten eindeutig zugeordnet werden können. Sie entspricht der üblichen Modellbildung in der Geodäsie und lässt sich, wie von Lenzmann und Lenzmann (2004) anschaulich gezeigt, auch als Gauß-Helmert-Modell formulieren. Da beide Varianten die identische Zielfunktion minimieren, ist auch die Lösung für den Modellparameter identisch. Insbesondere zeigt sich, dass für eine orthogonale Regression weder ein spezifischer Lösungsalgorithmus noch ein speziell aufbereitetes funktionales Modell benötigt wird.

Es ist wünschenswert, wenn bei der Vermittlung der Ausgleichsrechnung in der Geodäsie der Bezug zur numerischen Optimierung deutlicher hervorgehoben wird. Barrieren in interdisziplinären Kooperationen werden hierdurch reduziert, der fachliche Austausch gefördert, aber auch die Zugänglichkeit zu Verfahren oder Algorithmen erleichtert. Dieser Beitrag zeigt einen Weg auf, wie dies unter Wahrung der geodätischen Sichtweise gelingen kann.

Danksagung

Ich bedanke mich ganz herzlich bei David Koch für seine wertvollen Hinweise und Anregungen.

Literatur

- Benning, W. (2011): Statistik in Geodäsie, Geoinformation und Bauwesen. 4. Aufl., Wichmann, Offenbach, ISBN 978-3-87907-512-6.
- Boyd, S., Vandenberghe, L. (2004): Convex Optimization. Cambridge University Press, Cambridge. DOI: 10.1017/CBO9780511804441.
- DIN EN ISO 10360-6 (2009): Geometrische Produktspezifikationen (GPS) – Annahmeprüfung und Bestätigungsprüfung für Koordinatenmessgeräte (KMG) – Teil 6: Fehlerabschätzung beim Berechnen zugeordneter Geometrielemente nach Gauß (ISO 10360-6:2001). Internationale Organisation für Normung, Beuth, Berlin.
- Geiger, C., Kanzow, C. (1999): Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben. Springer, Berlin. DOI: 10.1007/978-3-642-58582-1.
- Geiger, C., Kanzow, C. (2002): Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben. Springer, Berlin. DOI: 10.1007/978-3-642-56004-0.
- Jäger, R., Müller, T., Saler, H., Schwäble, R. (2005): Klassische und robuste Ausgleichsverfahren – Ein Leitfaden für Ausbildung und Praxis von Geodäten und Geoinformatikern. Wichmann, Heidelberg, ISBN 3-87907-370-8.
- Koch, K.-R. (2002): Räumliche Helmert-Transformation variabler Koordinaten im Gauß-Helmert- und im Gauß-Markoff-Modell. zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement, Heft 3/2002, 127. Jg., 147–152.
- Lehmann, R., Lösler, M. (2018): Hypothesis Testing in Non-Linear Models Exemplified by the Planar Coordinate Transformations. Journal of Geodetic Science, 8(1), 98–114. DOI: 10.1515/jogs-2018-0009.
- Lehmann, R., Lösler, M. (2024): Internal Reliability of Planar Coordinate Transformations. Journal of Surveying Engineering, 150(3), 4024006. DOI: 10.1061/JSUED2.SUENG-1498.
- Lenzmann, L., Lenzmann, E. (2004): Strenge Auswertung des nichtlinearen Gauß-Helmert-Modells. avn – Allgemeine Vermessungsnachrichten, 111(2), 68–73.
- Lenzmann, L., Lenzmann, E. (2007): Zur Lösung des nichtlinearen Gauß-Markov-Modells. zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement, Heft 2/2007, 132. Jg., 108–110.
- Linkwitz, K. (1960): Über die Systematik verschiedener Formen der Ausgleichsrechnung. zfv – Zeitschrift für Vermessungswesen, Heft 5/1960, 85. Jg., 156–166, Heft 6/1960, 85. Jg., 191–204, Heft 7/1960, 85. Jg., 243–254.
- Lösler, M. (2020): Zur Parameterschätzung mit unterschiedlichen Koordinatendarstellungen. zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement, Heft 6/2020, 145. Jg., 385–392. DOI: 10.12902/zfv-0319-2020.
- Lösler, M., Eschelbach, C. (2020): Orthogonale Regression – Realität oder Isotropie? tm – Technisches Messen, 87(10), 637–646. DOI: 10.1515/teme-2020-0063.
- Lösler, M., Lehmann, R., Neitzel, F., Eschelbach, C. (2021): Bias in Least Squares Adjustment of Implicit Functional Models. Survey Review, 53(378), 223–234. DOI: 10.1080/00396265.2020.1715680.
- Malissiovas, G., Neitzel, F., Petrovic, S. (2016): Götterdämmerung over Total Least Squares. Journal of Geodetic Science, 6(1), 43–60. DOI: 10.1515/jogs-2016-0003.
- Neitzel, F., Ezhov, N., Petrovic, S. (2019): Total Least Squares Spline Approximation. Mathematics, 7(5), 462. DOI: 10.3390/math7050462.
- Nocedal, J., Wright, S. J. (2006): Numerical Optimization. 2. Aufl., Springer, New York. DOI: 10.1007/978-0-387-40065-5.
- Powell, M. J. D. (1978a): A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations. In: Watson, G. A. (Hrsg.): Numerical Analysis. Lecture Notes in Mathematics, Springer, Berlin, 144–157. DOI: 10.1007/bfb0067703.

- Powell, M.J.D. (1978b): The Convergence of Variable Metric Methods for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations. In: Mangasarian, O.L., Meyer, R.R., Robinson, S.M. (Hrsg.): *Nonlinear Programming 3. Proceedings of the Special Interest Group on Mathematical Programming Symposium Conducted by the Computer Sciences Department at the University of Wisconsin-Madison*, Academic Press Inc., New York, 27–63. DOI: 10.1016/b978-0-12-468660-1.50007-4.
- Reinking, J. (2022): Zur Ausgleichung im Gauß-Markov-Modell beim Übergang zwischen Beobachtungsräumen. *zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement*, Heft 2/2022, 147. Jg., 129–138. DOI: 10.12902/zfv-0377-2021.
- Schek, H.-J., Maier, P. (1976): Nichtlineare Normalgleichungen zur Bestimmung der Unbekannten und deren Kovarianzmatrix. *zfv – Zeitschrift für Vermessungswesen*, Heft 4/1976, 101. Jg., 149–159.
- Shanno, D.F., Phua, K.-H. (1978): Matrix conditioning and nonlinear optimization. *Mathematical Programming*, 14(1), 149–160. DOI: 10.1007/bf01588962.
- Sourlier, D. (1995): Three dimensional feature independent bestfit in coordinate metrology. Swiss Federal Institute of Technology Zürich, ETH Zürich. DOI: 10.3929/ETHZ-A-001516147.
- Späth, H. (2007): Berechnung von HELMERT-Transformationen mit dem NEWTON-Verfahren, *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten*, 114(5), 166–168.
- Wijewickrema, S., Esson, C., Papliński, A. (2010): Orthogonal Distance Least Squares Fitting: A Novel Approach. In: Ranchordas, A. K., Pereira, J. M., Araújo, H. J., Tavares, J. M. R. S. (Hrsg.): *Computer Vision, Imaging and Computer Graphics – Theory and Applications*. Springer, Berlin, 255–268. DOI: 10.1007/978-3-642-11840-1_19.
- Willi, D., Guillaume, S., Geiger, A. (2021): Zur Linearisierung der Gleichungen im Gauß-Helmert-Modell. *avn – Allgemeine Vermessungs-Nachrichten*, 128(6), 291–299.
- Wolf, H. (1978): Das geodätische Gauß-Helmert-Modell und seine Eigenschaften. *zfv – Zeitschrift für Vermessungswesen*, Heft 2/1978, 103. Jg., 41–43.
- Xu, P., Liu, J., Shi, Y. (2023): Almost unbiased weighted least squares location estimation. *Journal of Geodesy*, 97(7), 68:1–28. DOI: 10.1007/s00190-023-01742-0.

Kontakt

Michael Lösler
Frankfurt University of Applied Sciences
Laboratory for Industrial Metrology
Nibelungenplatz 1, 60318 Frankfurt am Main
michael.loesler@fb1.fra-uas.de
<https://orcid.org/0000-0002-1979-263X>

Dieser Beitrag ist auch digital verfügbar unter www.geodaesie.info.