

Oliver Baur

**Die Invariantendarstellung in der Satellitengradiometrie
Theoretische Betrachtungen und numerische Realisierung
anhand der Fallstudie GOCE**

München 2007

Verlag der Bayerischen Akademie der Wissenschaften
in Kommission beim Verlag C. H. Beck

Die Invariantendarstellung in der Satellitengradiometrie
Theoretische Betrachtungen und numerische Realisierung
anhand der Fallstudie GOCE

Von der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie
der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Oliver Baur

aus Tübingen

München 2007

Verlag der Bayerischen Akademie der Wissenschaften
in Kommission beim Verlag C. H. Beck

Adresse der Deutschen Geodätischen Kommission:

Deutsche Geodätische Kommission

Alfons-Goppel-Straße 11 • D – 80 539 München

Telefon +49 – 89 – 23 031 1113 • Telefax +49 – 89 – 23 031 - 1283/ - 1100

e-mail hornik@dgfi.badw.de • <http://dgk.badw.de>

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. N. Sneeuw

Korreferenten: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing.e.h. Dr.techn.E.h. R. Rummel

em.Prof. Dr.-Ing.habil. Dr.techn.h.c.mult. Dr.-Ing.E.h.mult E. W. Grafarend

Tag der Einreichung: 26.07.2006

Tag der mündlichen Prüfung: 20.03.2007

© 2007 Deutsche Geodätische Kommission, München

Alle Rechte vorbehalten. Ohne Genehmigung der Herausgeber ist es auch nicht gestattet,
die Veröffentlichung oder Teile daraus auf photomechanischem Wege (Photokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen

Zusammenfassung

Die Satellitengradiometrie (Satellite Gravity Gradiometry, SGG) ist die derzeit modernste Technik zur Bestimmung und Modellierung hochauflösender Gravitationsfelder. Sie gründet auf der Beobachtung zweiter Ableitungen des Gravitationspotenzials, welche als Gravitationsgradienten (GG) bezeichnet werden und deren Gesamtheit im Gravitationstensor (oder Eötvös-Tensor) zusammen gefasst ist. Letzterer zeichnet sich durch Symmetrie und Spurfreiheit aus. Technisch realisiert wird die Gradiometrie über skalierte Beschleunigungsdifferenzen zwischen frei fallenden Testmassen. Mittels der Kombination aus sechs dreidimensionalen Beschleunigungsmessern lässt sich der volle Gravitationstensor im dreidimensionalen Raum aufstellen.

Herkömmlicherweise erfolgt die Gravitationsfeldbestimmung aus SGG Beobachtungen durch die Analyse einzelner GG. Dabei wird für jeden beobachteten GG der (lineare) funktionale Zusammenhang zu den unbekannten Gravitationsfeldparametern hergestellt. Es ergibt sich folglich für jeden GG eine individuelle Beobachtungsgleichung. Dieser Ansatz wird hier als die klassische Vorgehensweise betrachtet. Sie kommt ohne die Orientierung des Gravitationstensors relativ zum Referenzsystem der Gravitationsfeldmodellierung nicht aus, da die einzelnen GG abhängig von der Lage des Gradiometersystems im Raum sind.

Alternativ dazu befasst sich der erste Teil dieser Arbeit mit der theoretischen Gravitationsfeldanalyse basierend auf den Rotationsinvarianten des Gravitationstensors. Diese Größen verhalten sich invariant gegenüber orthogonalen Transformationen und lassen sich damit unabhängig von der Orientierung des Gravitationstensors formulieren. Andererseits ist die Invariantendarstellung mit einer Reihe von Erschwernissen verbunden. Die nicht-linearen Funktionale des Gravitationspotenzials verlangen eine entsprechende Linearisierung. Daran gekoppelt ist ein iterativer Lösungsprozess. Dabei ist eine effiziente Linearisierungsstrategie maßgeblich von drei Faktoren abhängig: einem möglichst kleinen Linearisierungsfehler, schnellem Konvergenzverhalten und einem geringen numerischen Aufwand. Es stellt sich heraus, dass die Linearisierung in Form einer Störungsrechnung alle drei Kriterien erfüllt. Darüber hinaus gründet die Invariantendarstellung auf der Volltensorgradiometrie. Dies impliziert, dass sämtliche GG mit möglichst gleicher Genauigkeit verfügbar sein müssen. Eine derartige Annahme kann jedoch nicht grundsätzlich vorausgesetzt werden. Um die Volltensorgradiometrie allgemeingültiger zu gewährleisten, wird deshalb die synthetische Berechnung unbeobachteter GG untersucht.

Aktuelles Interesse erfährt die Satellitengradiometrie derzeit vorrangig durch den geplanten Start der Mission GOCE (Gravity field and steady-state Ocean Circulation Explorer) im Frühjahr 2008. Die numerischen Beispiele der Invariantendarstellung basieren auf einer Simulationsrechnung dieses Szenarios. Die Güte der erhaltenen Lösungen wird gegenüber den Ergebnissen unter Anwendung des klassischen Analyseverfahrens von SGG Beobachtungen abgegrenzt. So widmet sich der zweite Teil dieser Arbeit der rechentechnischen Umsetzung der Gravitationsfeldanalyse. Die auftretenden Gleichungssysteme werden nach der Methode der kleinsten Quadrate gelöst. Neben der direkten Lösungsmethode durch Inversion des Normalgleichungssystems nimmt hier das iterative LSQR (Least-Squares unter Verwendung einer QR Zerlegung) Verfahren eine zentrale Rolle ein. Es stellt nur geringe speichertechnische Anforderungen. Des weiteren ist es hinsichtlich der parallelen Implementierung auf Multiprozessor-Plattformen weitaus systemunabhängiger und effizienter als die direkte Lösungsmethode. Das LSQR Verfahren wird für dessen wirtschaftlichen Einsatz in der Gravitationsfeldbestimmung angepasst bzw. erweitert. Zentrale Aspekte sind in diesem Zusammenhang die Regularisierung und Präkonditionierung. Während die Regularisierung Einfluss auf die Güte der Lösung nimmt, zielt die Präkonditionierung auf das beschleunigte Konvergenzverhalten des iterativen Prozesses ab. Weiterhin werden die entsprechenden Konzepte und Ergebnisse der parallelen Implementierung aufgezeigt. Die Umsetzung der Algorithmen erfolgt auf Hochleistungsrechnern des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) und des Center for Computing and Networking Services in Amsterdam (SARA).

Tatsächlich blieben umfassende Simulationsrechnungen der Invariantendarstellung mit Hinblick auf die Satellitengradiometrie bisher aus. Diese Lücke wird mit der vorliegenden Arbeit geschlossen. Die Kombination aus physikalisch-mathematischer Modellbildung und effizienter numerischer Umsetzung demonstriert letztlich die erfolgreiche Handhabung der Invariantendarstellung in der Satellitengradiometrie.

Abstract

At present, satellite gravity gradiometry (SGG) is the state-of-the-art technology for high-resolution gravity field recovery on global scale. The observation principle is based on so-called gravitational gradients (GG), i.e., second-order derivatives of the gravitational potential. The individual GG are assembled in the gravitational tensor (or Eötvös tensor), which is both symmetric and trace-free. From the technical point of view, GG are provided by scaled acceleration differences of free-falling test masses. In this context, the combination of six three-dimensional accelerometers allows to observe the full gravitational tensor in three-dimensional space.

Commonly, SGG analysis relates the single GG to geopotential modeling. More precisely, for each observed GG the (linear) functional relation to the unknown gravitational field parameters is established. This proceeding is referred here to as the classical approach. For its application, the orientation of the gravitational tensor relative to the reference frame of gravity field modeling is of prime importance, as the individual GG depend on the attitude of the gradiometer reference frame in space.

Alternatively to the classical approach, this thesis presents geopotential recovery using the gravitational tensor invariants representation. The pseudo-observations are invariant with respect to orthogonal transformations. Thus, they do not depend on the orientation of the gravitational tensor in space. The first part of the thesis focuses on theoretical considerations related to the invariants approach, in particular with regard to functional model formulation issues. This includes linearization of the non-linear observation equation combined with an iterative proceeding. An efficient linearization technique is characterized by three criteria: small linearization error, fast convergence, and low numerical costs. Linearization by means of a perturbation theory approach turns out to fulfill each of the criteria. Moreover, the invariants approach requires full tensor gradiometry in terms of comparable accuracy of all the single GG. However, the assumption of uniform uncertainty level is not basically granted. Hence, to ensure full tensor gradiometry, synthetic evaluation of unobserved GG is investigated.

The second part of the thesis addresses computation and implementation issues in the framework of satellite-based geopotential recovery. Presently, SGG arouses interest due to the forthcoming GOCE (Gravity field and steady-state Ocean Circulation Explorer) mission, planned to be launched in early 2008. Numerical examples base upon a simulated data set of the GOCE configuration. In terms of a closed-loop simulation, the quality of the results achieved using the invariants representation approach is validated with these ones provided by the classical analysis method.

From the computational point of view, both concepts result in linear (or linearized) overdetermined systems of equations. Solving the systems for the unknown gravity field parameters in a Least-Squares (LS) procedure is a challenging task. Basically, it can be tackled by direct inversion methods or iterative solvers. The direct (or brute-force) approach is based on the assembly of the whole normal equation system, followed by normal matrix inversion. Alternatively, the iterative LSQR (Least-Squares using QR decomposition) procedure is presented in detail. Opposite to the direct approach, memory requirements are well manageable for the iterative solver. Moreover, it performs better in parallel processing and it is independent of the computing architecture. The LSQR method is adapted, extended respectively, for its use in geopotential recovery, in particular with regard to tailored regularization and preconditioning. Whereas regularization affects the quality of the parameter estimate, preconditioning aims to improve the convergence behavior of the iterative process. The implementation of the algorithms is carried out on high performance computers supported by the Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) and the Center for Computing and Networking Services in Amsterdam (SARA).

So far there exist no numerical simulation studies of the (rotational) invariants approach in satellite gradiometry. The dissertation at hand closes that gap. The combination of both tailored mathematical modeling and efficient implementation results in successfully accomplishing the invariants representation in satellite gradiometry.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	1
Abstract	2
1 Einleitung	5
1.1 Entwicklung der Satellitengeodäsie bis zur Volltensorradiometrie	5
1.2 Prinzip der Satellitengradiometrie	6
1.3 Motivation des Invariantenansatzes	6
1.4 Numerische Betrachtungen	8
1.5 Motivation der LSQR Methode	9
1.6 Aufbau der Arbeit	9
1.7 Notation	10
2 Die Beobachtungsgleichung der Volltensorradiometrie	11
2.1 Bewegtes gegenüber raumfestem Referenzsystem	11
2.2 Beobachtungstensor und Gravitationsgradienten	14
3 Invariantentheorie	18
3.1 Tensorarstellung und Tensortransformation	18
3.2 Invariantensysteme eines Tensors 2. Stufe	20
3.3 Eigenwertproblem und Invarianten	22
4 Der klassische Analyseansatz	25
4.1 Parametrisierung des Gravitationspotenzials	25
4.2 Parametrisierung der Gravitationsgradienten	28
5 Analyse der Rotationsinvarianten	31
5.1 Beseitigung der Rotationstensoren	32
5.2 Invarianten in der Gradiometrie	34
5.3 Parametrisierung der Rotationsinvarianten	34
5.4 Linearisierung	37
5.5 Synthese unbeobachteter Gravitationsgradienten	40
6 Die direkte Lösungsmethode	42
6.1 Aufstellung des Normalgleichungssystems	42
6.2 Regularisierung	44
7 Die iterative Lösungsmethode	46
7.1 Das LSQR Verfahren	46
7.2 Regularisierung	52
7.3 Präkonditionierung	54
7.4 Kombination der Regularisierung und Präkonditionierung	58
8 Fallstudie GOCE	59
8.1 Missionsbeschreibung	59
8.2 Genauigkeitsbetrachtungen	61
8.3 Closed-loop Simulation	62
8.4 Analyse der Gravitationsgradienten	65
8.5 Invariantenanalyse — strenge Linearisierung (BFL)	67
8.6 Invariantenanalyse — Linearisierung über die Störungsrechnung	68
8.7 Gradiometrische Vorinformation	70

9 High Performance Computing	72
9.1 Rechnerarchitekturen	73
9.2 Parallelisierung der direkten Lösungsmethode	76
9.3 Parallelisierung der iterativen Lösungsmethode	80
9.4 Abschließende Bemerkungen	82
10 Schlussbemerkungen	83
Liste der Symbole	84
Liste der Abkürzungen	85
A Referenzsysteme und Referenzsystemtransformationen	86
A.1 Definition geodätischer Bezugssysteme	86
A.2 Rotationen zwischen den Bezugssystemen	90
Literaturverzeichnis	94

1. Einleitung

1.1 Entwicklung der Satellitengeodäsie bis zur Volltensorgradiometrie

Mit dem Beginn der Satellitengeodäsie, welcher nur wenige Jahrzehnte zurück reicht, befindet sich die technische Realisierung verschiedener Beobachtungsszenarien auf fortschreitendem Entwicklungskurs. Neben eindimensionalen Messprinzipien wie Satellite Laser Ranging (SLR) oder Doppler-Messungen ist die dreidimensionale kontinuierliche Bahnverfolgung mittels des Global Positioning System (GPS) zum heutigen Standard geworden. Das Ortungs- und Navigationssystem ist die Grundlage für hoch innovative geodätische Satellitenmissionen am Anfang des 21. Jahrhunderts. Speziell im Bereich der globalen satellitengestützten Erdschwerefeldforschung setzt die Bahnbestimmung frei fallender Kleinsatelliten im Kraftfeld der Erde mittels der weit höher fliegenden GPS Satelliten neue Maßstäbe. Aufgrund der Konfiguration ist für dieses Szenario des Begriff high-low Satellite-to-Satellite Tracking (HL-SST) gebräuchlich. Das Verfahren wird inzwischen routinemäßig angewandt. So versteht sich der CHAMP (CHALLENGING Minisatellite Payload) Satellit als frei fallende Testmasse im Schwerefeld der Erde (GFZ 2000). Alleine die Koordinierung seiner Bahn erlaubt die Modellierung des terrestrischen Kraftfeldes im langwelligen spektralen Bereich bis über Grad und Ordnung $L = 70$ hinaus, bezogen auf dessen sphärische harmonische Entwicklung (Reigber et al. 2005a). Die CHAMP Mission unter der Leitung des GeoForschungsZentrums (GFZ) Potsdam befindet sich nunmehr seit über sieben Jahren in operationeller Phase. Neben dem US amerikanischen GPS unterhält Russland sein eigenes globales Satellitennavigationssystem mit dem Namen GLONASS (GLOBAL NAVIGATION Satellite System). Die Kooperation zwischen europäischer Raumfahrtagentur (ESA, European Space Agency), Europäischer Union und auserwählten Industrieunternehmen beschäftigt sich seit wenigen Jahren mit dem Aufbau eines europäischen Pendantes unter der Bezeichnung GALILEO. Das System nimmt voraussichtlich ab 2008 operationellen Status an und soll ab 2012 voll verfügbar sein. Somit stehen für die nahe Zukunft insgesamt drei unabhängige globale Navigationssatellitensysteme zur Verfügung, welche hinsichtlich Genauigkeit, Kontinuität, Integrität und Zuverlässigkeit die Bahnbestimmung künstlicher Satelliten maßgeblich verbessern wird.

Im Jahre 2002 nahm die deutsch-amerikanische Satellitenmission GRACE (Gravity Recovery And Climate Experiment) ihren Dienst auf (JPL 1999). Ergänzend zur Bahnverfolgung mittels GPS wurde für die Doppelsatellitenmission ein zusätzliches Beobachtungsprinzip realisiert. Ein hoch sensibler Mikrowellenlink (K-Band) erfasst die Abstandsänderung der sich in der gleichen Bahn verfolgenden Satelliten. Die Flughöhe der GRACE Satelliten ist mit ca. 450 km ähnlich derjenigen von CHAMP und zielt ebenfalls primär auf die Modellierung des langwelligen Spektralbereichs des Erdschwerefeldes ab. Aufgrund der erreichbaren Genauigkeit innerhalb dieses Frequenzbandes ist es jedoch erstmals möglich, die Zeitvariabilität des Erdschwerefeldes direkt zu beobachten (Tapley et al. 2004). Darüber hinaus kann die GRACE Konfiguration als eindimensionales Gradiometer interpretiert werden mit einer Basislinie entsprechend dem Abstand der beiden Satelliten (Keller & Sharifi 2005).

Mit dem für 2008 geplanten Start des GOCE (Gravity field and steady-state Ocean Circulation Explorer) Satelliten wird zum ersten mal in der Geschichte der Satellitentechnik das Messprinzip der Gradiometrie zur praktischen Anwendung gelangen (ESA 1999). Das Vorhaben, getragen von der ESA, bildet damit das Highlight bezüglich innovativer Messprinzipien. Dabei wurde schon in den achtziger Jahren über eine Gradiometermission unter den Namen ARISTOTELES (Applications and Research Involving Space Techniques to Observe The Earth's field from Low Earth orbiting Satellites) debattiert (Rummel 1991), basierend auf dem französischen GRADIO Instrument (Balmino et al. 1984). Allein die Realisierung des Vorhabens blieb aus. Ein vergleichbares Schicksal widerfuhr der STEP (Satellite Test of the Equivalence Principle) Mission, für welche das Prinzip der eindimensionalen supraleitenden Gradiometrie vorgesehen war (ESA 1993, Sneeuw 1994). Mit der GOCE Mission (Flughöhe ca. 240 km) ist ein Meilenstein im Bereich der hochgenauen statischen Modellierung des Erdschwerefeldes zu erwarten. Tatsächlich sind jegliche bisherige operationelle satellitengeodätische Beobachtungsverfahren dahingehend limitiert, als dass sie die räumliche Auflösung nur im lang- bis mittelwelligen Spektralbereich von ca. 550 km mit einer Genauigkeit von 1 cm erlauben (Reigber et al.

2005b). Dies hält den heutigen Anforderungen einer Vielzahl von Wissenschaftszweigen nicht stand (ESA 1999). Mit GOCE wird die Auflösung der harmonischen Entwicklung des Erdschwerefeldes bis Grad und Ordnung 250–300 angegangen. Ausgedrückt in geometrischen Größen entspricht dies einer Geoidgenauigkeit von 1–2 cm bezüglich einer räumlichen Auflösung von ca. 200 km. Von der Detailmodellierung des Erdschwerefeldes abgesehen, wird aus den Erfahrungen mit GOCE für die Zukunft eine Technologie zur Verfügung stehen, welche entsprechend der Erkundung extraterrestrischer Kraftfelder gewachsen sein sollte.

1.2 Prinzip der Satellitengradiometrie

In dieser Arbeit wird die Satellitengradiometrie (SGG, Satellite Gravity Gradiometry) weitgehend allgemein, das heißt losgelöst von der GOCE Mission, behandelt. Für diese allgemeine Betrachtung wird deshalb stets von einem (beliebigen) Gravitationsfeld die Rede sein, welches speziell für GOCE mit jenem des Erdkörpers zu identifizieren ist. Die Grundzüge der Gradiometrie sind unter anderem in Moritz (1985) und Rummel (1986) beschrieben. Das grundlegende Prinzip besteht in der Bereitstellung von sogenannten Gravitationsgradienten. Von technischer Seite aus lassen sich diese durch die differentielle Messung gravitativer Beschleunigungen ermitteln. Dieses Vorgehen wird als Akzelerometrie bezeichnet. Dabei ist zwischen 1D, 2D und 3D Beschleunigungsmessern zu unterscheiden. Im Rahmen dieser Arbeit wird auf den 3D Fall fokussiert, welcher die Volltensorgradiometrie erlaubt. Im Falle von GOCE besteht das dreiaxige Gradiometer aus sechs Beschleunigungsmessern. Sie sind in der Art angeordnet, dass sich jeweils zwei auf einer Achse des durch sie selbst definierten Gradiometersystems befinden. In idealer Konfiguration sind die Achsen der dreidimensionalen Akzelerometer parallel zu den Achsen des Gradiometersystems gerichtet. Die Beschleunigungsmesser registrieren die Rückstellkräfte, welche erforderlich sind, um eine im jeweiligen Zentrum der Beschleunigungsmesser befindliche Probemasse in einer vorab definierten Nulllage zu halten. Die Differenz zwischen den Messungen (DM, Differential Mode) dividiert durch die Basis zwischen den Zentren ergibt eine Messgröße, welche der zweiten Ableitung des Gravitationspotenzials entspricht. Durch ein Volltensorgradiometer ist es möglich auf diese Art und Weise sämtliche partielle zweite Ableitungen zu registrieren, welche in ihrer Gesamtheit den sogenannten Gravitationstensor bilden. Die Koeffizientenmatrix des Tensors hat symmetrisches Aussehen und ist spurfrei. Damit sind nur fünf der neun Elemente, bezeichnet als Gravitationsgradienten, linear unabhängig. Die zweiten Ableitungen des Gravitationspotenzials sind weit sensitiver als die Gravitationsbeschleunigungen (Ableitungen erster Ordnung) und erlauben somit eine Auflösung des zugrunde liegenden Kraftfeldes bis in den kurzwelligen Spektralbereich.

Colombo (1989) zeichnet ein mögliches Bild für die Anwendung der Satellitengradiometrie zur Erforschung von Himmelskörpern im Weltall. Sein Gedankenexperiment am Beispiel eines Asteroiden startet unter der Annahme einer homogenen Massenverteilung. In dieser idealisierten Vorstellung zeigt der Eigenvektor zugehörig dem größten Eigenwert des voll beobachteten Gravitationstensors in Richtung des Zentrums des Asteroiden. Diese Richtung ist bezüglich des Gradiometersystems direkt evaluierbar und folglich kann das Gradiometer (mit Beschränkung auf die radiale Komponente) entsprechend des Hauptachsensystems orientiert werden. Die Gradiometermessung in radialer Richtung ist mit $V_{33} = 2\frac{GM}{r^3}$ gegeben. Ist die Messplattform zudem mit einem Radar zur Registrierung des radialen Abstands r zwischen dem Gradiometerzentrum und dem Asteroiden ausgerüstet, so ist im sphärischen Fall das Produkt GM aus obigem Zusammenhang bestimmbar und daraus die Masse M berechenbar. Mit der Kenntnis der Masse ist weiterhin das Volumen V_0 ableitbar und damit die mittlere Dichte $\bar{\rho} = MV_0$. Daraus wiederum lassen sich Rückschlüsse auf die Zusammensetzung des Asteroiden ziehen. Entscheidend bei diesem Gedankenexperiment ist, dass diese Betrachtungen von einem Zentralfeld auf ein inhomogenes Gravitationsfeld übertragen werden können.

1.3 Motivation des Invariantenansatzes

Die Volltensorgradiometrie liefert eine tensorielle Beobachtungsgröße, genau genommen einen Tensor 2. Stufe im dreidimensionalen Raum. Ausgenommen einem Tensor 0. Stufe (Skalar) ist die Koeffizientenmatrix eines Tensors abhängig vom beschreibenden Koordinatensystem, nur der Tensor als Ganzes verhält sich invariant gegenüber einer Koordinatentransformation. Der klassische Ansatz zur Analyse von Gradiometerbeobachtungen in der Satellitengeodäsie erfolgt auf der Basis der Tensorelemente selbst. Dabei werden die einzelnen Matrixkoeffizienten als Funktionale der Modellierung des Gravitationsfeldes ausgedrückt. Dieser Zusammenhang ist linear in den unbekanntem Parametern des beschreibenden Modells. Um Beobachtung und Modellierung in Einklang zu bringen, ist es von fundamentaler Bedeutung sowohl die gemessenen Größen als auch die Parametrisierung im identischen Bezugssystem zu beschreiben. Während die Modellierung auf

rein mathematischen Überlegungen gründet und damit deren Bezug zu einem beliebigen Referenzsystem (vornehmlich dem erdfesten Bezugssystem) problemlos hergestellt werden kann, trifft dies für den Gravitationstensor nicht zu. Die Orientierung des Gradiometerreferenzsystems muss als unbekannt angenommen werden. Nur die Ausstattung der Plattform mit zusätzlicher Sensorik, heutzutage namentlich Sternkameras, erlaubt die Orientierung des Gravitationstensors bezüglich eines a priori definierten Referenzsystems (so z.B. dem inertialen Raum), welche für den klassischen Ansatz unabdingbar ist. Um die Problematik erwähnter Orientierung(slosigkeit) zu umgehen, wird hier der klassischen Methode ein alternatives Verfahren entgegen gestellt. Dieses erlaubt die Analyse der Volltensorgradiometrie unabhängig von der Orientierung des Gravitationstensors und damit der Genauigkeit der notwendigen Orientierungsparameter. Das alternative Verfahren gründet auf den Rotationsinvarianten des Gravitationstensors. Man kann darunter eine Manipulation genannter Beobachtungsgrößen des klassischen Ansatzes verstehen. Tatsächlich entsteht durch die Bildung von Produktsummen der einzelnen Tensorelemente ein neuer Beobachtungstyp, welcher sich invariant gegenüber einer Rotation des beschreibenden Bezugssystems verhält und damit gleichsam unabhängig von der Orientierung des Messsystems. Wenn im Folgenden von Invarianten gesprochen wird, so sind darunter ausschließlich diejenigen Größen gemeint, welche sich unter einer orthogonalen Transformation (Rotation) invariant verhalten. Streng genommen sollte deshalb konsequent der Terminus Rotationsinvariante verwendet werden. Tatsächlich sei eine solche mit dem Begriff Invariante implizit angenommen.

Der Invariantenansatz geht mit einer nicht-linearen Abhängigkeit der unbekanntenen Modellparameter als Funktion der Beobachtungen einher. Dies verlangt ein iteratives Lösungsvorgehen im Sinne eines linearisierten funktionalen Modells. Davon abgesehen stellt die Aufstellung des Normalgleichungssystems selbst einen erheblichen numerischen Aufwand dar, welchem mit adäquaten Mitteln entgegen zu treten ist. Gegenüber der rechentechnisch enorm aufwändigen Linearisierung der funktionalen Modelle durch die strenge Evaluierung der mehrfach geschachtelten Summen (brute-force Linearisierung), vereinfacht die Linearisierung in Form einer Störungsrechnung die auftretenden numerischen Schwierigkeiten signifikant. Wie bereits erwähnt, setzen sich die Invarianten aus Produktsummen der Tensorkomponenten zusammen. Dies impliziert, dass die Kenntnis des gesamten Gravitationstensors in dem Sinne voraus gesetzt wird, als dass die einzelnen Komponenten mit möglichst übereinstimmendem Genauigkeitsniveau verfügbar sind. Diese Bedingungen sind direkt mit dem Invariantenansatz verbunden. Deren Nichterfüllung führt zu entsprechenden Erschwernissen, welche die praktische Anwendung dieser Methode zu einer herausfordernden Aufgabe wachsen lassen.

Tabelle 1.1: Pro und Kontra der Invariantendarstellung

Pro	Kontra
<ul style="list-style-type: none"> • Skalarwertige Funktionale des Gravitationsfeldes • Unabhängig von der Orientierung des Gradiometers im Raum • Unabhängig von der Genauigkeit der Orientierung im Raum • Unabhängig von Systemrotationen bzw. Parametrisierung 	<ul style="list-style-type: none"> • Nicht-lineares funktionales Modell; Linearisierung notwendig • Voller Gravitationstensor wird benötigt. Dessen einzelne Komponenten sollten mit möglichst gleichem Genauigkeitsniveau bereit gestellt werden • Der iterative Lösungsprozess ist mit enormen rechenzeittechnischen Kosten verbunden

Tabelle 1.1 fasst die Vor- und Nachteile der Invariantendarstellung zusammen. Für letztere werden adäquate Strategien für eine erfolgreiche Prozessierung aufgezeigt. Die vorliegende Arbeit verfolgt vorrangig das Ziel, den Einsatz der Invariantentheorie in der Satellitengeodäsie zu beleuchten. Dazu bietet sich die GOCE Mission als Fallbeispiel in optimaler Art und Weise an. Der Invariantenansatz wird als eine alternative, unabhängige Vorgehensweise im Vergleich zum klassischen Ansatz behandelt, welche eine hervorragende Möglichkeit zur Validierung bietet. Es soll nicht darüber hinweg getäuscht werden, dass speziell für GOCE die vorgestellte Methode nach den heutigen Erkenntnissen nicht die Effizienteste darstellt, da für die Realisierung der Beobachtungskonfiguration der Invariantenansatz keine Berücksichtigung gefunden hat. Man sollte jedoch in Betracht ziehen, dass die Vorgehensweise Dank ihrer universellen Einsatzmöglichkeit in der Gradiometrie — vor allem in der Volltensorgradiometrie — durchaus auch für dieses Szenario ihre Vorzüge genießt.

1.4 Numerische Betrachtungen

Unabhängig von der Wahl des funktionalen Modells der Satellitengradiometrie, verlangt die Bereitstellung einer Gravitationsfeldlösung die Schätzung einer Vielzahl von Modellierungsparametern. Letztere sind mit den Koeffizienten der harmonischen Entwicklung des Gravitationspotenzials zu identifizieren. Den unbekannt Parametern steht dabei eine weit größere Anzahl an Beobachtungen gegenüber, was folglich zu einem überbestimmten linearen oder linearisierten Gleichungssystem führt. Speziell für die GOCE Mission lässt sich die Dimension des Problems anhand der Abb. 1.1 und 1.2 wie folgt abgrenzen. Der Satellit soll planmäßig über einen Zeitraum von zwei mal sechs Monaten Daten sammeln mit einer Aufzeichnungsrate von 1 Hz. Dies ergibt über 30 Millionen Beobachtungszeitpunkte. Für eine spektrale Auflösung bis Grad und Ordnung $L = 300$, bzw. eine räumliche Auflösung von ca. 140 km, stehen dem insgesamt über 90 000 unbekannte Koeffizienten gegenüber (pro Grad $0 \leq l \leq L$ fallen $2l + 1$ Koeffizienten an, wobei unter der Annahme, dass Massezentrum und Koordinatenursprung identisch sind, die Koeffizienten vom Grad $l = 1$ zu null werden; die Gesamtanzahl der Unbekannten u ergibt sich somit zu $u = L^2 + 2L - 2$).

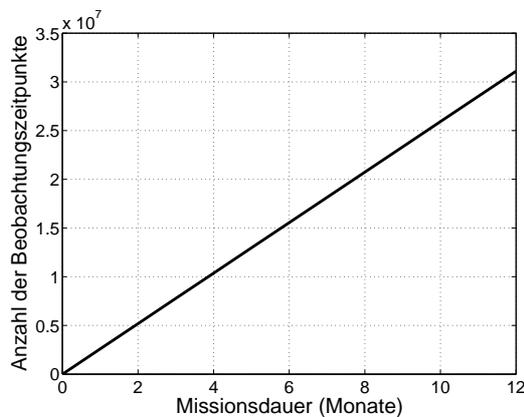


Abbildung 1.1: Anzahl der Beobachtungszeitpunkte in Abhängigkeit der Missionsdauer, $\Delta t = 1$ s

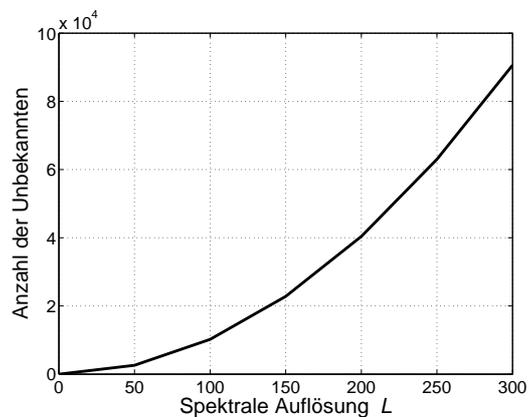


Abbildung 1.2: Anzahl der Unbekannten in Abhängigkeit der spektralen Auflösung L

Die Lösung derartiger Gleichungssysteme im Sinne einer Ausgleichung nach der Methode der kleinsten Quadrate kann auf verschiedene Art und Weise erfolgen. Die gedanklich Einfachste ist dabei die Inversion des entsprechenden Normalgleichungssystems. Dies verlangt eine Speicherverfügbarkeit in dem Maße, dass zumindest ein Dreieck der symmetrischen Normalgleichungsmatrix \mathbf{N} (bzw. deren Inversen) im Speicher gehalten werden kann. Tabelle 1.2 gibt Beispiele für die Anforderung an den Speicher in Abhängigkeit des maximalen Entwicklungsgrades der Auflösung des Gravitationsfeldes (64 Bit System vorausgesetzt; dann berechnet sich der Speicherbedarf in Bit mit $64(0.5u^2 + 0.5u)$).

Die Anzahl der Unbekannten steigt ungefähr quadratisch mit wachsender Auflösung. Die daraus resultierende Speicherverfügbarkeit kann schon für eine Auflösung des Gravitationsfeldes bis zum mittelwelligen Spektralbereich im Allgemeinen nicht gewährleistet werden. Deshalb bedient man sich für derartige Aufgaben meist

Tabelle 1.2: Speicheranforderung für die Normalgleichungsmatrix

Auflösung L	Anzahl der Unbekannten	Speicheranforderung für \mathbf{N} (MByte)
50	2598	27
70	5038	101
100	10 198	416
200	40 398	6528
250	62 998	15 875
300	90 598	32 833

iterativen Gleichungssystemlösern, welche sich der limitierten Speicherverfügbarkeit annehmen. Nichtsdestotrotz sprengt die Kombination aus enormer Datenmenge und hochauflösenden Gravitationsfeldern die Leistungsstärke eines gewöhnlichen Computers (PC, Personal Computer) allein aus rechenzeittechnischer Sicht. Für eine effiziente (wiederholte) Berechnung ist folglich die Implementierung der Analysealgorithmen auf Multiprozessor-Plattformen unumgänglich.

Derartige Plattformen unterscheiden sich prinzipiell durch die Zugriffsart auf die einzelnen Speicherelemente. Während Systeme mit gemeinsamem Speicher den automatischen, gleichberechtigten Zugriff erlauben, erfolgt für Systeme mit verteiltem Speicher der Datenaustausch durch die gesteuerte Kommunikation zwischen den Speicherelementen. Unabhängig von der Systemarchitektur skaliert eine ideale Parallelisierung des Verfahrens den Aufwand entsprechend der Anzahl der verwendeten Prozessoren (CPU, Central Processing Unit). Die gleichzeitige Verwendung optimierter numerischer Bibliotheken auf dem LAPACK/BLAS Standard (Anderson et al. 1999) garantiert eine hoch effiziente Prozessierung. Für den Rahmen dieser Arbeit werden sowohl die rechentechnischen Ressourcen des HöchstleistungsRechenzentrums Stuttgart (HLRS) als auch diejenigen des Center for Computing and Networking Services in Amsterdam (SARA) genutzt.

1.5 Motivation der LSQR Methode

Wie bereits erwähnt, werden die Aufstellung und Inversion des Normalgleichungssystems für die Gravitationsfeldanalyse selbst mit Multiprozessor-Plattformen problematisch. Dies gilt sowohl für Systeme mit gemeinsamem Arbeitsspeicher, da diese die Anforderungen nach Tabelle 1.2 erfüllen müssen, als auch für Systeme mit getrenntem Speicher, da in diesem Falle die aufwändige Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren ins Gewicht fällt. Weit geeigneter für groß dimensionierte Gleichungssysteme gestalten sich daher oftmals iterative Löser, welche Matrix-Matrix bzw. Matrix-Vektor Produkte auf die wiederholte Evaluierung von Vektor-Vektor Produkten reduzieren. Zwar geht diese Vorgehensweise mit einer größeren Anzahl an notwendigen Operationen einher, jedoch gestaltet sich die speichertechnische Anforderung als unproblematisch. Zudem erweist sich bezogen auf Systeme mit getrenntem Speicher der Aufwand für die Kommunikation als unbedeutend, da die Prozessierung der anfallenden Beobachtungen autonom vorgenommen werden kann.

Das Akronym LSQR steht für eine auf QR Zerlegung basierte Methode zur Lösung überbestimmter Gleichungssysteme in Sinne einer kleinsten Quadrate (LS, Least-Squares) Ausgleichung. Entsprechend den in der Geodäsie weit gängigeren Verfahren der konjugierten Gradienten (CG, Conjugate Gradients) handelt es sich um einen iterativen Löser, welcher sich die Eigenschaften des — dem durch das Verfahren selbst induzierten — Krylov-Raums zu Nutze macht. Die LSQR Methode ist für Anwendungen im Bereich der Gravitationsfeldanalyse bisher wenig beleuchtet. Dabei bringt dieses Verfahren vornehmlich zwei Vorteile mit sich. Zum einen ist es den CG Methoden gegenüber an Stabilität und Zuverlässigkeit überlegen, vgl. Paige & Saunders (1982a), Björck (1996) und Jacobsen et al. (2003). Zum anderen erlaubt die regularisierte Version des Algorithmus eine simultane Verarbeitung einer Vielzahl von Regularisierungsparametern mit nur marginalem numerischen Mehraufwand. Während die Bedeutung des erst genannten Aspekts keiner weiteren Erklärung bedarf, kommt letzterem vor allem hinsichtlich einer sich wiederholenden Datenprozessierung eine nicht unwesentliche Bedeutung zu (die satellitengestützte Gravitationsfeldbestimmung als schlecht konditioniertes inverses Problem verlangt entsprechende Regularisierungstechniken). Auf die Präkonditionierung des Systems wird besonderes Augenmerk gelegt. Durch sie ist es möglich die Konvergenzgeschwindigkeit des iterativen Prozesses signifikant zu beschleunigen.

Der LSQR Algorithmus wird im Rahmen dieser Arbeit auf ein Niveau gebracht, welches ihn für den Einsatz in der Gravitationsfeldanalyse qualifiziert und der direkten Lösungsmethode an Effizienz überlegen macht. Für den Vergleich der beiden Methoden werden vornehmlich rechentechnische Aspekte mit dem Hintergrund der Parallelisierung der Verfahren beleuchtet.

1.6 Aufbau der Arbeit

Das folgende Kapitel befasst sich mit der Herleitung der Beobachtungsgleichung der Volltensorgradiometrie anhand der Bewegung des Gradiometerreferenzsystems im inertialen Raum. Mit diesem Hintergrund widmet sich Kapitel 3 der Invariantentheorie. Ausgehend von der allgemeinen Herleitung und Darstellung einer Invarianten erfolgt schließlich speziell die Betrachtung der Rotationsinvarianten des Gravitationstensors als symmetrischer Tensor 2. Stufe im dreidimensionalen Euklidischen Raum.

Die Parametrisierung des Gravitationspotenzials in sphärische Harmonische wird in Kapitel 4 angegangen, ebenso wie die Formulierung funktionaler Modelle der Gradiometrie basierend auf den Elementen des Gravitationstensors. Die Invariantenanalyse als der dazu alternative Ansatz wird in Kapitel 5 präsentiert.

Kapitel 6 stellt die Lösung der funktionalen Modelle mittels der Inversion des resultierenden Normalgleichungssystems vor. Die Regularisierung des Systems wird behandelt. Der iterativen LSQR Methode widmet sich Kapitel 7. Neben Regularisierung nimmt hier die Präkonditionierung des (linearisierten) Gleichungssystems eine zentrale Rolle ein.

In Kapitel 8 erfolgt die Anwendung der vorgestellten Konzepte auf die Satellitenmission GOCE. Im Mittelpunkt steht dabei die effiziente numerische Realisierung der Invariantenanalyse, wobei die Validierung der Ergebnisse bezüglich der klassischen Analyseverfahren vorgenommen wird. Schließlich befasst sich Kapitel 9 mit Aspekten des High Performance Computing (HPC). Die Parallelisierung der Analysealgorithmen anhand der Standards MPI (Message Passing Interface) und OpenMP wird erläutert sowie die Effizienz der Implementierung auf unterschiedlichen Systemarchitekturen untersucht.

Resümierend fasst Kapitel 10 die Ergebnisse der theoretischen und praktischen Abhandlungen dieser Arbeit zusammen, um gleichsam ein Fazit über die methodischen Untersuchungen zu ziehen.

1.7 Notation

Summenkonvention. Durchweg gilt im Rahmen dieser Arbeit die Einsteinsche Summenkonvention, nach welcher ohne Angabe des Summenzeichens über gleichlautende Indizes summiert wird. Soweit nicht anders angegeben, nehmen sämtliche Indizes die Werte $\{1, 2, 3\}$ an.

Tensoren. Tensoren werden in Standardschrift kursiv dargestellt. Die Anzahl der Unterstriche verdeutlicht die Stufe des Tensors. Tensoren 0. Stufe (Skalare) treten in Klein- und Großschreibung auf. Hingegen werden Tensoren 1. Stufe (Vektoren) stets in Kleinbuchstaben geschrieben, für Tensoren 2. Stufe werden Großbuchstaben verwendet. Beispiele:

$$\begin{aligned} a, A & - \text{Tensor 0. Stufe (Skalar)} \\ \underline{a} & - \text{Tensor 1. Stufe (Vektor)} \\ \underline{\underline{A}} & - \text{Tensor 2. Stufe} \end{aligned}$$

Die Koeffizientenmatrizen von Tensoren sind abgesehen von Skalaren in Fettbuchstaben wieder gegeben. Analog zum Vorherigen gilt die Groß- und Kleinschreibung. Beispiele:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} & - \text{Koeffizientenmatrix eines Tensors 1. Stufe} \\ \mathbf{A} & - \text{Koeffizientenmatrix eines Tensors 2. Stufe} \end{aligned}$$

Die einzelnen Matrixelemente sind durch eine Anzahl von Indizes entsprechend der Stufe des Tensors verdeutlicht. Wieder gilt die Groß- und Kleinschreibung. Beispiele:

$$\begin{aligned} a_i & - \text{Koeffizientenmatrixelemente eines Tensors 1. Stufe} \\ A_{ij} & - \text{Koeffizientenmatrixelemente eines Tensors 2. Stufe} \end{aligned}$$

Referenzsysteme. Bei den betrachteten Referenzsystemen handelt es sich durchweg um orthonormale Rechtssysteme. Ein beliebiges Referenzsystem wird allgemein mit \mathbf{e} , ein Basisvektor mit \mathbf{e}_i bezeichnet. Die genauere Klassifizierung erfolgt durch einen hoch gestellten Index. Die Angabe eines Referenzsystems samt Basisvektoren und Ursprung ist gegeben mit $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \mid 0\}$. Im Rahmen dieser Arbeit sind genau zwei Ursprünge von Bedeutung. Das Massezentrum 0^\bullet des gravitativen Körpers (im Speziellen das Geozentrum) und der sich im Raum bewegend Kurvenpunkt 0^* (im Speziellen das Massezentrum des Satelliten). Beispiele:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^I & - \text{Raumfestes Referenzsystem} \\ \mathbf{e}_1^I & - \text{Erster Basisvektor des raumfesten Referenzsystems} \\ \{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_2^I, \mathbf{e}_3^I \mid 0^\bullet\} & - \text{Raumfestes Referenzsystem} \\ & \text{samt Angabe der Basisvektoren und des Ursprungs} \end{aligned}$$

2. Die Beobachtungsgleichung der Volltensorgradiometrie

Die Messungen des Gradiometers erfolgen in logischer Konsequenz bezüglich des Gradiometerreferenzsystems. Nur für eine inertial stabilisierte Plattform ist die Richtung dessen Achsen im Raum konstant, das heißt unterliegt keinen zeitlichen Änderungen. Für ein massegerichtetes Gradiometer hingegen wird die Messrichtung dem bahnbegleitenden System des Satelliten nachgeführt, womit im idealen Fall das Gradiometersystem mit dem nominellen Bahnsystem $\{\mathbf{e}_1^L, \mathbf{e}_2^L, \mathbf{e}_3^L \mid 0^*\}$ zusammen fällt. Als Folge der zeitlichen Änderung des Messsystems bezüglich des raumfesten Systems $\{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_1^I \mid 0^\bullet\}$ registrieren die Akzelerometer die Summe aus gravitativer Massenanziehung relativ zum Beobachtungssystem und den auftretenden Rotationseinflüssen (bei dieser Betrachtungsweise sei von nicht-gravitativen Störeinflüssen abgesehen).

Aus der Gegenüberstellung des bewegten zum raumfesten Bezugssystem in Kapitel 2.1 können die Rotationsinflüsse detektiert werden. In Kapitel 2.2 erfolgt die genauere Betrachtung der resultierenden Beobachtungsgleichung. Für die Definition von Referenzsystemen und derer gegenseitiger rotatorischer Beziehungen sei auf Anhang A verwiesen.

2.1 Bewegtes gegenüber raumfestem Referenzsystem

Bezeichne \underline{p} einen beliebigen Positionsvektor (Tensor 1. Stufe) im \mathbb{R}^3 , so kann dieser bezüglich des raumfesten Referenzsystems mit Ursprung 0^\bullet dargestellt werden mit $\underline{p}_{0^\bullet} = \mathbf{e}_i^I x_i$. Entsprechend bezeichne $\underline{p}_{0^\bullet}^{\text{CoM}} = \mathbf{e}_i^I x_i^{\text{CoM}}$ den Ursprung des Gradiometersystems, welcher mit dem Massezentrum (CoM, Center of Mass) des Satelliten zusammen fallen möge. Bezüglich des nominellen Bahnsystems mit Ursprung 0^* lautet die Koordinatendarstellung des Positionsvektors $\underline{p}_{0^*} = \mathbf{e}_i^L x_i$. Die beiden Bezugssysteme unterscheiden sich um die Translation $\underline{p}_{0^\bullet}^{\text{CoM}}$, so dass gilt

$$\underline{p}_{0^\bullet} = \underline{p}_{0^\bullet}^{\text{CoM}} + \underline{p}_{0^*} \quad (2.1)$$

oder in Koordinatendarstellung

$$\mathbf{e}_i^I x_i = \mathbf{e}_i^I x_i^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L x_i. \quad (2.2)$$

Im Folgenden wird $\underline{p}_{0^\bullet}$ bzw. \underline{p}_{0^*} mit der Position der jeweiligen Probemasse des Gradiometers identifiziert. Gleichung (2.2) zeigt den Zusammenhang des Ortes der Probemasse bezüglich des raumfesten und bewegten Bezugssystems. Durch zeitliche Differentiation erster bzw. zweiter Ordnung lässt sich daraus die entsprechende Beziehung auf das Geschwindigkeits- und Beschleunigungsniveau transformieren. In (2.3) und (2.4) wurde dies durchgeführt, worin $\frac{d}{dt}\alpha = \dot{\alpha}$ und $\frac{d}{dt}\dot{\alpha} = \ddot{\alpha}$ zu verstehen ist:

$$\mathbf{e}_i^I \dot{x}_i = \mathbf{e}_i^I \dot{x}_i^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L (\dot{x}_i + \Omega_{ij} x_j), \quad (2.3)$$

$$\mathbf{e}_i^I \ddot{x}_i = \mathbf{e}_i^I \ddot{x}_i^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L \left(\ddot{x}_i + 2\Omega_{ij} \dot{x}_j + \dot{\Omega}_{ij} x_j + \Omega_{ik} \Omega_{kj} x_j \right). \quad (2.4)$$

Dabei ist zu beachten, dass sich das raumfeste System gemäß seiner Definition zeitlich unveränderlich gibt, so dass $\frac{d}{dt}\mathbf{e}_i^I = 0$. Freilich trifft dies für das sich im Raum bewegende System nicht zu, sondern vielmehr

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{e}_i^L x_i) = \frac{d}{dt}\mathbf{e}_i^L x_i + \mathbf{e}_i^L \frac{d}{dt}x_i = \dot{\mathbf{e}}_i^L x_i + \mathbf{e}_i^L \dot{x}_i. \quad (2.5)$$

Da sich (2.5) allein auf das bewegte System bezieht, ist die Translation zwischen $\{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_2^I, \mathbf{e}_3^I \mid 0^\bullet\}$ und $\{\mathbf{e}_1^L, \mathbf{e}_2^L, \mathbf{e}_3^L \mid 0^*\}$ irrelevant. Die unterschiedliche Achsenrichtung der orthonormalen Dreibeine wird durch die Rotationsmatrix $\mathbf{R}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I} = [R_{ij}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I}]$ beschrieben, vgl. (A.31). Folglich gilt $\mathbf{e}_i^L = \mathbf{e}_j^I R_{ij}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I}$ bzw. $\mathbf{e}_i^I = \mathbf{e}_j^L R_{ji}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L}$, woraus sich $\dot{\mathbf{e}}_i^L x_i = \mathbf{e}_j^I \dot{R}_{ij}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I} x_i = \mathbf{e}_i^L R_{ik}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I} \dot{R}_{jk}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L} x_j = \mathbf{e}_i^L \Omega_{ij} x_j$ und schließlich (2.3) ergibt mit der Cartanmatrix $\Omega_{ij} = R_{ik}^{\mathbf{e}^L \mathbf{e}^I} \dot{R}_{jk}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L}$.

Auf entsprechende Art und Weise wird mit (2.4) der analoge Zusammenhang auf dem Niveau der Beschleunigungen erhalten, welcher Aufschluss gibt über die auf die Akzelerometer wirkenden Kräfte. Durch die Rotation des Gradiometers im inertialen Raum setzt sich die Sensorregistrierung bezüglich des bewegten Referenzsystems aus der Summe von vier Effekten zusammen. Dieses sind ein translativer Anteil

- $\mathbf{e}_i^L \ddot{x}_i$ relative Beschleunigung

und drei Rotationsanteile:

- $\mathbf{e}_i^L 2\Omega_{ij} \dot{x}_j$ Coriolisbeschleunigung,
- $\mathbf{e}_i^L \dot{\Omega}_{ij} x_j$ Eulerbeschleunigung,
- $\mathbf{e}_i^L \Omega_{ik} \Omega_{kj} x_j$ Zentrifugalbeschleunigung.

Mit der Kompensation nicht-gravitativer Störeinflüsse (drag-free Prinzip) befindet sich der Satellit im freien Fall, das heißt es wirken bezüglich des inertialen Raumes ausschließlich gravitative Kräfte auf die Beschleunigungsmesser. Im CoM des Satelliten ist damit

$$\mathbf{e}_i^L \ddot{x}_i^{\text{CoM}} = (\nabla V)_{\text{CoM}} = \underline{v}^{\text{CoM}} = \mathbf{e}_i^L v_i^{\text{CoM}} \quad (2.6)$$

mit V dem Gravitationspotenzial und v_i^{CoM} den Komponenten des Gravitationsvektors im CoM des Satelliten bezüglich des raumfesten Systems. Die gravitative Wirkung auf die jeweiligen Probmassen der Akzelerometer unterscheidet sich entsprechend der relativen Positionen zueinander. Durch die vorab definierte Nulllage der Probmassen setzt sich die Messregistrierung zusammen aus der gravitativen Wirkung am Ort der Probmasse und der spezifischen Kraft, welche dazu erforderlich ist die Probmasse in der Nulllage zu halten

$$\mathbf{e}_i^L \ddot{x}_i = \mathbf{e}_i^L v_i + \mathbf{e}_i^L s_i. \quad (2.7)$$

Weiter impliziert die Annahme des freien Falls, dass auch im Gradiometersystem keine nicht-gravitativen Geschwindigkeiten und Beschleunigungen auftreten, womit

$$\mathbf{e}_i^L \dot{x}_i = \mathbf{e}_i^L \ddot{x}_i = 0 \quad (2.8)$$

wird und somit sowohl die relative Beschleunigung als auch der Coriolisterm in (2.4) verschwinden. Gleichungen (2.6), (2.7) und (2.8) in (2.4) eingesetzt führt auf

$$\mathbf{e}_i^L v_i + \mathbf{e}_i^L s_i = \mathbf{e}_i^L v_i^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L \left(\dot{\Omega}_{ij} x_j + \Omega_{ik} \Omega_{kj} x_j \right) \quad (2.9)$$

für die Gegenüberstellung des bewegten zum raumfesten Bezugssystem. Sowohl die gravitative Anziehung $\mathbf{e}_i^L v_i$ als auch die spezifische Beschleunigung $\mathbf{e}_i^L s_i$ werden vom Gradiometerinstrument registriert und damit bezüglich des bewegten Dreiebens erfasst. Die orthogonale Transformation von (2.7) in das Gradiometersystem mittels der Rotation $\mathbf{R}^{\mathbf{e}^L}$ führt letztlich über

$$\nabla V = \mathbf{e}_i^L v_i = \mathbf{e}_i^L R_{ij}^{\mathbf{e}^L} v_j = \mathbf{e}_i^L v_i \quad (2.10)$$

$$\mathbf{e}_i^L s_i = \mathbf{e}_i^L R_{ij}^{\mathbf{e}^L} s_j = \mathbf{e}_i^L s_i \quad (2.11)$$

auf

$$\mathbf{e}_i^L v_i + \mathbf{e}_i^L s_i = \mathbf{e}_i^L v_i^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L \left(\dot{\Omega}_{ij} x_j + \Omega_{ik} \Omega_{kj} x_j \right). \quad (2.12)$$

Die Reduzierung der absoluten gravitativen Beschleunigung $\mathbf{e}_i^L v_i$ am Ort der Probmasse um die gravitative Beschleunigung im Massezentrum gibt Aufschluss über die ortsabhängigen Differenzkräfte, welche letztlich die Natur des zugrunde liegenden gravitativen Feldes wider spiegeln. Tatsächlich vermögen die Beschleunigungsmesser allein auf diese Differenzkräfte zu reagieren, jedoch nicht auf die absolute Anziehung, da sich der Satellit als Ganzes im freien Fall befindet. Ein analytischer Ausdruck für die Differenz $\mathbf{e}_i^L v_i - \mathbf{e}_i^L v_i^{\text{CoM}}$ gründet auf der Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} \nabla V = \mathbf{e}_i^L v_i = \mathbf{e}_i^L v_i = \mathbf{e}_i^L \frac{\partial}{\partial x_i} V &= \mathbf{e}_i^L \frac{\partial}{\partial x_i} V \Big|_{\text{CoM}} \\ &+ \mathbf{e}_i^L \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} V \Big|_{\text{CoM}} (x_j - x_j^{\text{CoM}}) \\ &+ \mathbf{e}_i^L \frac{1}{2} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} V \Big|_{\text{CoM}} (x_j - x_j^{\text{CoM}})(x_k - x_k^{\text{CoM}}) \\ &+ \mathcal{O}^3(x_j, x_k, x_l) \end{aligned} \quad (2.13)$$

mit dem Entwicklungspunkt $\mathbf{e}_i^L x_i^{\text{CoM}} = 0$, da wie bereits erwähnt der Ursprung des Gradiometers mit dem CoM des Satelliten identisch angenommen wird. Die lineare Approximation von (2.13) ist genau dann ausreichend, wenn die vernachlässigten Terme der höheren Ordnungen die Messgenauigkeit der Beschleunigungsmesser nicht übersteigt. Diese Bedingung ist stark mit der Größenordnung der Koordinaten x_i verbunden, nämlich dem Abstand der Probmassen vom Koordinatenursprung 0^* .

In linearer Approximation wird für die Differenz der Probmassebeschleunigung relativ zur Beschleunigung des CoM

$$\mathbf{e}_i^L v_i - \mathbf{e}_i^L v_i^{\text{CoM}} = \mathbf{e}_i^L V_{ij}^{\text{CoM}} x_j. \quad (2.14)$$

Auf der rechten Seite von (2.14) finden sich die Ableitungen zweiter Ordnung des Gravitationspotenzials $\nabla(\nabla V) = \nabla \underline{v} = \underline{\underline{V}} = \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L V_{ij} = \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L V_{ij}$. Gleichung (2.14) in (2.12) berücksichtigt führt auf

$$\mathbf{e}_i^L V_{ij}^{\text{CoM}} x_j + \mathbf{e}_i^L s_i = \mathbf{e}_i^L \left(\dot{\Omega}_{ij} + \Omega_{ik} \Omega_{kj} \right) x_j \quad (2.15)$$

oder

$$\mathbf{e}_i^L s_i = \left(-\mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L V_{ij}^{\text{CoM}} + \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L \dot{\Omega}_{ij} + \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L \Omega_{ik} \Omega_{kj} \right) \mathbf{e}_l^L x_l. \quad (2.16)$$

Ein Volltensord gradiometer vom Typ GOCE besteht gemäß Abb. 2.1 aus sechs dreidimensionalen Beschleunigungsmessern, jeweils zwei davon sind auf einer Achse des dreidimensionalen Gradiometers angeordnet. Ein jeder Akzelerometer registriert die Summe aus der relativen gravitativen Beschleunigung der Probmasse — relativ zum CoM des Satelliten — und der Rückstellkraft, die erforderlich ist, die Probmasse in der Nulllage zu halten. Würden keine Rotationseinflüsse auftreten, so wären diese beiden Kräfte entgegengesetzt gleich groß. Die Rotation des Satelliten verursacht jedoch, dass sich die spezifische Kraft aus der Gravitation und den Rotationseffekten zusammensetzt. Jeder Beschleunigungsmesser misst die drei Komponenten der spezifischen Beschleunigung im jeweiligen Ort der Probmasse. Mit dem konstanten Abstand $\|\mathbf{e}_l^L x_l\| = \text{const} = \frac{d}{2}$ zwischen dem Ursprung des Gradiometers und dem Ursprung eines beliebigen Beschleunigungsmessers, bzw. dem Abstand d zweier Beschleunigungsmesserzentren, liefern die differentiellen Messungen folgende Kombinationen bezüglich des CoM (vgl. Abb. 2.1):

- Die differentiellen Messungen zweier Beschleunigungsmesser (p_1 und p_2) auf der selben Achse i (bezeichnet mit $p_{1,i}$ und $p_{2,i}$) in die Richtung der Achse i ergeben drei mögliche Kombinationen. Diese dividiert durch den Abstand d zwischen den beiden Probmassen werden bezeichnet als die Hauptdiagonalelemente des Gravitationstensors

$$\Gamma_{ii} = \frac{s_i(p_{2,i}) - s_i(p_{1,i})}{d}. \quad (2.17)$$

- Die differentiellen Messungen zweier Beschleunigungsmesser (p_1 und p_2) auf der selben Achse i (bezeichnet mit $p_{1,i}$ und $p_{2,i}$) in die Richtung der Achse j ergeben sechs mögliche Kombinationen. Diese dividiert durch den Abstand d zwischen den beiden Probmassen werden bezeichnet als die Nebendiagonalelemente des Gravitationstensors

$$\Gamma_{ij} = \frac{s_j(p_{2,i}) - s_j(p_{1,i})}{d}; \quad i \neq j. \quad (2.18)$$

Damit lautet die fundamentale Beobachtungsgleichung der Gradiometrie

$$\mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L \Gamma_{ij} = -\mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L V_{ij} + \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L \dot{\Omega}_{ij} + \mathbf{e}_i^L \otimes \mathbf{e}_j^L \Omega_{ik} \Omega_{kj} \quad (2.19)$$

oder in Tensorschreibweise

$$\underline{\underline{\Gamma}} = -\underline{\underline{V}} + \underline{\underline{\dot{\Omega}}} + \underline{\underline{\Omega}}^2. \quad (2.20)$$

Der Beobachtungstensor setzt sich aus dem Gravitationstensor, dem Eulertensor und dem Zentrifugaltensor zusammen. Letztlich ist für die Gravitationsfeldanalyse der Gravitationstensor von den Rotationsanteilen zu trennen. Dieser Aspekt wird in Kapitel 5.1 näher behandelt.

Der symmetrische Anteil von (2.25) setzt sich hingegen aus zwei Teilen zusammen, dem Gravitationstensor und dem Zentrifugaltensor:

$$\frac{1}{2}(\underline{\Gamma} + \underline{\Gamma}^T) = -\underline{V} + \underline{\Omega}^2. \quad (2.27)$$

Damit ergibt sich letztlich der Gravitationstensor zu

$$\underline{V} = -\frac{1}{2}(\underline{\Gamma} + \underline{\Gamma}^T) + \underline{\Omega}^2. \quad (2.28)$$

Differentialgeometrische Betrachtungen. Im Folgenden wird auf den Cartantensor $\underline{\Omega}$ näher eingegangen (vgl. dazu Baur & Grafarend 2005). Seine Koeffizientenmatrix (2.22) vereinigt gemäß $\Omega_{ij}x_j = -\omega_i \times x_i$ die Komponenten des Rotationsvektors $\boldsymbol{\omega} = [\omega_1, \omega_2, \omega_3]^T = [\Omega_{23}, \Omega_{31}, \Omega_{12}]^T$. Diese stehen in direkter Relation zu den Krümmungsmaßen κ_j der Trajektorie, auf welcher sich der Satellit im Raum bewegt, und tragen somit die volle geometrische Information über das entsprechende Rotationsverhalten. Diese Beziehung lautet

$$\kappa_j = \frac{\Omega_{j,j+1}}{\sigma^1} \quad (2.29)$$

mit dem Betrag der inertialen Geschwindigkeit $\sigma^1 = \|\mathbf{e}_i^1 \dot{x}_i\|$. Der einfache Zusammenhang (2.29) setzt die Geometrie der Trajektorie mit der Kinematik des bewegten Dreibeins in Verbindung. Die Anzahl linear unabhängiger Krümmungsmaße ist durch die Anzahl der Raumdimensionen n mit $(n-1)$ eindeutig festgelegt. Das entsprechende bahnbegleitende Referenzsystem bezüglich dessen diese Minimalanzahl Gültigkeit besitzt wird in der Differentialgeometrie als Frenet Dreibein bezeichnet (Do Carmo 1983, Kreyszig 1991). Für dessen Definition sei auf (A.8) verwiesen. Im \mathbb{R}^3 führt dies auf zwei unabhängige Krümmungsmaße ($\Omega_{13} = 0$):

- Krümmung $\kappa = \kappa_1 = \frac{\Omega_{12}}{\sigma^1} = \frac{\|\dot{\mathbf{x}} \times \ddot{\mathbf{x}}\|}{\|\dot{\mathbf{x}}\|^3}$

Sie ist ein Maß dafür, wie stark die Satellitenbahn vom Tangentenvektor zum Zeitpunkt der Betrachtung abweicht.

- Torsion $\tau = \kappa_2 = \frac{\Omega_{23}}{\sigma^1} = \frac{\langle \dot{\mathbf{x}}, \ddot{\mathbf{x}} \times \ddot{\mathbf{x}} \rangle}{\|\dot{\mathbf{x}} \times \ddot{\mathbf{x}}\|^2}$

Sie ist ein Maß dafür, wie stark die Satellitenbahn von der Schmiegeebene (die Ebene aufgespannt durch den Tangenten- und Normalenvektor) zum Zeitpunkt der Betrachtung abweicht.

Hingegen ist die Geometrie einer Kurve im \mathbb{R}^3 abweichend vom Frenet Dreibein als bahnbegleitendes Bezugssystem durch drei Krümmungsmaße bestimmt ($\Omega_{13} \neq 0$). Es sind dies die

- geodätische Krümmung $\kappa_g = \frac{\Omega_{12}}{\sigma^1}$,

- Normalkrümmung $\kappa_n = \frac{\Omega_{13}}{\sigma^1}$ und

- geodätische Torsion $\tau_g = \frac{\Omega_{23}}{\sigma^1}$.

Die Krümmungsmaße κ und τ lassen sich, wie dargestellt, aus der inertialen Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung analytisch berechnen. Der Satz von Meusnier (1785) schließlich setzt diese mit den Krümmungsmaßen eines beliebigen alternativen bahnbegleitenden Systems in Verbindung gemäß

$$\kappa_g = \kappa \cos \xi_1, \quad (2.30a)$$

$$\kappa_n = \kappa \sin \xi_1, \quad (2.30b)$$

$$\kappa_g^2 + \kappa_n^2 = \kappa^2, \quad (2.30c)$$

$$\tau_g = \tau - \frac{\dot{\xi}_1}{\sigma^1}. \quad (2.30d)$$

Darin bezeichnet ξ_1 den Drehwinkel zwischen den beiden bahnbegleitenden Systemen um die gemeinsame erste Achse, nämlich die Richtung des Geschwindigkeitsvektors (Tangentialvektor). Die Krümmung κ wird aufgespalten in zwei Anteile: Die geodätische Krümmung und die Normalkrümmung. Abhängig von ξ_1 ergeben sich unter anderem folgende Szenarien:

- für $\xi_1 \approx 0$ ist $\kappa_g \approx \kappa$ und $\kappa_n \ll \kappa$
- für $\xi_1 = \frac{\pi}{2}$ ist $\kappa_g = 0$ und $\kappa_n = \kappa$

- für $\xi_1 \approx \frac{\pi}{2}$ ist $\kappa_g \ll \kappa$ und $\kappa_n \approx \kappa$

Der Drehwinkel zwischen dem Frenet Dreibein und LORF (Local Orbit Reference Frame) beträgt $\xi_1 \approx \frac{\pi}{2}$, vgl. Abb. 2.2 bzw. (A.10). Das heißt der letzt genannte Fall tritt ein. Weiter ist $\xi_1 \neq \text{const.}$ Tatsächlich spiegelt die Winkeländerung $\dot{\xi}_1$ die Asymmetrie des Gravitationsfeldes wider. Nur für ein symmetrisches Kraftfeld ist $\dot{\xi}_1 = 0$.

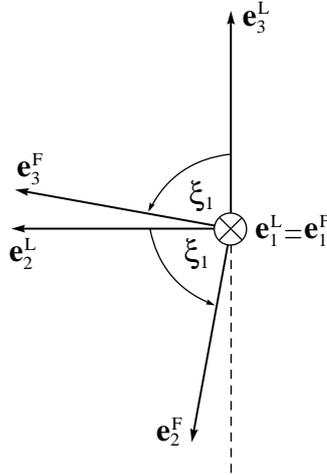


Abbildung 2.2: Relative Lage zwischen Frenet Dreibein und LORF

Am Beispiel einer simulierten GOCE Bahn (vgl. Kapitel 8.3) sind in den Abb. 2.3 bis 2.6 die zeitlichen Verläufe der angesprochenen Krümmungsmaße bezüglich des Frenet Dreibeins und des LORF dargestellt. Der Zeitraum der Darstellungen beträgt 5 volle Umläufe (7,46 h). In Abb. 2.3 zeigt die Krümmung κ einen sehr glatten Verlauf mit einer Periode von $\frac{T}{2}$ (mit T der Umlaufzeit des Satelliten). Darin spiegelt sich die Symmetrie der Satellitentrajektorie bezüglich der Halbachsen der näherungsweise elliptischen Bahn. Demgegenüber überlagern sich in Abb. 2.4 mehrere Frequenzen, wobei jedoch die Umlauffrequenz $f = \frac{1}{T}$ dominierend ist. Die Hauptfrequenz des Spektrums kommt damit zustande, dass die Torsion τ keine Symmetrien relativ zur Schmiegeebene während eines Umlaufs aufweist. Der unruhige Verlauf resultiert aus der (ungleichmäßigen) Änderung des Drehwinkels ξ_1 , welcher den Irregularitäten des herrschenden Gravitationsfeldes untersteht. Dazu im Vergleich zeigt die geodätische Torsion in Abb. 2.6 einen sehr glatten Verlauf. Die niederfrequenten Anteile, resultierend aus der Änderung des Drehwinkels ξ_1 , sind gemäß (2.30d) in τ_g nicht mehr enthalten.

Das heißt die Rotation der oskulierenden Bahnebene um die Richtung des Geschwindigkeitsvektors ist im LORF per Definition enthalten, während dies für das Frenet Dreibein nicht zutrifft. Drei dominierende Perioden formen den zeitlichen Verlauf der geodätischen Torsion, die Umlaufdauer T , sowie $\frac{T}{2}$ und $\frac{T}{3}$. Der

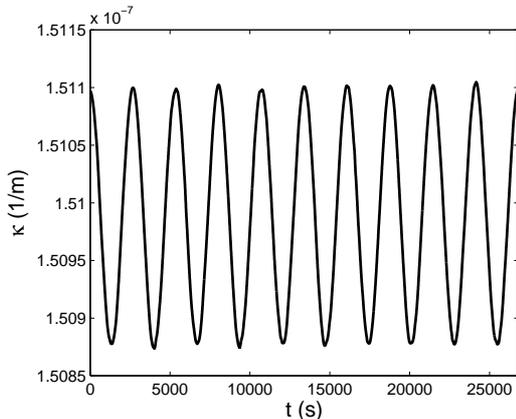


Abbildung 2.3: Krümmung κ

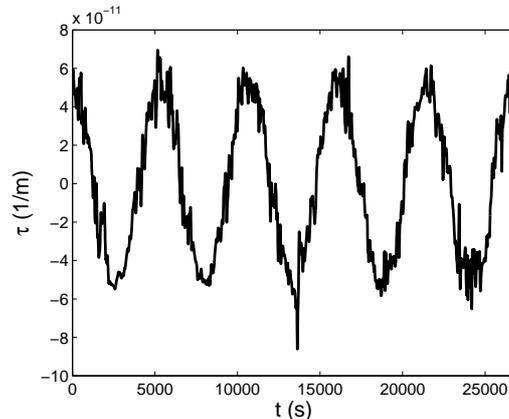
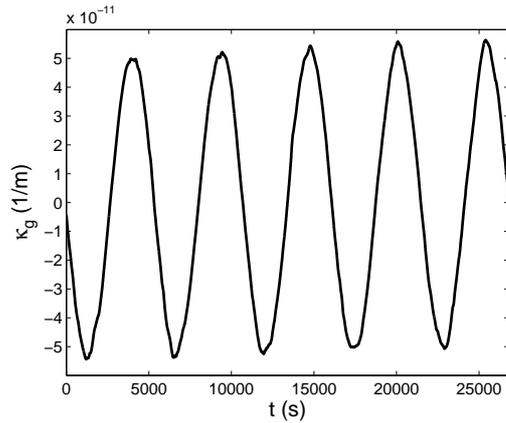
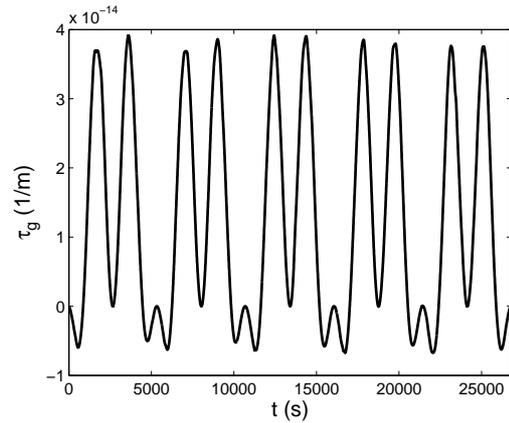


Abbildung 2.4: Torsion τ


 Abbildung 2.5: Geodätische Krümmung κ_g

 Abbildung 2.6: Geodätische Torsion τ_g

Verlauf der Normalkrümmung κ_n ist fast identisch zu κ . Die Abweichungen äußern sich gemäß (2.30c) in der geodätischen Krümmung κ_g . Diese weist mit Abb. 2.5 eine dominierende Frequenz von $\frac{1}{T}$ auf und offensichtlich gilt $\kappa_g \ll \kappa$.

In Tabelle 2.1 sind die aus den Krümmungsmaßen resultierenden Größenordnungen der Cartanmatrixelemente angegeben. Für das Frenet Dreibein als bahnbegleitendes Referenzsystem schlägt sich der hauptsächlichste Rotationsanteil im Element Ω_{12} nieder, bei Bezugnahme auf das LORF dominiert das Element Ω_{13} . Um ein Fazit über den Exkurs in die Differentialgeometrie zu ziehen, wird festgehalten, dass die Analyse der Krümmungsmaße die Rotation eines sich bewegenden Referenzsystems im inertialen Raum komplett zu beschreiben vermag. Die Größenordnung dieser Maße ist abhängig von der Definition des Bahnsystems. Das Theorem von Meusnier erlaubt die Transformation der Krümmungsmaße bezüglich verschiedener Darstellungen.

Tabelle 2.1: Größenordnung der Elemente der Cartanmatrix

	$\Omega_{12} (s^{-1})$	$\Omega_{13} (s^{-1})$	$\Omega_{23} (s^{-1})$
Frenet	10^{-3}	0	10^{-7}
LORF	10^{-7}	10^{-3}	10^{-10}

3. Invariantentheorie

Unter den Rotationsinvarianten eines Tensors (oder Tensorinvarianten) versteht man skalarwertige Größen, welche sich bezüglich einer Rotation des Referenzsystems nicht ändern. Der Anschaulichkeit halber sei an dieser Stelle die Betrachtung eines Vektors (Tensor 1. Stufe) $\underline{v} = \mathbf{e}_i v_i = \mathbf{e}^T \mathbf{v}$ vorweg genommen. Ein Vektor an sich ist unabhängig vom beschreibenden Koordinatensystem, man sagt er verhält sich invariant gegenüber einer beliebigen orthogonalen Transformation \mathbf{T} . Jedoch seine Koeffizienten ändern sich entsprechend der Projektion des Vektors auf die Koordinatenachsen. Der Zusammenhang zwischen den ursprünglichen Koordinaten \mathbf{v} und transformierten Koordinaten $\bar{\mathbf{v}}$ lautet $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{T}\mathbf{v}$. Für $\mathbf{T} \neq \mathbf{I}$ ist $\bar{\mathbf{v}} \neq \mathbf{v}$. Jedoch gilt $\|\mathbf{T}\|_2 = 1$ (Spektralnorm) und damit $\|\bar{\mathbf{v}}\|_2 = \|\mathbf{T}\mathbf{v}\|_2 = \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{v}\|_2 = \|\mathbf{v}\|_2$ (L_2 Norm). Der Betrag (bzw. die Länge) eines Vektors verhält sich damit invariant gegenüber einer orthogonalen Transformation, das heißt diese Größe ist unabhängig vom beschreibenden Bezugssystem.

Mit dieser einfachen Betrachtung eines Vektors erfolgt in Kapitel 3.1 zunächst eine allgemein gehaltene Einführung in die Tensorarstellung. Daran knüpft in Kapitel 3.2 die Fokussierung auf einen (symmetrischen) Tensor 2. Stufe im dreidimensionalen Euklidischen Raum an. Wie in Kapitel 2 behandelt, liefert die Volltensorgradiometrie eine Beobachtungsgröße dieses Typs, weshalb die Definition von Invariantensystemen auf diesen Spezialfall konzentriert wird. Schließlich behandelt Kapitel 3.3 die Invariantendarstellung über das allgemeine Eigenwertproblem.

3.1 Tensorarstellung und Tensortransformation

Im Folgenden wird eine kurze Einführung in die Tensorarstellung gegeben. Dabei sollte zunächst der Begriff Tensor erläutert werden. Im herkömmlichen Sinne wird ein Tensor über ein bestimmtes Transformationsverhalten definiert (Klingbeil 1966, Dahlen & Tromp 1998). Für die Gradiometrie ist diese Betrachtung nicht unbedingt schlüssig. Hier betrachten wir über diese Definition hinaus den Tensor als eine Größe, deren Wert richtungsunabhängig ist und die man in Bezug auf eine beliebig gewählte Basis durch seine Koordinaten beschreiben kann.

Tensorarstellung. Seien $\underline{x}^1, \dots, \underline{x}^r \in \mathbb{V}^*$ und $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_s \in \mathbb{V}$ mit $r, s \in \mathbb{Z}^+$, so beschreibt $\mathbb{T}_s^r(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*)$ den r -kontravarianten und s -kovarianten Tensorraum mit (Grafarend 2004)

$$\underline{x}^1 \otimes \dots \otimes \underline{x}^r \otimes \underline{x}_1 \otimes \dots \otimes \underline{x}_s \in \mathbb{T}_s^r(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*). \quad (3.1)$$

Darin bezeichnet \mathbb{V}^* den Dualraum von \mathbb{V} mit $\dim \mathbb{V} = \dim \mathbb{V}^* = n$ und „ \otimes “ steht für das dyadische Produkt. Die Elemente des Raumpaars $(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*)$ schreiben sich mit ihren jeweiligen Basen

$$\underline{x}^k = \mathbf{g}^1 x_1 + \mathbf{g}^2 x_2 + \dots + \mathbf{g}^i x_i, \quad (3.2a)$$

$$\underline{x}_k = \mathbf{g}_1 x^1 + \mathbf{g}_2 x^2 + \dots + \mathbf{g}_j x^j. \quad (3.2b)$$

Dies wird als die linke kontravariante und kovariante Darstellung eines i - bzw. j -dimensionalen Vektors bezeichnet. Nur für orthonormale Koordinatensysteme (deren Basisvektoren mit \mathbf{e}_i verdeutlicht werden um vom allgemeinen Basisvektor \mathbf{g}_i differenzieren zu können) sind die kontravariante und kovariante Darstellung identisch (Neutsch 1995). Aufgrund des Kommutativitätsprinzips in der Vektoralgebra ist die Repräsentation (3.2) gleichbedeutend mit der Darstellung des Vektors mittels Rechtsbasen gemäß

$$\underline{x}^k = x_1 \mathbf{g}^1 + x_2 \mathbf{g}^2 + \dots + x_i \mathbf{g}^i, \quad (3.3a)$$

$$\underline{x}_k = x^1 \mathbf{g}_1 + x^2 \mathbf{g}_2 + \dots + x^j \mathbf{g}_j. \quad (3.3b)$$

Für einen Tensor 2. Stufe im \mathbb{R}^3 wird demnach aus (3.1):

$$\underline{x}^1 \otimes \underline{y}^1 = \sum_{i,j=1}^3 \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j a_{ij} = \sum_{i,j=1}^3 a_{ij} \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}^j \in \mathbb{T}_0^2(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*), \quad (3.4a)$$

$$\underline{x}_1 \otimes \underline{y}_1 = \sum_{i,j=1}^3 \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j a^{ij} = \sum_{i,j=1}^3 a^{ij} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j \in \mathbb{T}_2^0(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*), \quad (3.4b)$$

$$\underline{x}^1 \otimes \underline{y}_1 = \sum_{i,j=1}^3 \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}_j a_i^j = \sum_{i,j=1}^3 a_i^j \mathbf{g}^i \otimes \mathbf{g}_j \in \mathbb{T}_1^1(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*), \quad (3.4c)$$

$$\underline{x}_1 \otimes \underline{y}^1 = \sum_{i,j=1}^3 \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}^j a_j^i = \sum_{i,j=1}^3 a_j^i \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}^j \in \mathbb{T}_1^1(\mathbb{V}, \mathbb{V}^*). \quad (3.4d)$$

Die Koeffizienten a_{ij} — bzw. a^{ij}, a_i^j, a_j^i — werden als Tensorkoordinaten oder Tensorkomponenten bezeichnet. Tensoren werden gebräuchlich mit Hilfe ihrer Anzahl an kontravarianten und kovarianten Indizes in der Form (r, s) angegeben. Die Stufe des Tensors ergibt sich aus der Summe der r kontravarianten und s kovarianten Indizes. Folglich bezeichnet $(2,0)$ einen kontravarianten Tensor, $(0,2)$ einen kovarianten Tensor und schließlich $(1,1)$ einen gemischten Tensor jeweils 2. Stufe. Die Tensorkomponenten können entsprechend der Stufe des Tensors in einem $(r+s)$ -dimensionalen Array untergebracht werden. Im Falle eines zweistufigen Tensors bildet dieses Array eine zweidimensionale Matrix.

Tensortransformation. Ein Tensor ist eine multilineare Abbildung, deren Komponenten bei einer Koordinatentransformation (Basiswechsel) zwar ihre Gestalt ändern, der Tensor selbst sich jedoch invariant verhält (Invarianzeigenschaft). Zunächst wird wiederum ein Tensor 1. Stufe betrachtet, dargestellt bezüglich der Basis $\mathcal{B} = \{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3\}$ bzw. $\bar{\mathcal{B}} = \{\bar{\mathbf{g}}_1, \bar{\mathbf{g}}_2, \bar{\mathbf{g}}_3\}$:

$$\underline{x} = \mathbf{g}_i x^i = \bar{\mathbf{g}}_i \bar{x}^i. \quad (3.5)$$

Dessen Koeffizienten seien in den Feldern $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^n)$ bzw. $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^n)$ zusammen gefasst. Die Größen $a^k(\mathbf{x})$ werden kontravariante Komponenten eines Vektors genannt, falls sie sich unter einer Koordinatentransformation $x^k = x^k(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^n)$ gemäß

$$\bar{a}^k(\bar{\mathbf{x}}) = a^m(\mathbf{x}) \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \quad (3.6)$$

transformieren. Dabei sind $\bar{a}^k(\bar{\mathbf{x}})$ die Komponenten des Vektors bezüglich der Koordinaten \bar{x}^k . Entsprechend werden die Größen $a_k(\mathbf{x})$ kovariante Komponenten eines Vektors genannt, falls sie sich unter einer Koordinatentransformation $x^k = x^k(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^n)$ gemäß

$$\bar{a}_k(\bar{\mathbf{x}}) = a_m(\mathbf{x}) \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^k} \quad (3.7)$$

transformieren. Die Erweiterung dieser Definitionen resultiert in den Größen $a^{kl}(\mathbf{x})$, $a_{kl}(\mathbf{x})$ und $a_l^k(\mathbf{x})$, welche als kontravariante, kovariante und gemischte Tensorkomponenten eines Tensors 2. Stufe bezeichnet werden, falls folgende Transformationsregeln gelten:

$$\bar{a}^{kl}(\bar{\mathbf{x}}) = a^{mn}(\mathbf{x}) \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \frac{\partial \bar{x}^l}{\partial x^n}, \quad (3.8a)$$

$$\bar{a}_{kl}(\bar{\mathbf{x}}) = a_{mn}(\mathbf{x}) \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^l}, \quad (3.8b)$$

$$\bar{a}_l^k(\bar{\mathbf{x}}) = a_n^m(\mathbf{x}) \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^l}. \quad (3.8c)$$

Mit Definition (3.8c) kann die Transformation der Tensorkomponenten eines beliebigen Tensors der Stufe $(r+s)$ geschrieben werden mit (Eringen 1962)

$$\bar{a}_{l_1 l_2 \dots l_s}^{k_1 k_2 \dots k_r}(\bar{\mathbf{x}}) = a_{n_1 n_2 \dots n_s}^{m_1 m_2 \dots m_r}(\mathbf{x}) \frac{\partial \bar{x}^{k_1}}{\partial x^{m_1}} \frac{\partial \bar{x}^{k_2}}{\partial x^{m_2}} \dots \frac{\partial \bar{x}^{k_r}}{\partial x^{m_r}} \frac{\partial x^{n_1}}{\partial \bar{x}^{l_1}} \frac{\partial x^{n_2}}{\partial \bar{x}^{l_2}} \dots \frac{\partial x^{n_s}}{\partial \bar{x}^{l_s}}. \quad (3.9)$$

Relative Tensoren schließlich unterscheiden sich von den absoluten in (3.9) durch die Multiplikation mit dem Faktor $|\partial x^i / \partial \bar{x}^j|^p$, der gewichteten Determinante der Koordinatentransformation:

$$\bar{a}_{l_1 l_2 \dots l_s}^{k_1 k_2 \dots k_r}(\bar{\mathbf{x}}) = \left| \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^j} \right|^p a_{n_1 n_2 \dots n_s}^{m_1 m_2 \dots m_r}(\mathbf{x}) \frac{\partial \bar{x}^{k_1}}{\partial x^{m_1}} \frac{\partial \bar{x}^{k_2}}{\partial x^{m_2}} \dots \frac{\partial \bar{x}^{k_r}}{\partial x^{m_r}} \frac{\partial x^{n_1}}{\partial \bar{x}^{l_1}} \frac{\partial x^{n_2}}{\partial \bar{x}^{l_2}} \dots \frac{\partial x^{n_s}}{\partial \bar{x}^{l_s}}. \quad (3.10)$$

Die Potenz p gibt dabei das Gewicht des relativen Tensors an, wobei $p = 0$ Beziehung (3.10) in die Darstellung des absoluten Tensors (3.9) überführt.

3.2 Invariantensysteme eines Tensors 2. Stufe

Die klassische Invariantentheorie ist unmittelbar mit David Hilbert (1890, 1893) verbunden. Ihm gelang die Lösung fundamentaler Problemstellungen. Letztlich hat er die Invariantentheorie „abgeschlossen“. In diesem Zusammenhang spielen drei von Hilberts Theoremen eine herausragende Rolle: das Basistheorem, Syzygiethem und der Nullstellensatz. Die Ausführungen dieses Kapitels stützen sich primär auf die Arbeiten von Gurevic (1964) und Grunsky & Schur (1968). Weitere Aspekte der Invariantentheorie sind außerdem in Grafarend (1970) und Weitzenböck (1923) zu finden.

Definition einer Invarianten. Seien $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ die Komponenten eines Tensors beliebiger Stufe und mögen diese Komponenten nach einer linearen Transformation in $\bar{\mu}_1, \bar{\mu}_2, \dots, \bar{\mu}_k$ übergehen, so wird die ganze rationale Funktion $\mathcal{J}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)$ als Invariante dieses Tensors bezeichnet wenn gilt (Grafarend 1970)

$$\mathcal{J}(\bar{\mu}_1, \bar{\mu}_2, \dots, \bar{\mu}_k) = \left| \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^j} \right|^p \mathcal{J}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k). \quad (3.11)$$

Darin bedeuten, wie bereits erwähnt, $|\partial x^i / \partial \bar{x}^j|$ die Determinante der Transformation und p das Gewicht der Invariante. Bei Betrachtung einer orthogonalen Transformation (Rotation) wird in allen Fällen der Betrag der Determinanten zu eins, womit für eine mathematisch positive orthogonale Transformation $|\partial x^i / \partial \bar{x}^j|^p = 1$ gilt. Falls $p = 0$ ist, so heißt die Invariante absolut, ansonsten relativ.

Invarianten, welche durch eine algebraische Funktion definiert sind, werden algebraische Invarianten genannt. Sie können stets auf ganze rationale Funktionen der Tensorkomponenten reduziert werden, weshalb für sie der Begriff ganze rationale Invariante gebräuchlich ist. Gibt es in einem Invariantensystem ein endliches Teilsystem $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_i$ von Invarianten derart, dass sich jede weitere Invariante als ganze rationale Funktion dieses speziellen darstellen lässt, so heißt dieses Teilsystem eine Basis des gesamten Invariantensystems (Grunsky & Schur 1968). Für jede weitere Invariante \mathcal{J}_m gilt dann

$$\mathcal{J}_m = \text{ganze rationale Funktion}(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_i). \quad (3.12)$$

Der Beschränkung auf ganze rationale Funktionen liegt zugrunde, dass jede gebrochen rationale Invariante sich als Quotient zweier ganzer rationaler Invariantenfunktionen schreiben lässt. Damit ist die Formulierung hinsichtlich ganzer rationaler Funktionen gerechtfertigt. Im Allgemeinen werden die Invarianten nicht algebraisch unabhängig voneinander sein, vielmehr existieren gewisse ganze rationale Funktionen \mathcal{G} für die gilt $\mathcal{G}(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_i) = 0$. Diese Funktionen, welche die algebraischen Abhängigkeiten des Invariantensystems zum Ausdruck bringen, werden als Syzygien (1.Art) bezeichnet (Weitzenböck 1923). Eine irreduzible Syzygie lässt sich nicht durch eine Linearkombination von Syzygien darstellen und es gilt das Theorem von Hilbert, nach dem eine Invariantenbasis nur eine endliche Zahl an irreduziblen Syzygien besitzt.

Eine irreduzible Invariante eines Invariantensystems ist nicht als ganze rationale Funktion verschiedener anderer Invarianten des Systems ausdrückbar. Die Menge aller irreduziblen Invarianten eines Systems nennt man das vollständige System der Invarianten (oder Hilbert Basis). Hilberts Endlichkeitssatz besagt, dass ein vollständiges System von Invarianten eines endlichen Systems von Tensoren aus einer endlichen Anzahl an Invarianten besteht. Mit diesen Aussagen gerüstet nehmen wir uns der zwei Hauptprobleme der Invariantentheorie an, welche darin bestehen für einen Tensor (oder ein Tensorsystem) beliebiger Stufe

1. das System der Invarianten aufzustellen und
2. daraus eine minimale Basis (vollständiges System) zu finden.

Die Fundamentalsätze der Invariantentheorie (Gurevic 1964, Grafarend 1970) bilden die Grundlage zur Lösung der gestellten Problematik:

1. Fundamentalsatz der Invariantentheorie. Jede Invariante eines beliebigen Tensors (bzw. eines endlichen Systems von Tensoren) ist eine lineare Kombination von Gliedern, die aus den Tensorkomponenten durch Multiplikation der Komponenten, totale Alternation und folgende totale Kontraktion gewonnen werden.

2. Fundamentalsatz der Invariantentheorie. Alle Invarianten eines beliebigen Tensors (bzw. eines endlichen Systems von Tensoren) lassen sich als ganze rationale Funktion von endlich vielen Invarianten ausdrücken.

Invariantensysteme eines Tensors 2. Stufe im \mathbb{R}^3 . Mit obiger Einführung in die Invariantentheorie widmet sich im Folgenden die Konzentration speziell auf einen Tensor 2. Stufe im orthonormalen dreidimensionalen Euklidischen Raum, womit

- die Unterscheidung in kontravariante, kovariante und gemischte Darstellung hinfällig wird und
- sämtliche Tensorkoeffizientenindizes i, j, k, \dots die Werte $\{1, 2, 3\}$ annehmen.

Da sämtliche Kombinationen von Invarianten sich wiederum invariant verhalten, ist das erste Hauptproblem der Invariantentheorie nicht eindeutig lösbar. Jedoch lassen sich beliebige Invariantensysteme ineinander überführen. Speziell drei Invariantensysteme eines Tensors 2. Stufe bieten eine anschauliche Interpretation und können unabhängig voneinander aufgestellt werden. Es sind dies

- a. die Spuren der Potenzen der Koeffizientenmatrix $[A_{ij}]$,
- b. die Summen der Hauptunterdeterminanten der Koeffizientenmatrix $[A_{ij}]$ und
- c. die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix $[A_{ij}]$.

Hinsichtlich a. resultiert aus dem ersten Fundamentalsatz das Invariantensystem J_1, J_2, \dots, J_i eines Tensors 2. Stufe im \mathbb{R}^3 mit (Gurevic 1964, Grafarend 1970)

$$J_1 = A_{ii} = A_{11} + A_{22} + A_{33}, \quad (3.13a)$$

$$J_2 = A_{ij}A_{ji} = A_{11}^2 + A_{22}^2 + A_{33}^2 + 2A_{12}A_{21} + 2A_{13}A_{31} + 2A_{23}A_{32}, \quad (3.13b)$$

$$J_3 = A_{ij}A_{jk}A_{ki} = A_{11}^3 + A_{22}^3 + A_{33}^3 + 3A_{11}A_{12}A_{21} + 3A_{11}A_{13}A_{31} + 3A_{22}A_{12}A_{21} + 3A_{22}A_{23}A_{32} + 3A_{33}A_{13}A_{31} + 3A_{33}A_{23}A_{32} + 3A_{12}A_{31}A_{23} + 3A_{21}A_{13}A_{32}, \quad (3.13c)$$

$$J_4 = A_{ij}A_{jk}A_{kl}A_{li}, \quad (3.13d)$$

$$J_i = A_{i_1 i_2} A_{i_2 i_3} \dots A_{i_{i-1} i_i} A_{i_i i_1}. \quad (3.13e)$$

Speziell für einen symmetrischen Tensor wird daraus

$$J_1 = A_{11} + A_{22} + A_{33}, \quad (3.14a)$$

$$J_2 = A_{11}^2 + A_{22}^2 + A_{33}^2 + 2A_{12}^2 + 2A_{13}^2 + 2A_{23}^2, \quad (3.14b)$$

$$J_3 = A_{11}^3 + A_{22}^3 + A_{33}^3 + 3A_{11}A_{12}^2 + 3A_{11}A_{13}^2 + 3A_{11}A_{23}^2 + 3A_{22}A_{12}^2 + 3A_{22}A_{13}^2 + 3A_{22}A_{23}^2 + 3A_{33}A_{13}^2 + 3A_{33}A_{23}^2 + 6A_{12}A_{13}A_{23}. \quad (3.14c)$$

Die Invarianten J_1, J_2, \dots, J_i sind die Spuren der i -ten Potenz der Koeffizientenmatrix. Das vollständige Invariantensystem gemäß des zweiten Fundamentalsatzes ist bereits gefunden mit dem Teilsystem $\{J_1, J_2, J_3\}$, da (i) diese drei Invarianten nicht als ganze rationale Funktion voneinander ausdrückbar sind und (ii) sich alle weiteren Invarianten als ganze rationale Funktion des Teilsystems schreiben lassen. So gilt beispielsweise

$$J_4 = \frac{1}{6}J_1^4 + \frac{1}{2}J_2^2 - J_1^2J_2 + \frac{4}{3}J_1J_3, \quad (3.15a)$$

$$J_5 = \frac{1}{6}J_1^5 + \frac{5}{6}J_2J_3 + \frac{5}{6}J_1^2J_3 - \frac{5}{6}J_1^3J_2. \quad (3.15b)$$

Aus der Gruppentheorie geht hervor, dass ein Tensor der Stufe k genau $k(k+1)/2$ linear unabhängige Rotationsinvarianten besitzt (Korn & Korn 2000) (womit im übrigen folgt, dass für einen Vektor als Tensor 1. Stufe sein bereits zu Anfang dieses Kapitels betrachteter Betrag die einzige Invariante darstellt). Für einen Tensor 2. Stufe im \mathbb{R}^3 besteht folglich ein vollständiges Invariantensystem aus genau drei Invarianten.

Hinsichtlich b. kann basierend auf dem ersten Fundamentalsatz neben dem vollständigen Invariantensystem $\{J_1, J_2, J_3\}$ ein zweites (gleichwertiges) System $\{I_1, I_2, I_3\}$ erstellt werden mit (Gurevic 1964, Grafarend 1970)

$$I_1 = \frac{1}{1!} \delta_{ij} A_{ij} = \text{tr } A_{ij} = A_{11} + A_{22} + A_{33}, \quad (3.16a)$$

$$I_2 = \frac{1}{2!} \delta_{ijkl} A_{ij} A_{kl} = \frac{1}{2!} [(\operatorname{tr} A_{ij})^2 - \operatorname{tr}(A_{ij} A_{jk})] \quad (3.16b)$$

$$= A_{11} A_{22} + A_{11} A_{33} + A_{22} A_{33} - A_{12} A_{21} - A_{13} A_{31} - A_{23} A_{32},$$

$$I_3 = \frac{1}{3!} \delta_{ijklmn} A_{ij} A_{kl} A_{mn} = \det A_{ij} \quad (3.16c)$$

$$= A_{11} A_{22} A_{33} + A_{12} A_{23} A_{31} + A_{13} A_{21} A_{32} - A_{11} A_{23} A_{32} - A_{22} A_{13} A_{31} - A_{33} A_{12} A_{21},$$

$$I_i = A_{[i_1|i_1|} A_{i_2|i_2|} \dots A_{i_i|i_i|}. \quad (3.16d)$$

Es vereinfacht sich für einen symmetrischen Tensor zu

$$I_1 = A_{11} + A_{22} + A_{33}, \quad (3.17a)$$

$$I_2 = A_{11} A_{22} + A_{11} A_{33} + A_{22} A_{33} - A_{12}^2 - A_{13}^2 - A_{23}^2, \quad (3.17b)$$

$$I_3 = A_{11} A_{22} A_{33} + 2A_{12} A_{13} A_{23} - A_{11} A_{23}^2 - A_{22} A_{13}^2 - A_{33} A_{12}^2. \quad (3.17c)$$

Die Invariante I_i ergibt sich aus der Summe der Hauptunterdeterminanten der Koeffizientenmatrix durch Streichen von $n-i$ Zeilen und Spalten. Im \mathbb{R}^3 ($n=3$) entspricht folglich I_1 der Spur und I_3 der Determinante der Tensorkoeffizientenmatrix. I_2 ist die Summe deren Hauptunterdeterminanten durch Streichen von jeweils einer Zeile und einer Spalte. Die Invarianten für $i > 3$ sind im \mathbb{R}^3 nicht definiert und verschwinden identisch zu null. Die eckigen Klammern „ $[]$ “ in (3.16d) bezeichnen die totale Alternation und für die verallgemeinerten Kronecker Symbole gilt

$$\delta_{ijkl} = \varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jlm} = \delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{jk} \delta_{il},$$

$$\delta_{ijklmn} = \varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jln}.$$

Den Zusammenhang zwischen den beiden vollständigen Systemen von Invarianten geben die Waringsche Formel (3.18) und die Newtonsche Formel (3.19) wieder (Gurevic 1964),

$$I_i = \sum_{\varrho_1, \varrho_2, \dots, \varrho_i=1}^i \frac{(-1)^{\varrho_1 + \varrho_2 + \dots + \varrho_i + i}}{1^{\varrho_1} 2^{\varrho_2} \dots i^{\varrho_i} \varrho_1! \varrho_2! \dots \varrho_i!} J_1^{\varrho_1} J_2^{\varrho_2} \dots J_i^{\varrho_i}, \quad (3.18)$$

$$\varrho_1 + 2\varrho_2 + \dots + i\varrho_i = i,$$

$$J_i - I_1 J_{i-1} + I_2 J_{i-2} + \dots + (-1)^{i-1} I_{i-1} J_1 + (-1)^i I_i = 0. \quad (3.19)$$

Die I_i sind Polynome (ganze rationale Funktionen) in J_1, J_2, \dots, J_i , worin J_i linear auftritt. Invers dazu ist J_i ein Polynom in I_1, I_2, \dots, I_i . Speziell im dreidimensionalen Raum wird

$$\begin{aligned} I_1 &= J_1, & J_1 &= I_1, \\ I_2 &= \frac{1}{2}(J_1^2 - J_2), & J_2 &= I_1^2 - 2I_2, \\ I_3 &= \frac{1}{3}J_3 - \frac{1}{2}J_1 J_2 + \frac{1}{6}J_1^3, & J_3 &= I_1^3 - 3I_1 I_2 + 3I_3. \end{aligned}$$

3.3 Eigenwertproblem und Invarianten

Hinsichtlich c. wird an dieser Stelle von der Indexschreibweise eines Tensors 2. Stufe im \mathbb{R}^3 Abstand genommen um ihrer einfachen Anschaulichkeit wegen auf die Matrix-Vektor Darstellung überzugehen. Die Darstellungen sind gleichberechtigt, denn mit dem Vektor der Basisvektoren $\mathbf{e}^T = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ und der Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} = [A_{ij}]$ gilt

$$\underline{\mathbf{A}} = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j A_{ij} = \mathbf{e}^T \mathbf{A} \mathbf{e}. \quad (3.20)$$

Wie bereits mehrfach in Erinnerung gerufen, ist ein Tensor an sich unabhängig vom zugrunde liegenden Referenzsystem, jedoch seine Komponenten (zur Analogie eines Vektors: die Projektionen des Tensors auf die Koordinatenachsen) transformieren sich gemäß $\underline{\mathbf{A}} = \mathbf{T}^T \mathbf{A} \mathbf{T}$, vgl. (4.23), worin \mathbf{T} eine beliebige orthogonale Transformation bezeichnet. Wieder sei auf den dreidimensionalen Raum fokussiert. Wie folgend gezeigt wird, verhalten sich die Eigenwerte der Tensorkoeffizientenmatrix \mathbf{A} invariant gegenüber einer orthogonalen Transformation. Somit bringt neben den Fundamentalsätzen der Invariantentheorie, für den hier besprochenen Spezialfall die Lösung des Eigenwertproblems eine alternative Möglichkeit der Invariantendarstellung.

Zu jedem Tensor 2. Stufe mit der Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} = [A_{ij}]$ gibt es mindestens ein System von Hauptachsen. Dieses zeichnet sich dadurch aus, dass die gemischten Tensorkomponenten verschwinden, das heißt es gilt $A_{ij} = \delta_{ij}A_{ij}$. Diese Hauptrichtungen werden auch die Eigenvektoren des Tensors genannt und lassen sich über das allgemeine Eigenwertproblem berechnen gemäß

$$(\mathbf{A} - \Lambda \mathbf{I}_3)\mathbf{u} = 0. \quad (3.21)$$

Gleichung (3.21) generiert ein homogenes lineares Gleichungssystem. Eine nicht-triviale Lösung existiert genau dann, wenn die charakteristische Gleichung $p(\Lambda)$ zu null wird,

$$p(\Lambda) = \det(\mathbf{A} - \Lambda \mathbf{I}_3) = 0. \quad (3.22)$$

Das Theorem von Cayley-Hamilton besagt, dass jeder Tensor seiner eigenen charakteristischen Gleichung genügt mit

$$p(\mathbf{A}) = 0. \quad (3.23)$$

Gleichung (3.22) liefert ein Polynom n -ten Grades, wobei n die Dimension des Tensors bezeichnet, was hier auf $n = 3$ führt. Die Lösungen (Wurzeln) dieser Gleichung sind die Eigenwerte von \mathbf{A} und nach einer orthogonalen Transformation von (3.22) gilt

$$\det(\mathbf{T}^T \mathbf{A} \mathbf{T} - \bar{\Lambda} \mathbf{T}^T \mathbf{T}) = 0, \quad (3.24)$$

$$\det(\mathbf{T}^T (\mathbf{A} - \bar{\Lambda}) \mathbf{T}) = 0, \quad (3.25)$$

$$\det(\mathbf{T}^T) \det(\mathbf{T}) \det(\mathbf{A} - \bar{\Lambda} \mathbf{I}) = 0. \quad (3.26)$$

Da $|\det(\mathbf{T})| = |\det(\mathbf{T}^T)| = 1$ folgt umgehend $\bar{\Lambda} = \Lambda$. Die Eigenwerte Λ_i , $i = 1, 2, 3$ als Lösungen des Polynoms (3.22) sind invariant bezüglich einer Koordinatentransformation. Sie stellen ein vollständiges, in sich unabhängiges Invariantensystem dar. Nach Bestimmung der Eigenwerte können mit (3.21) die zugehörigen Eigenvektoren berechnet werden, wobei bei eventueller Gleichheit von Eigenwerten zur Ermittlung der Hauptbasis eine Orthogonalisierung vorgenommen werden muss. Im \mathbb{R}^3 liest sich (3.22) als kubische Gleichung mit

$$\Lambda^3 - I_1 \Lambda^2 + I_2 \Lambda - I_3 = 0. \quad (3.27)$$

Durch die Transformation der Tensormatrix \mathbf{A} ins Hauptachsensystem mittels der orthogonalen Transformation \mathbf{Q} ($\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I}$), wobei $\mathbf{Q} = (\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \mathbf{u}_3)$, reduziert sich diese auf Diagonalstruktur mit den Eigenwerten als Einträge:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3) = \mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{Q}^T. \quad (3.28)$$

Da sich die Eigenwerte Λ_i rotationsinvariant verhalten, lässt sich durch Lösung des Eigenwertproblems im Hauptachsensystem die Invariantenbasis $\{I_1, I_2, I_3\}$ in Abhängigkeit der Eigenwerte leicht erkennbar wie folgt darstellen:

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{\Lambda} = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3, \quad (3.29a)$$

$$I_2 = \frac{1}{2}((\text{tr } \mathbf{\Lambda})^2 - \text{tr } \mathbf{\Lambda}^2) = \Lambda_1 \Lambda_2 + \Lambda_1 \Lambda_3 + \Lambda_2 \Lambda_3, \quad (3.29b)$$

$$I_3 = \det \mathbf{\Lambda} = \Lambda_1 \Lambda_2 \Lambda_3. \quad (3.29c)$$

Dem aufmerksamen Leser mag auffallen, dass auch hier die Bezeichnung $\{I_1, I_2, I_3\}$ gewählt ist. Tatsächlich stimmen die Invarianten (3.29) mit denen in (3.16) überein. Im ersten Falle ausgedrückt über die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix und im zweiten Falle über die Tensorkoeffizienten selbst. Letzt genannte Darstellung stellt sich im übrigen auch aus der Lösung der charakteristischen Gleichung ein. Für einen symmetrischen Tensor gilt für die Komponentenmatrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ und die Koeffizienten I_i des charakteristischen Polynoms (3.27) als Funktion der Matrixelemente A_{ij} ergeben sich zu

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{A} = A_{11} + A_{22} + A_{33}, \quad (3.30a)$$

$$I_2 = \frac{1}{2}((\text{tr } \mathbf{A})^2 - \text{tr } \mathbf{A}^2) = A_{11}A_{22} + A_{11}A_{33} + A_{22}A_{33} - A_{12}^2 - A_{13}^2 - A_{23}^2, \quad (3.30b)$$

$$I_3 = \det \mathbf{A} = A_{11}A_{22}A_{33} + 2A_{12}A_{13}A_{23} - A_{11}A_{23}^2 - A_{22}A_{13}^2 - A_{33}A_{12}^2, \quad (3.30c)$$

bzw. für einen symmetrischen spurfreien Tensor (Deviator)

$$I_1 = \operatorname{tr} \mathbf{A} = 0, \quad (3.31a)$$

$$I_2 = -\frac{1}{2} \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 = -\frac{1}{2} (A_{11}^2 + A_{22}^2 + A_{33}^2) - A_{12}^2 - A_{13}^2 - A_{23}^2, \quad (3.31b)$$

$$I_3 = \det \mathbf{A} = A_{11}A_{22}A_{33} + 2A_{12}A_{13}A_{23} - A_{11}A_{23}^2 - A_{22}A_{13}^2 - A_{33}A_{12}^2. \quad (3.31c)$$

4. Der klassische Analyseansatz

In ihrer gewöhnlichen Form erfolgt die SGG Analyse auf der Basis der einzelnen GG. Dabei wird die Formulierung des funktionalen Modells separat für jede Tensorkomponente vorgenommen. Dieses Vorgehen wird hier als der klassische Analyseansatz der Gradiometrie verstanden. Tatsächlich vereint diese Bezeichnung eine Vielzahl von Methoden, welchen die Beobachtungsgleichung $\delta\underline{V} = \nabla(\nabla\delta V)$ gemein ist. Abhängig von der Art der Datenprozessierung können diese in zwei Gruppen aufgespalten werden. Für die erste erfolgt die Analyse in Form eines fixen Randwertproblems. Die Messungen werden dabei als eine Funktion ihrer Position aufgefasst und entsprechend wird dieses Vorgehen als die „spacewise“ Methode bezeichnet. Die Analyse der räumlich anfallenden Punkte entsprechend der Sensorregistration definiert die Randfläche als die Menge aller Bahnpunkte. Letztlich mündet dieses Vorgehen in einem Ausgleichungsproblem, welches beispielsweise durch Aufstellung und Inversion des zugehörigen Normalgleichungssystems gelöst wird. Alternativ kann das Randwertproblem über streng vorgegebene Punkte auf der Randfläche angegangen werden, was auf die Lösung mittels Quadraturverfahren führt.

Demgegenüber behandelt der „timewise“ Ansatz die Messungen als eine Funktion der Zeit. Für ein solches Vorgehen muss das Problem entlang der Bahn formuliert werden, woraus die Darstellung des Gravitationspotenzials in Inklinationsfunktionen (Kaula 1966) resultiert. Charakteristisch für dieses Vorgehen ist die Annahme einer vereinfachten Bahngeometrie kombiniert mit einem iterativen Lösungsprozess, was aufgrund rechentechnischer Vorteile gegenüber dem strengen Ausgleichungsansatz letztlich auf die semi-analytische Lösung des ursprünglichen inversen Problems führt (Sneeuw 2000). Werden die Beobachtungen tatsächlich als Zeitreihe behandelt, so spricht man von der „timewise“ Methode im Zeitbereich. Eine Modifikation dazu ergibt sich durch die Transformation der Zeitreihe in den Frequenzbereich mittels einer diskreten Fouriertransformation. Die resultierenden Fourierkoeffizienten repräsentieren Linearkombinationen verschiedener sphärischer Harmonischen. Aufgrund dessen wird in diesem Falle von der Formulierung in „lumped coefficients“ gesprochen bzw. von der „timewise“ Methode im Frequenzbereich.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der klassische Analyseansatz als die „spacewise“ Methode im Rahmen eines Ausgleichungsansatzes verstanden. Dieser wird in Kapitel 8 als Referenzmethode gegenüber dem Invariantenansatz aufgegriffen und dient somit gleichsam der Validierung der durch die Invariantendarstellung erzielten Ergebnisse. Eine Übersicht der verschiedenen Methoden des klassischen Analyseansatzes ist in Rummel et al. (1993) zu finden. Für weiterführende Details sei auf Colombo (1981), Schuh (1996), Klees et al. (2000), Sneeuw (2000), Pail & Plank (2002) und Petrovskaya & Vershkov (2006) verwiesen. Allen diesen Verfahren ist gemein, dass aus der Beobachtungsgleichung der Gradiometrie (2.20) vorab die Rotationsanteile vom Beobachtungstensor abgespalten werden müssen. Auf diesen Aspekt wird in Kapitel 5.1 näher eingegangen. In Kapitel 4.1 erfolgt zunächst die Parametrisierung des Gravitationspotenzials in Form einer sphärischen harmonischen Entwicklung. Dem folgt in Kapitel 4.2 die Parametrisierung der GG für die genannte Wahl der klassischen Vorgehensweise.

4.1 Parametrisierung des Gravitationspotenzials

Zu Anfang dieses Kapitels soll festgehalten werden, dass in dieser Arbeit ausschließlich vom Gravitationspotenzial bzw. später von Gravitationsgradienten die Rede sein wird im Gegensatz zum Schwerepotenzial bzw. Schweregradienten. Tatsächlich setzt sich das Schwerepotenzial $W(\mathbf{x})$ aus dem Gravitationspotenzial $V(\mathbf{x})$ und dem Zentrifugalpotenzial $Z(\mathbf{x})$ zusammen. Letzteres besitzt einen geschlossenen Ausdruck, womit sich aus dem Wissen um $V(\mathbf{x})$ nach Belieben $W(\mathbf{x})$ ableiten lässt. Das skalarwertige Gravitationspotenzial $V(\mathbf{x})$ verhält sich harmonisch im Raum außerhalb der gravitativen Masse M (in welchem sich das Beobachtungsszenario der Satellitengeodäsie gänzlich abspielt) und erfüllt folglich die Laplace-Gleichung

$$\Delta V(\mathbf{x}) = \operatorname{div} \operatorname{grad} V(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \nabla V(\mathbf{x}) = 0. \quad (4.1)$$

Abhängig von der Parametrisierung \mathbf{x} des Gravitationspotenzials, bzw. der für die Parametrisierung zugrunde liegenden Referenzfigur, nimmt die Lösung von (4.1) unterschiedliche Gestalt an. Die verschiedenen Arten

der Parametrisierung sind gleichberechtigt und lassen sich ineinander überführen. Mit der Definition von Referenzsystemen im Sinne kartesischer Koordinatensysteme liegt die kartesische Parametrisierung eines Punktes $\mathbf{x} = \mathbf{x}(p_1, p_2, p_3) = \mathbf{x}(x, y, z)$ mit

$$\mathbf{e}^T \mathbf{x}(x, y, z) = \mathbf{e}_1 x + \mathbf{e}_2 y + \mathbf{e}_3 z \quad (4.2)$$

direkt vor. Darin bezeichne $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \mid 0\}$ eine mit dem gravitativen Körper fest verbundene orthonormale Basis mit Ursprung 0 im Zentrum dieses Körpers und es gilt $\mathbf{e}^T = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$. Eine weitaus näherliegende Parametrisierung lehnt sich an die tatsächliche Form des Körpers an. Standardmäßig wird dabei eine Kugel als Referenzfigur betrachtet, entsprechend derer ein beliebiger Punkt $\mathbf{x} = \mathbf{x}(p_1, p_2, p_3) = \mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)$ in sphärischen Koordinaten beschrieben wird mit

$$\mathbf{e}^T \mathbf{x}(\lambda, \varphi, r) = \mathbf{e}_1 r \cos \varphi \cos \lambda + \mathbf{e}_2 r \cos \varphi \sin \lambda + \mathbf{e}_3 r \sin \varphi. \quad (4.3)$$

Die Länge λ bewegt sich im Bereich $0 \leq \lambda < 2\pi$, die Breite variiert mit $-\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ und r bezeichnet den radialen Abstand vom Koordinatenursprung 0 aus. Kartesische und sphärische Koordinaten sind in Abb. 4.1 grafisch erläutert.

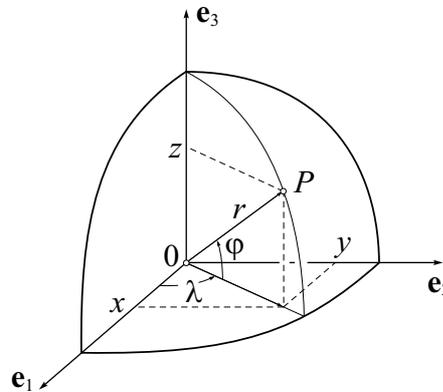


Abbildung 4.1: Definition kartesischer und sphärischer Koordinaten

Alternativ dazu ist die ellipsoidische Parametrisierung $\mathbf{x} = \mathbf{x}(p_1, p_2, p_3) = \mathbf{x}(\lambda, v, u)$ mit

$$\mathbf{e}^T \mathbf{x}(\lambda, v, u) = \mathbf{e}_1 \sqrt{u^2 + \varepsilon^2} \cos v \cos \lambda + \mathbf{e}_2 \sqrt{u^2 + \varepsilon^2} \cos v \sin \lambda + \mathbf{e}_3 u \sin v \quad (4.4)$$

durch die Referenz auf ein zugrunde liegendes Rotationsellipsoid mit großer und kleiner Halbachse a und b näher an die tatsächliche Form eines rotierenden Körpers gehalten. Darin bezeichnen v die reduzierte Breite mit $-\frac{\pi}{2} \leq v \leq \frac{\pi}{2}$ und $\varepsilon = \sqrt{a^2 - b^2}$ die lineare Exzentrizität. Die Länge λ ist identisch zur sphärischen Parametrisierung. Schließlich ist u die kleine Halbachse des Ellipsoids im Punkt \mathbf{x} .

Der Nabla-Operator in (4.1) liest sich unabhängig von den genannten Parametrisierungen

$$\nabla = \mathbf{e}_{p_1} \frac{1}{\sqrt{G_{p_1 p_1}}} \frac{\partial}{\partial p_1} + \mathbf{e}_{p_2} \frac{1}{\sqrt{G_{p_2 p_2}}} \frac{\partial}{\partial p_2} + \mathbf{e}_{p_3} \frac{1}{\sqrt{G_{p_3 p_3}}} \frac{\partial}{\partial p_3} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_{p_i} \frac{1}{\sqrt{G_{p_i p_i}}} \frac{\partial}{\partial p_i}. \quad (4.5)$$

Die Metrikoeffizienten $G_{p_i p_j}$ berechnen sich gemäß

$$G_{p_i p_j} = \left\langle \frac{\partial \mathbf{x}(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_i}, \frac{\partial \mathbf{x}(p_1, p_2, p_3)}{\partial p_j} \right\rangle \quad (4.6)$$

und sind für erwähnte Parametrisierungen in Tabelle 4.1 gegeben (bei orthonormalen Systemen stehen die Parameterlinien senkrecht aufeinander, was mit $G_{p_i p_j} = 0$ für $i \neq j$ einher geht). Basierend auf (4.5) ergibt sich schließlich die Laplace-Gleichung für den kartesischen, sphärischen und ellipsoidischen Fall zu

$$\Delta V(\mathbf{x}(x, y, z)) = \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial z^2} = 0, \quad (4.7a)$$

$$\Delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)) = \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial \varphi^2} + \frac{\tan \varphi}{r^2} \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial \varphi} + \frac{1}{r^2 \cos^2 \varphi} \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial \lambda^2} = 0, \quad (4.7b)$$

$$\begin{aligned} \Delta V(\mathbf{x}(\lambda, v, u)) &= \frac{1}{u^2 + \varepsilon^2 \sin^2 v} \left[(u^2 + \varepsilon^2) \frac{\partial V^2(\mathbf{x})}{\partial u^2} + 2u \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial u} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial V^2(\mathbf{x})}{\partial v^2} + \tan v \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial v} + \frac{u^2 + \varepsilon^2 \sin^2 v}{(u^2 + \varepsilon^2) \cos^2 v} \frac{\partial V^2(\mathbf{x})}{\partial \lambda^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.7c)$$

Die Gleichungen (4.7a) bis (4.7c) generieren jeweils eine partielle homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung, deren Lösung als die sogenannte harmonische Entwicklung der Gravitationspotenzials bezeichnet wird. Mittels eines Separationsansatzes (Heiskanen & Moritz 1967) lässt sich die gekoppelte Differentialgleichung in drei gewöhnliche Differentialgleichungen in Abhängigkeit von jeweils nur einem Parameter p_i aufspalten. Deren Einzellösungen werden schließlich zur Gesamtlösung zusammen gesetzt. Für die weiteren Ausführungen dieser Arbeit erfolgt die Fokussierung auf die sphärische Parametrisierung. Für den ellipsoidischen Fall sei auf Thong (1989), Balmino et al. (1991) und Bölling & Grafarend (2005) verwiesen. Die Transformation zwischen sphärischer und ellipsoidischer Darstellung wird in Jekeli (1988) und Thong & Grafarend (1989) behandelt. Der kartesischen Parametrisierung nimmt sich Schäfer (2001) an. Der Separationsansatz liefert für den Außenraum der massenumgebenden Kugel mit Radius R die Potenzialdarstellung

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)) &= \frac{GM}{R} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r} \right)^{l+1} e_{lm}(\lambda, \varphi) \bar{v}_{lm} \\ &= \frac{GM}{r} \left[1 + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r} \right)^l e_{lm}(\lambda, \varphi) \bar{v}_{lm} \right]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Darin bezeichnen G die Newtonsche Gravitationskonstante und M die Masse des gravitativen Körpers. Weiter beinhalten die skalarwertigen sphärischen Harmonischen $e_{lm}(\lambda, \varphi)$ gemäß (4.9) die normierten zugeordneten Legendre Funktionen erster Art $\bar{P}_{lm}(\sin \varphi)$, welche sich mit (4.10) ergeben bzw. über Rekursionsformeln evaluierbar sind (Hobson 1931, Knickmeyer 1984). Die Normierung erfolgt mit (4.11). Die Basisfunktionen sind orthonormal im Sinne $\langle e_{l_1 m_1}(\lambda, \varphi), e_{l_2 m_2}(\lambda, \varphi) \rangle = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}$ mit dem Kronecker Symbol δ_{ij} . Die erste und zweite Ableitung, $\frac{\partial}{\partial \varphi} \bar{P}_{lm}(\sin \varphi)$ bzw. $\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \bar{P}_{lm}(\sin \varphi)$, der normierten zugeordneten Legendre Funktionen erster Art können auf verschiedene Weise dargestellt werden. Zu deren Berechnung sei auf Thong (1989), Balmino et al. (1991) und Belikov & Taybatorov (1992) verwiesen.

$$e_{lm}(\lambda, \varphi) = \begin{cases} \bar{P}_{lm}(\sin \varphi) \cos m\lambda & 0 \leq m \leq l \\ \bar{P}_{l|m|}(\sin \varphi) \sin |m|\lambda & -l \leq m < 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

$$P_{lm}(\sin \varphi) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \sin^2 \varphi)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d \sin \varphi^{l+m}} (\sin^2 \varphi - 1)^l \quad (4.10)$$

$$\bar{P}_{lm}(\sin \varphi) = \begin{cases} \sqrt{2(2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\sin \varphi) & m > 0 \\ \sqrt{2l+1} P_l(\sin \varphi) & m = 0 \\ \sqrt{2(2l+1) \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l|m|}(\sin \varphi) & m < 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

$$\bar{v}_{lm} = \begin{cases} \bar{c}_{lm} & 0 \leq m \leq l \\ \bar{s}_{l|m|} & -l \leq m < 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

Unbekannt in Darstellung (4.8) sind die (normierten) dimensionslosen Koeffizienten \bar{v}_{lm} , bzw. \bar{c}_{lm} und $\bar{s}_{l|m|}$ nach (4.12), welche den physikalischen Informationsgehalt über das Gravitationspotenzial tragen. Der Zen-

Tabelle 4.1: Metrikkoeffizienten bezüglich verschiedener Parametrisierungen

	kartesisch	sphärisch	ellipsoidisch
(p_1, p_2, p_3)	(x, y, z)	(λ, φ, r)	(λ, v, u)
G_{11}	1	$r^2 \cos^2 \varphi$	$(u^2 + \varepsilon^2) \cos^2 v$
G_{22}	1	r^2	$u^2 + \varepsilon^2 \sin^2 v$
G_{33}	1	1	$\frac{u^2 + \varepsilon^2 \sin^2 v}{u^2 + \varepsilon^2}$

tralterm $\frac{GM}{r}$ entspricht dem Gravitationspotenzial eines kugelsymmetrischen Körpers. Die weiteren Terme beschreiben die Abweichungen dieser Approximation sowohl bezüglich der deformierten Gestalt als auch der inhomogenen Massenverteilung. Theoretisch betrachtet sind unendlich viele Terme obiger Reihenentwicklung notwendig, um die Charakteristik des Gravitationsfeldes völlig wieder zu geben. In der Praxis hingegen wird die Doppelsumme in (4.8) an einem bestimmten maximalen Entwicklungsgrad L abgebrochen. Dieser ist letztlich nach oben hin durch den auflösbaren Informationsgehalt der Beobachtungen limitiert. Der Übersichtlichkeit halber wird in den folgenden Darstellungen von der Kennzeichnung der Normierung abgesehen. Diese sei stets implizit angenommen. Des weiteren wird $P_{lm}(\sin \varphi)$ vereinfacht geschrieben mit P_{lm} .

Üblicherweise erfolgt die Bestimmung der unbekannt Parameter basierend auf einem a priori bekannten Referenzpotenzial (Normalpotenzial) $U(\mathbf{x})$, womit nicht das Gravitationspotenzial $V(\mathbf{x})$ als unbekannt angenommen wird, sondern das Störpotenzial

$$\delta V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) - U(\mathbf{x}). \quad (4.13)$$

Entsprechend bezeichnen dann in logischer Konsequenz $\delta v_{lm} = v_{lm} - u_{lm}$ die Störungen der tatsächlichen Gravitationsfeldparameter in Bezug auf das Referenzfeld. Aus (4.8) resultiert für das Störpotenzial

$$\delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)) = \frac{GM_0}{R} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r}\right)^{l+1} e_{lm}(\lambda, \varphi) \delta v_{lm}, \quad \delta v_{00} = \frac{\delta GM}{GM_0}. \quad (4.14)$$

In diesem Ausdruck ist nicht mehr der absolute Zentralterm enthalten, sondern für $l = 0$ die Störung $\frac{\delta GM}{r} = \frac{GM}{r} - \frac{GM_0}{r}$. Sie ist die Differenz zwischen dem Zentralterm der realen Verhältnisse und demjenigen des Normalfeldes.

Als abschließende Bemerkung wird nochmals das zu anfangs erwähnte Zentrifugalpotenzial $Z(\mathbf{x})$ aufgegriffen. Dessen geschlossener Ausdruck für die sphärische Parametrisierung ist mit $Z(\mathbf{x}) = Z(\varphi, r) = \frac{1}{2}\omega^2 r^2 \cos^2 \varphi$ gegeben. Dieser ist neben den Positionskoordinaten φ und r eine Funktion der Rotationsgeschwindigkeit ω des betrachteten Körpers.

4.2 Parametrisierung der Gravitationsgradienten

Die GG entsprechen den zweiten Ableitungen des Gravitationspotenzials oder mit anderen Worten ausgedrückt: Die zweimalige Anwendung des Gradientenoperators auf das Gravitationspotenzial liefert einen Ausdruck der GG. Der Gradientenoperator wurde bereits mit (4.5) eingeführt. Dessen Anwendung auf (4.14) ergibt einen Tensor 1. Stufe im \mathbb{R}^3 mit

$$\begin{aligned} \delta \underline{v} &= \nabla \delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)) = \mathbf{e}_i \delta v_i \\ &= \left(\mathbf{e}_\lambda \frac{1}{r \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \right) \delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r)) \\ &= \frac{GM_0}{R^2} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r}\right)^{l+2} \left[-(l+1) \underline{R}_{lm}(\lambda, \varphi) + \sqrt{l(l+1)} \underline{S}_{lm}(\lambda, \varphi) \right] \delta v_{lm}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

$\underline{S}_{lm}(\lambda, \varphi)$ und $\underline{R}_{lm}(\lambda, \varphi)$ bezeichnen die orthonormalen vektorwertigen tangentialen und radialen sphärischen Harmonischen,

$$\underline{S}_{lm}(\lambda, \varphi) = \left(\mathbf{e}_\lambda \frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \frac{e_{lm}(\lambda, \varphi)}{\sqrt{l(l+1)}}, \quad (4.16)$$

$$\underline{R}_{lm}(\lambda, \varphi) = \mathbf{e}_r e_{lm}(\lambda, \varphi). \quad (4.17)$$

Der Gradient des Gravitationspotenzials entspricht dem Gravitationsbeschleunigungsvektor. Gleichung (4.15) ist der Ansatzpunkt für die Gravitationsfeldanalyse nach dem Beschleunigungsansatz, wie er beispielsweise für die CHAMP Mission zum Einsatz kommt (Reubelt et al. 2006). Auch für GOCE spielt dieser Ansatz eine bedeutende Rolle (Baur & Grafarend 2006), da die Gradiometermessungen zur Auflösung des langwelligen Spektralbereichs durch HL-SST Beobachtungen ergänzt werden, um letztlich eine GOCE-only Lösung der Modellierung des Geopotenzials zu erhalten.

Die Anwendung des Gradientenoperators auf (4.15) resultiert in

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\delta V}} &= \nabla(\nabla\delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r))) = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \delta V_{ij} & (4.18) \\
 &= \left(\mathbf{e}_\lambda \frac{1}{r \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \right) \\
 &\otimes \left(\frac{GM_0}{R^2} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r} \right)^{l+2} \left[-(l+1) \underline{\underline{R}}_{lm}(\lambda, \varphi) + \sqrt{l(l+1)} \underline{\underline{S}}_{lm}(\lambda, \varphi) \right] \delta v_{lm} \right) \\
 &= \frac{GM_0}{R^3} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r} \right)^{l+3} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(l+2)(l+1)l(l-1)} \underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{TS}}(\lambda, \varphi) \right. & (4.19) \\
 &- \frac{1}{\sqrt{2}} (l+2)(l+1) \underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{TD}}(\lambda, \varphi) + (l+2)(l+1) \underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{N}}(\lambda, \varphi) \\
 &- \left. \sqrt{2l(l+1)}(l+2) \underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{G}}(\lambda, \varphi) \right] \delta v_{lm}.
 \end{aligned}$$

Der (inkrementelle) Gravitationstensor setzt sich aus vier Komponenten zusammen (Bölling & Grafarend 2005): (i) tangentielle Scherung (TS), (ii) tangentielle Dilatation (TD), (iii) normal (N) und (iv) gemischt (G). Diese Darstellung entspricht derjenigen in Schreiner (1994) unter der Berücksichtigung, dass in (4.19) die tangentielle Komponente in Scherung und Dilatation aufgespalten wird. Die entsprechenden orthonormalen tensorwertigen sphärische Harmonische lauten

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{TS}}(\lambda, \varphi) &= \left[(\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \mathbf{e}_\lambda \otimes \mathbf{e}_\lambda) \frac{1}{2} \left(-\cos^{-2} \varphi \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \tan \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right. & (4.20a) \\
 &\left. + 4\mathbf{e}_\lambda \vee \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos^{-1} \varphi \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \right] \frac{e_{lm}(\lambda, \varphi)}{\sqrt{2(l+2)(l+1)l(l-1)}},
 \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{TD}}(\lambda, \varphi) = -(\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \mathbf{e}_\lambda \otimes \mathbf{e}_\lambda) \frac{1}{\sqrt{2}} e_{lm}(\lambda, \varphi), \quad (4.20b)$$

$$\underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{N}}(\lambda, \varphi) = \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r e_{lm}(\lambda, \varphi), \quad (4.20c)$$

$$\underline{\underline{T}}_{lm}^{\text{G}}(\lambda, \varphi) = \sqrt{2} \mathbf{e}_r \vee \underline{\underline{S}}_{lm}(\lambda, \varphi). \quad (4.20d)$$

Das Symbol „ \vee “ steht für das symmetrische Produkt $\mathbf{a} \vee \mathbf{b} = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a})$. Schließlich sind im Folgenden die einzelnen Komponenten der symmetrischen Koeffizientenmatrix $\mathbf{V} = [V_{ij}]$ sortiert nach Basen explizit angeben:

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\delta V}} &= \nabla(\nabla\delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r))) = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \delta V_{ij} & (4.21) \\
 &= \frac{GM_0}{R^3} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \left(\frac{R}{r} \right)^{l+3} \left[\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi (-(l+1)e_{lm}(\lambda, \varphi) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} e_{lm}(\lambda, \varphi)) \right. \\
 &+ \mathbf{e}_\lambda \otimes \mathbf{e}_\lambda (-(l+1)e_{lm}(\lambda, \varphi) + \frac{1}{\cos^2 \varphi} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e_{lm}(\lambda, \varphi) - \tan \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} e_{lm}(\lambda, \varphi)) \\
 &+ \mathbf{e}_\lambda \otimes \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} e_{lm}(\lambda, \varphi) \right) + \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\lambda \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} e_{lm}(\lambda, \varphi) \right) \\
 &- \mathbf{e}_\lambda \otimes \mathbf{e}_r (l+2) \frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} e_{lm}(\lambda, \varphi) - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\lambda (l+2) \frac{1}{\cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} e_{lm}(\lambda, \varphi) \\
 &- \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_r (l+2) \frac{\partial}{\partial \varphi} e_{lm}(\lambda, \varphi) - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\varphi (l+2) \frac{\partial}{\partial \varphi} e_{lm}(\lambda, \varphi) \\
 &\left. + \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r (l+2)(l+1)e_{lm}(\lambda, \varphi) \right] \delta v_{lm}.
 \end{aligned}$$

Tensortransformation. In der Gradiometrie bilden die einzelnen Komponenten des Gravitationstensors jeweils einen Typ von Beobachtung. Der funktionale Zusammenhang zwischen den Messgrößen, das heißt den GG, und der Modellierung des Gravitationsfeldes ist mit (4.21) in den einzelnen Komponenten direkt gegeben. Die unbekanntenen Koeffizienten δv_{lm} treten linear auf. In (4.21) bildet das Modellsystem das Referenzsystem der harmonischen Analyse. Damit ist implizit angenommen, dass die beobachteten GG vom Gradiometer-system in das Tangentialsystem transformiert werden. In Kapitel 3 wurde bereits erwähnt, dass sich zwar

ein Tensor invariant gegenüber einer orthogonalen Transformation verhält, nicht jedoch seine Komponenten. Seien $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \mid 0\}$ und $\{\bar{\mathbf{e}}_1, \bar{\mathbf{e}}_2, \bar{\mathbf{e}}_3 \mid 0\}$ zwei beliebige orthonormale Rechtssysteme mit gemeinsamem Ursprung 0 und gelte weiter $\mathbf{e}^T = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ sowie $\bar{\mathbf{e}}^T = [\bar{\mathbf{e}}_1, \bar{\mathbf{e}}_2, \bar{\mathbf{e}}_3]$, so gilt für den Tensor

$$\underline{\underline{A}} = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j A_{ij} = \mathbf{e}^T \mathbf{A} \mathbf{e} \quad (4.22)$$

nach der orthogonalen Basistransformation $\bar{\mathbf{e}} = \mathbf{T}^T \mathbf{e}$ bzw. $\mathbf{e} = \mathbf{T} \bar{\mathbf{e}}$ mit $|\det \mathbf{T}| = 1$, $\mathbf{T}^T \mathbf{T} = \mathbf{I}$

$$\underline{\underline{A}} = \mathbf{e}^T \mathbf{A} \mathbf{e} = (\mathbf{T} \bar{\mathbf{e}})^T \mathbf{A} \mathbf{T} \bar{\mathbf{e}} = \bar{\mathbf{e}}^T \mathbf{T}^T \mathbf{A} \mathbf{T} \bar{\mathbf{e}} = \bar{\mathbf{e}}^T \bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{e}}. \quad (4.23)$$

Für die Koeffizientenmatrix gilt durch den Systemübergang folglich $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{T}^T \mathbf{A} \mathbf{T}$. Im speziellen Fall der Rotation des Gravitationsensors vom Gradiometersystem in ein alternatives Referenzsystem gelten die Zusammenhänge nach Tabelle 4.2. Darin ist die Rotation zwischen Gradiometersystem und Bahnsystem mit den Eulerwinkeln (η_1, η_2, η_3) gemäß (A.30) parametrisiert. Weiter sind die Rotationen $\mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$ und $\mathbf{R}(\lambda, \varphi, r)$ in (A.23) und (A.27) gegeben. Über Fehlerfortpflanzung lässt sich die Genauigkeit der GG nach der Transformation gemäß Tabelle 4.2 ableiten. Die fehlerbehafteten Größen sind neben den GG (genauer gesagt den beobachteten Elementen V_{ij}^G) auch die Rotationswinkel η_i . In Kapitel 8 wird darauf zurück zu kommen sein.

Tabelle 4.2: Koeffizientenmatrix des Gravitationsensors bezüglich verschiedener Referenzsysteme

Referenzsystem	Transformationsmatrix \mathbf{T}	Koeffizientenmatrix $\mathbf{T}^T \mathbf{V} \mathbf{T}$
Gradiometersystem	\mathbf{I}	\mathbf{V}^G
Bahnsystem	$\mathbf{R}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$	$\mathbf{V}^L = \mathbf{T}^T \mathbf{V}^G \mathbf{T}$
Erdfestes System	$\mathbf{R}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) \mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$	$\mathbf{V}^E = \mathbf{T}^T \mathbf{V}^G \mathbf{T}$
Modellsystem	$\mathbf{R}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) \mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \mathbf{R}^T(\lambda, \varphi, r)$	$\mathbf{V}^M = \mathbf{T}^T \mathbf{V}^G \mathbf{T}$

Alternativ kann die Beobachtungsgleichung auch im Gradiometersystem formuliert werden durch Rotation des mathematischen Modells. Wie später gezeigt wird, stellt dies für die praktische Anwendung das allgemein bessere Vorgehen dar, da sich stochastische Eigenschaften der verschiedenen GG durch die Transformation nicht kombinieren. Die Beobachtungsgleichung im Gradiometersystem liest sich

$$\delta \underline{\underline{V}} = \mathbf{e}_i^G \otimes \mathbf{e}_j^G \delta V_{ij} = \mathbf{T} \nabla (\nabla \delta V(\mathbf{x}(\lambda, \varphi, r))) \mathbf{T}^T. \quad (4.24)$$

5. Der Analyseansatz basierend auf den Rotationsinvarianten

Die Rotation zwischen dem Gradiometersystem und dem Bezugssystem der harmonischen Analyse, siehe hierzu Anhang A.2, bildet den limitierenden Faktor zur exakten Formulierung der Beobachtungsgleichung (4.21) bzw. (4.24) aufgrund der nur bis zu einer gewissen Genauigkeit bereit gestellten Rotationsparameter. Für den klassischen Analyseansatz treten diese auf

- zur Reduktion der Rotationsanteile aus dem Beobachtungstensor (2.20) und
- zur Transformation zwischen Gradiometersystem und Bahnsystem (A.30).

Um besagte Rotation zu umgehen, werden nicht die GG selbst als Beobachtungen eingeführt, sondern die Rotationsinvarianten des Gravitationstensors. Diese Größen sind invariant gegenüber einer Rotation des Referenzsystems. Der Invariantenansatz benötigt die Rotationsparameter lediglich

- zur Reduktion der Rotationsanteile aus dem Beobachtungstensor (2.20).

In letzteres gehen die Winkelgeschwindigkeiten und -beschleunigungen ein, während für die Systemtransformation direkt die Orientierungsinformation einfließt. Offensichtlich ist beiden Methoden die Bereitstellung des Gravitationstensors aus dem Beobachtungstensor gemeinsam. Tatsächlich sind mit beispielhaft

$$\begin{aligned}
 I_2^{\mathbf{F}} = I_2^{\mathbf{V}} & - V_{11}(\omega_2^2 + \omega_3^2) - V_{22}(\omega_1^2 + \omega_3^2) - V_{33}(\omega_1^2 + \omega_2^2) \\
 & - 2(V_{12}\omega_1\omega_2 + V_{13}\omega_1\omega_3 + V_{23}\omega_2\omega_3) \\
 & - 2(V_{11}\omega_1^2 + V_{22}\omega_2^2 + V_{33}\omega_3^2) \\
 & + 2(\omega_1^2\omega_2^2 + \omega_1^2\omega_3^2 + \omega_2^2\omega_3^2) \\
 & + \omega_1^4 + \omega_2^4 + \omega_3^4 + \dot{\omega}_1^2 + \dot{\omega}_2^2 + \dot{\omega}_3^2
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

sämtliche Invarianten des Beobachtungstensors ungleich denen des Gravitationstensors. Folglich muss auch für die Invariantenanalyse die Trennung der Rotationsanteile durchgeführt werden. Darauf wird in Kapitel 5.1 näher eingegangen. Kapitel 5.2 gibt einen Abriss über die bisherigen Arbeiten zur Verwendung der Invariantendarstellung in der Satellitengradiometrie. Dem folgt in Kapitel 5.3 die Parametrisierung der Rotationsinvarianten in sphärische Harmonische. Kapitel 5.4 befasst sich mit der Linearisierung der resultierenden funktionalen Modelle. Und schließlich wird in Kapitel 5.5 die synthetische Berechnung von GG als ein wesentlicher Aspekt zur praktischen Verwendung des Invariantenansatzes behandelt.

Generell kann für die Volltensorgradiometrie das funktionale Modell der Invariantenanalyse basierend auf jedem beliebigen Invariantensystem formuliert werden. Da jede beliebige Kombination von Invarianten selbst wieder eine Invariante darstellt, ist die Anzahl möglicher Invariantenbasen nicht begrenzt. Tatsächlich bietet sich — im Vergleich zu möglichen alternativen Invariantenbasen — die Analyse der Invarianten $\{J_1, J_2, J_3\}$ bzw. $\{I_1, I_2, I_3\}$ speziell für ein massegerichtetes Gradiometer vom Typ GOCE ganz besonders an, da sich der Einfluss der Nebendiagonalelemente in Form von Termen kleiner Größenordnung bemerkbar macht (hierauf wird näher in Kapitel 8 eingegangen). Es dominieren in der Beobachtungsgleichung die Terme, welche ausschließlich Hauptdiagonalelemente des Gravitationstensors enthalten. Für die zweite Invariante findet gar strikt eine Trennung von Termen, welche einerseits ausschließlich Hauptdiagonalelemente und andererseits einzig Nebendiagonalelemente enthalten, statt. Für die dritte Invariante tritt ein Term bestehend aus Hauptdiagonalelementen auf, die weiteren enthalten zumindest einen quadratischen Anteil in den Nebendiagonalelementen. Hier erfolgt die Formulierung des funktionalen Modells zur Invariantenanalyse unter Betrachtung des vollständigen Invariantensystems $\{I_1, I_2, I_3\}$. Die folgenden Ausführungen können entsprechend auf beliebige alternative Invariantenbasen übertragen werden. Zu bemerken ist noch, dass sowohl die Fundamentalinvarianten $\{I_1, I_2, I_3\}$ als auch die Eigenwerte $\{\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3\}$ vollständige Invariantensysteme im \mathbb{R}^3 bilden und beide Bestandteil der kubischen charakteristischen Gleichung (3.27) sind. Die inverse Beziehung zu (3.29) liefert äußerst komplizierte Ausdrücke für die Eigenwerte in Abhängigkeit der Matrixelemente A_{ij} . Aus diesem Grunde wird von der Formulierung des funktionalen Modells basierend auf den Eigenwerten abgesehen.

5.1 Beseitigung der Rotationstensoren

Die Analyse gradiometrischer Messungen verlangt die Bereitstellung des Gravitationstensors \underline{V} als Beobachtungsgröße. In einem rotierenden Bezugssystem, welchem das Gradiometer bei massegerichteter Orientierung unterworfen ist, treten jedoch Rotationseinflüsse bezüglich des inertialen Raums auf. Diese schlagen sich in Form eines Zentrifugal- und Euleranteils in der Beobachtungsgleichung nieder, vgl. (2.20). Unabhängig von der Analysemethode (klassisch oder invariantenbasiert) sind die Rotationsanteile von \underline{V} zu trennen. Dazu dient eine Vielzahl möglicher Methoden. Einige davon werden im Folgenden skizziert und hinsichtlich ihrer Verwendung für die Invariantenanalyse evaluiert.

Integration des antisymmetrischen Anteils des Beobachtungstensors. Durch die spezielle Struktur der Rotationstensoren ist es möglich, den Eulertensor $\underline{\dot{\Omega}}$ über den antisymmetrischen Anteil des Beobachtungstensors (2.26) zu berechnen und kann aus (2.20) eliminiert werden. Durch Integration des antisymmetrischen Anteils gemäß

$$\Omega_{ij} = \Omega_{ij}^0 + \int \dot{\Omega}_{ij} dt \quad (5.2)$$

wird der Drehvektor $\boldsymbol{\omega}$ bestimmt und schließlich der Zentrifugaltensor $\underline{\Omega}^2$ aus der Beobachtungsgleichung reduziert. Allein, die Integrationskonstante Ω_{ij}^0 ist eine Unbekannte. Zudem unterliegt sie einer gewissen Drift, so dass sie regelmäßig neu bereit gestellt werden muss. Für die Integration (5.2) ist deshalb zusätzliche Information notwendig, welche z.B. durch die absolute Orientierung des Gradiometersystems mit Hilfe von Sternkameras geliefert werden kann (Rummel 1986). Es ist zu bemerken, dass es primäres Ziel des Invariantenansatzes ist, die Erfordernis der Orientierung des Gradiometersystems gänzlich zu umgehen. Die Verwendung von Sternkameras für die Trennung der Rotationsanteile wirkt dieser Philosophie entgegen, wenngleich nicht im eigentlich definierten Sinne, will heißen im Zuge der Analyse des Gravitationstensors. Trotz der Unverzichtbarkeit auf externe Orientierungssensoren ist von fundamentaler Bedeutung, dass die Orientierung des Messsystems nur in dem Maße gewährleistet sein muss, um die Rotationsanteile vom Beobachtungstensor mit ausreichender Genauigkeit zu trennen. Dazu ist tatsächlich das Wissen um die Orientierungsparameter θ_i selbst — im Vergleich zur Tensortransformation — nicht notwendig, sondern allein ω_i und $\dot{\omega}_i$ müssen bereit gestellt werden. Die Winkelgeschwindigkeiten stehen mit den Orientierungsparametern über die kinematischen Eulerschen Gleichungen in Verbindung (Kaplan 1976, Schneider 1992). Klassischerweise ist darin besagte Rotation in Eulerwinkeln parametrisiert. Dambeck (1999) gibt eine detaillierte Beschreibung der Zusammenhänge in der Hamilton Parametrisierung (Quaternionen).

Differentiation der Beobachtungsgleichung. Die Rotationsanteile verhalten sich gleichförmig im Raum, das heißt deren Änderung ergibt sich zu null. Folglich bleiben nach der Differentiation von (2.20) nurmehr die dritten Ableitungen des Gravitationspotenzials in der modifizierten Beobachtungsgleichung enthalten (Moritz 1968, Forward 1981), womit die Störterme eliminiert sind. Das Problem dieses Vorgehens besteht darin, dass ohnehin kleine Größen zusätzlich einer Differentiation unterworfen werden. Dies verlangt eine enorm hohe Genauigkeit des Gradiometers. Speziell für GOCE gilt folgende Abschätzung: Die quasi-radiale Tensorkomponente V_{33} bewegt sich in einem dynamischen Bereich von etwas 40 E. Die Genauigkeit einer Beobachtung sei mit $\sigma_{V_{33}} = 6 \text{ mE}$ angenommen. Daraus ergibt sich ein Signal-zu-Rausch Verhältnis von $\frac{S}{N_{V_{33}}} = 6,1 \cdot 10^3$. Die dritte quasi-radiale Ableitung des Gravitationspotenzials, bezeichnet mit V_{333} , variiert im Bereich von $2 \cdot 10^{-5} \text{ E m}^{-1}$. Für die Genauigkeit wird $\sigma_{V_{333}} = 1,1 \cdot 10^{-6} \text{ E m}^{-1}$. Damit ist $\frac{S}{N_{V_{333}}} = 20$. Letzteres Signal-zu-Rausch Verhältnis erlaubt zwar die Anwendung der Methode, ist jedoch weit ungünstiger verglichen zur Analyse der zweiten Ableitungen des Gravitationspotenzials.

Ausnutzung der Spurfreiheit. Der Gravitationstensor ist ein spurloser Tensor, auch Deviator genannt. Diese Eigenschaft führt durch die Spurbildung von (2.20) auf

$$\text{tr}\underline{\Gamma} = \Gamma_{11} + \Gamma_{22} + \Gamma_{33} = -2(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2) = -2\|\boldsymbol{\omega}\|^2. \quad (5.3)$$

In Gleichung (5.3) ist die explizite Darstellung der Rotationstensoren $\underline{\Omega}^2$ und $\underline{\dot{\Omega}}$, wie in (2.23) und (2.24) zu sehen, enthalten. Mit Hilfe der obigen Bedingung lässt sich der Betrag (die Länge) des Drehvektors $\boldsymbol{\omega}$ ermitteln. Der Wert für $\|\boldsymbol{\omega}\|$ kann mit einer Genauigkeit entsprechend der Genauigkeit der einzeln gemessenen Tensorelemente bereit gestellt werden, jedoch ist eine Trennung der einzelnen Komponenten nicht möglich. Ein perfekt massegerichtetes Gradiometer (eine Achse zeigt in radiale Richtung), welches in einer Bahn mit großer Halbachse a rotiert, hat eine Winkelgeschwindigkeit von $\omega_0 = \sqrt{GM/a^3}$. Die beiden anderen Winkelgeschwindigkeiten verschwinden zu null. In der Realität ist der perfekte Fall nicht vorhanden, dominant

bleibt jedoch die Rotation um die Bahnnormale. Damit ist die Richtung des Drehvektors $\boldsymbol{\omega}$ nahe der Richtung des Bahnnormalenvektors und damit der „cross-track“ Achse des bahnbegleitenden Systems. Werden die Drehungen ω_1 und ω_3 kleiner als ein Schwellenwert ω_s angenommen, so ist aus (5.3) die Bestimmung von ω_2 mit eben diesem Genauigkeitsniveau möglich (Sacerdote & Sansò 1989). ω_2 selbst nimmt — abhängig von der Flughöhe — Werte von 10^{-3} s^{-1} oder größer an. Folglich sind die gemischten Terme $\omega_1\omega_2$ und $\omega_2\omega_3$ in $\underline{\underline{\Omega}}^2$ nur mit einer Genauigkeit von $\omega_s\omega_2$ bestimmt. Um eine Genauigkeit der gemischten Elemente im Bereich 10^{-12} s^{-2} zu gewährleisten, müsste ω_s in der Größenordnung 10^{-9} s^{-1} liegen. Eine solch minimale Abweichung von einer idealen Bahn ist im Falle des Erdkörpers nicht gegeben und allgemein hin nicht annehmbar. Eine praktische Anwendung dieses Konzepts kommt somit nur in Frage, falls die Tensorkomponenten mit reduzierter Genauigkeit beobachtet werden. Oder alternativ dazu $\omega_1 \simeq \omega_2 \simeq \omega_3$ gilt, womit $\omega_i \simeq \frac{1}{3}\|\boldsymbol{\omega}\|$ wird.

Inertiale Stabilisierung. Abweichend von den bisher beschriebenen Methoden löst die inertielle Stabilisierung des Gradiometers das Problem der Rotationsanteile auf eine ganz einfache Art und Weise. Tatsächlich tritt bei idealer Stabilisierung des Gradiometersystems bezüglich des inertialen Raumes keine Orientierungsänderung auf. Sämtliche Winkelgeschwindigkeiten ω_i als erste Ableitungen der Orientierung und Winkelbeschleunigungen $\dot{\omega}_i$ (Ableitung der Orientierungsänderung) werden zu null. Sowohl der Zentrifugal- als auch der Eulertensor in (2.20) verschwinden. Der Idealfall ist in der Praxis nicht realisierbar. Die Rotationsanteile können jedoch für entsprechende Missionsziele als vernachlässigbar klein angenommen werden. So gilt allgemein, dass die Größenordnung der Komponenten von $\underline{\underline{\Omega}}^2$ unterhalb des Genauigkeitsniveaus der GG liegen muss, also $\omega_k\omega_l < \sigma_{V_{ij}}$. Sacerdote & Sansò (1989) kommen für das GRADIO Experiment zu dem Ergebnis, dass die einzelnen Komponenten des Winkelbeschleunigungsvektors bei inertialer Stabilisierung den Wert 10^{-6} s^{-1} nicht überschreiten, womit $\omega_k\omega_l < 10^{-12} \text{ s}^{-2}$ bleibt. Für die GOCE Mission wäre das Limit ebenfalls in dieser Größenordnung zu setzen. Tatsächlich wurde für GOCE jedoch die erdgerichtete Orientierung gewählt. Dies gewährleistet einerseits einen gleichmäßigen Widerstand entlang des Orbits. Zum anderen garantiert ein solches Vorgehen die Minimierung des dynamischen Messbereichs. Damit sind die beobachteten Tensorelemente relativ kleinen Änderungen unterworfen. Letzteres bildet den Hauptgrund, weshalb bei GOCE gegen eine inertielle Orientierung entschieden wurde. Darüber hinaus vermeidet die erdgerichtete Orientierung das Auftreten großer Werte in den Nebendiagonalen des Beobachtungstensors. Im Rahmen der klassischen SGG Analyse ist dies von großer Bedeutung. Denn sie verlangt für dieses Szenario die Bereitstellung der Orientierungswinkel zwischen Gradiometersystem und erdfestem System mit einer enorm hohen — heute noch nicht realisierbaren — Genauigkeit (Müller 2001). Für die Invariantenanalyse fällt diese Argumentation weg. Zum einen bewegen sich diese Größen stets innerhalb eines kleinen dynamischen Bereichs. Andererseits ist die Orientierung des Gradiometersystems bezüglich eines anderweitigen Referenzsystems nicht notwendig.

Krümmungsmaße. Einen rein geometrischen Ansatz zur Berechnung der Rotationsanteile liefert die Berechnung der Cartanmatrix (2.22) über die Krümmungsmaße (2.29) des bahnbegleitenden Systems bezüglich des inertialen Raumes (Baur & Grafarend 2005). Aus ihr lässt sich problemlos der Zentrifugaltensor berechnen und nach einfacher numerischer Differentiation der Eulertensor. Dieses Vorgehen stützt sich einzig auf die geometrische Bahninformation der rotierenden Plattform, denn die Krümmungsmaße berechnen sich gemäß Kapitel 2.2 aus deren Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung. Letztere können wiederum durch numerische Differentiation (erster bzw. zweiter Ordnung) aus der Bahninformation erhalten werden (Reubelt et al. 2003, Baur & Grafarend 2006). Letztlich kommt auch diese Methode ohne externe Orientierung nicht aus. Die Krümmungsanalyse erfolgt bezüglich des nominellen Bahnsystems, womit das Gradiometersystem entweder in diesem gehalten werden oder aber dessen Abweichung zum Bahnsystem bekannt sein muss.

Transformation ins Hauptachsensystem. Letztlich sei noch auf das Szenario eines gar völlig orientierungslosen, nicht inertial-stabilisierten Gradiometers eingegangen. Diesen Fall behandelt Rummel (1986) durch die Transformation des Gravitationstensors ins Hauptachsensystem gemäß (3.28). Dessen Achsenrichtungen (zumindest die radiale Komponente) unterscheiden sich tatsächlich nur wenig von denen des Modellsystems, das heißt den Richtungen $(\mathbf{e}_\lambda, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_r)$ — für ein sphärisches Kraftfeld sind die radialen Komponenten identisch. Im Falle eines inhomogenen, rotierenden Körpers (wie z.B. der Erde) stammen die größten Abweichungen durch den Effekt der Abplattung. Eine ellipsoidische Approximation kann in diesem Falle die Unsicherheiten der Orientierung des Hauptachsensystems bezüglich des Modellsystems beträchtlich reduzieren, so auf das 10" Level im Falle der Erde. Somit wird es aus der Orientierungsinformation des Gradiometersystems zum Modellsystem möglich, die Orientierung zwischen Gradiometersystem und raumfestem System zu bestimmen und damit gleichsam die Rotationsanteile aus der Beobachtungsgleichung (2.20) zu reduzieren. Freilich geht dieses Vorgehen mit einer limitierten Genauigkeit einher.

5.2 Invarianten in der Gradiometrie

Die Invariantendarstellung im Dienste der Gravitationsfeldanalyse geht zurück auf Rummel (1986). Tatsächlich wurde diese Methode jedoch noch nie für ihren praktischen Einsatz im Rahmen einer closed-loop Simulation untersucht. Das mag an den sowohl methodischen als auch rechentechnischen Schwierigkeiten der Prozessierung liegen, denn grundsätzlich stellen sich zwei wesentliche Hürden:

- Die Volltensorgradiometrie ist im Allgemeinen technisch nicht realisierbar und bleibt somit ein theoretisches Konstrukt; vielmehr muss davon ausgegangen werden, dass nur ein Teil der Tensorkomponenten aus Messungen bereit gestellt werden kann.
- Die rechentechnischen Anforderungen des Invariantenansatzes sind hinsichtlich der Kombination aus möglichst hoher Gravitationsfeldauflösung und des nicht-linearen funktionalen Modells gewaltig.

Die hier vorliegende Arbeit stellt für beide Aspekte adäquate Lösungsstrategien vor, womit die Invariantenmethode selbst für die hochauflösende Gravitationsfeldanalyse anwendbar wird (Baur et al. 2007b).

Zunächst erfolgt eine kurze Zusammenfassung bisheriger Arbeiten im Bereich der Invariantendarstellung bezüglich satellitengeodätischer Anwendungen beginnend mit Rummel (1986), welcher eine Übersicht über mögliche Gradiometer-Konfigurationen sowie die zugehörigen Beobachtungsgleichungen gibt und deren praktische Realisierung erwägt. Dem Invariantenansatz widmet er sich über die Lösung des allgemeinen Eigenwertproblems des Gravitationstensors, siehe Kapitel 3.3, und schließt mit der Aussage, dass die hohe Nicht-Linearität der Beobachtungsgleichungen für den praktischen Gebrauch zum primären Problem wird. Holota (1989) behandelt die Lösung geodätischer Randwertprobleme basierend auf der Satellitengradiometrie im Lichte der Invariantenmethode über lineare Störungsrechnung und untersucht die Abtrennung der Bahnstörungen. In Sacerdote & Sansò (1989) wird das Problem der Orientierung des Gradiometersystems diskutiert. Des weiteren wird die Linearisierung der Invarianten im Sinne der Störungsrechnung anhand eines sphärischen und ellipsoidischen (J_2 Term berücksichtigt) symmetrischen Referenzfeldes besprochen. Vermeer (1990) untersucht Differenzen erster und zweiter Ordnung zwischen zeitlich aufeinander folgenden Tensorkomponenten zur Elimination der unbekanntenen Integrationskonstanten bei der Integration des antisymmetrischen Anteils des Beobachtungstensors bzw. der Unsicherheiten in der Orientierung des Gradiometersystems. Tatsächlich handelt es sich bei den genannten Beiträgen gänzlich um theoretische Arbeiten. Eine numerische Realisierung des Invariantenansatzes für die konkrete Datenanalyse findet aus oben genannten Gründen nicht statt.

5.3 Parametrisierung der Rotationsinvarianten

Im Folgenden wird die Matrix \mathbf{A} in Kapitel 3 mit der Koeffizientenmatrix $\mathbf{V} = [V_{ij}]$ des Gravitationstensors $\underline{\underline{V}}$ identifiziert. Entsprechend zu (3.31) ergeben sich damit die Fundamentalinvarianten I_i des symmetrischen, spurfreien Gravitationstensors zu

$$I_1 = V_{11} + V_{22} + V_{33} = 0, \quad (5.4a)$$

$$I_2 = -\frac{1}{2}(V_{11}^2 + V_{22}^2 + V_{33}^2) - V_{12}^2 - V_{13}^2 - V_{23}^2, \quad (5.4b)$$

$$I_3 = V_{11}V_{22}V_{33} + 2V_{12}V_{13}V_{23} - V_{11}V_{23}^2 - V_{22}V_{13}^2 - V_{33}V_{12}^2. \quad (5.4c)$$

Die erste Invariante I_1 setzt sich aus nur drei GG zusammen. Zudem treten diese linear auf. Aufgrund der Spurfreiheit wird I_1 für den Gravitationstensor zu null. Deren Analyse liefert die Trivillösung, womit sie als Beobachtungsgröße für die Gravitationsfeldbestimmung nicht zu gebrauchen ist. Sie kann jedoch als Bedingungsgleichung im Rahmen des Ausgleichsproblems berücksichtigt werden. Die zweite und dritte Invariante setzen sich aus aufsummierten Zweifach- bzw. Dreifachprodukten der GG zusammen. Außerdem finden hier jegliche einzelne GG Eingang. Mit anderen Worten: die Analyse der Größen I_2 und I_3 setzt die Volltensorgradiometrie voraus. Kann diese durch die Beobachtungskonfiguration nicht gewährleistet werden, sind die unbeobachteten GG anderweitig bereit zu stellen. Mit Gleichungen (5.4a) bis (5.4c) können die Pseudo-Beobachtungen für die Invariantenanalyse aus den beobachteten bzw. rekonstruierten GG berechnet werden. Der funktionale Zusammenhang mit den unbekanntenen Gravitationsfeldkoeffizienten ist basierend auf Gleichung (4.21) herzustellen. Darüber hinaus lässt sich die lokale Genauigkeit der Invarianten über

Fehlerfortpflanzung aus den GG ermitteln gemäß

$$\Sigma_{I_1, I_2, I_3} = \begin{bmatrix} \sigma_{I_1}^2 & \sigma_{I_1 I_2} & \sigma_{I_1 I_3} \\ & \sigma_{I_2}^2 & \sigma_{I_2 I_3} \\ sym. & & \sigma_{I_3}^2 \end{bmatrix} = \mathbf{F} \Sigma_{\mathbf{v}} \mathbf{F}^T. \quad (5.5)$$

Die Fehlerfortpflanzungsmatrix \mathbf{F} wird mit den funktionalen Modellen (5.4)

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\partial I_1}{\partial V_{11}} & \cdots & \frac{\partial I_1}{\partial V_{33}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial I_3}{\partial V_{11}} & \cdots & \frac{\partial I_3}{\partial V_{33}} \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

Die erste Fundamentalinvariante: I_1 . Sie ist die Summe der drei Hauptdiagonalelemente der Gravitationstensormatrix. Die unbekanntenen Gravitationsfeldparameter treten linear auf, denn mit (5.4a) wird

$$\begin{aligned} I_1 &= V_{11} + V_{22} + V_{33} \\ &= \frac{GM}{R^3} \sum_{l_1=0}^L \sum_{m_1=0}^{l_1} \left(\frac{R}{r}\right)^{l_1+3} S_{l_1 m_1}(\varphi) [c_{l_1 m_1} \cos m_1 \lambda + s_{l_1 m_1} \sin m_1 \lambda]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Die Größe $S_{l_1 m_1}(\varphi)$ ist abgesehen von der Grad-Ordnung Kombination $l_1 m_1$ allein eine Funktion der Breite φ :

$$S_{l_1 m_1}(\varphi) = \left(l_1(l_1 + 1) - \frac{m_1^2}{\cos^2 \varphi} \right) P_{l_1 m_1} - \tan \varphi \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi^2}. \quad (5.8)$$

Gleichung (5.8) repräsentiert die Legendresche Differentialgleichung. Wie bereits erwähnt, kann die erste Invariante nicht als Beobachtungsgröße zur Gravitationsfeldbestimmung beitragen. Aus diesem Grunde wird sie für die weiteren Ausführungen dieses Kapitels sowie für die die numerischen Betrachtungen in Kapitel 8 außen vor gelassen.

Die zweite Fundamentalinvariante: I_2 . Sie ist die Summe aus sechs Produkten zwischen je zwei Elementen der Gravitationstensormatrix. Die unbekanntenen Gravitationsfeldparameter treten nicht-linear auf, denn mit (5.4b) wird

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{1}{2}(V_{11}^2 + V_{22}^2 + V_{33}^2) - V_{12}^2 - V_{13}^2 - V_{23}^2 \\ &= \left(\frac{GM}{R^3}\right)^2 \sum_{l_1=0}^L \sum_{m_1=0}^{l_1} \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \left(\frac{R}{r}\right)^{l_1+l_2+6} \left[\right. \\ &\quad K_{l_1 m_1 l_2 m_2}^1(\varphi) [-c_{l_1 m_1} \sin m_1 \lambda + s_{l_1 m_1} \cos m_1 \lambda] [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ &\quad \left. + K_{l_1 m_1 l_2 m_2}^2(\varphi) [c_{l_1 m_1} \cos m_1 \lambda + s_{l_1 m_1} \sin m_1 \lambda] [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] \right]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Die Nicht-Linearität entsteht durch die Produkte $c_{l_1 m_1} c_{l_2 m_2}$, $c_{l_1 m_1} s_{l_2 m_2}$ usw. Das heißt, es liegt eine Nicht-Linearität 1. Ordnung vor. In Darstellung (5.9) beziehen sich die Variablenkombinationen $l_1 m_1$ bzw. $l_2 m_2$ jeweils auf die Reihenentwicklung eines GG des Produktes der Form $V_{i_1 j_1} V_{i_2 j_2}$. Beispielhaft für das Produkt $V_{11} V_{11} = V_{11}^2$ ist $i_1 = j_1 = i_2 = j_2 = 1$ und weiter

$$\begin{aligned} V_{i_1 j_1} &= \sum_{l_1=0}^L \sum_{m_1=0}^{l_1} f_1(\lambda, \varphi, r; c_{l_1 m_1}, s_{l_1 m_1}), \\ V_{i_2 j_2} &= \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} f_2(\lambda, \varphi, r; c_{l_2 m_2}, s_{l_2 m_2}). \end{aligned}$$

Die breitenabhängigen Funktionen in (5.9) ergeben sich zu

$$K_{l_1 m_1 l_2 m_2}^1(\varphi) = -\frac{m_1 m_2}{\cos^2 \varphi} \left[\left(\tan \varphi P_{l_1 m_1} + \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} \right) \right. \\ \left. \left(\tan \varphi P_{l_2 m_2} + \frac{\partial P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi} \right) + (l_1 + 2)(l_2 + 2) P_{l_1 m_1} P_{l_2 m_2} \right], \quad (5.10)$$

$$K_{l_1 m_1 l_2 m_2}^2(\varphi) = -\frac{1}{2} \left[\left(-(l_1 + 1) P_{l_1 m_1} - \frac{m_1^2}{\cos^2 \varphi} P_{l_1 m_1} - \tan \varphi \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} \right) \right. \\ \left(-(l_2 + 1) P_{l_2 m_2} - \frac{m_2^2}{\cos^2 \varphi} P_{l_2 m_2} - \tan \varphi \frac{\partial P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi} \right) \\ + \left(-(l_1 + 1) P_{l_1 m_1} + \frac{\partial^2 P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi^2} \right) \left(-(l_2 + 1) P_{l_2 m_2} + \frac{\partial^2 P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi^2} \right) \\ + (l_1 + 2)(l_1 + 1)(l_2 + 2)(l_2 + 1) P_{l_1 m_1} P_{l_2 m_2} \\ \left. + 2(l_1 + 2)(l_2 + 2) \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} \frac{\partial P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi} \right]. \quad (5.11)$$

Es sei bemerkt, dass sich die zweite Invariante ausschließlich aus quadratischen Termen der einzelnen GG zusammensetzt. Dies wird durch die spezielle Struktur des Gravitationstensors bedingt. Aus der Spurfreiheit deren Koeffizientenmatrix resultiert das Verschwinden gemischter Produkte der Form $V_{11}V_{22}$, $V_{11}V_{33}$ und $V_{22}V_{33}$, vgl. (3.30b) gegenüber (3.31b).

Die dritte Fundamentalinvariante: I_3 . Sie ist die Summe aus fünf Produkten zwischen je drei Elementen der Gravitationstensormatrix. Die unbekanntenen Gravitationsfeldparameter treten nicht-linear auf, denn mit (5.4c) wird

$$I_3 = V_{11}V_{22}V_{33} + 2V_{12}V_{13}V_{23} - V_{11}V_{23}^2 - V_{22}V_{13}^2 - V_{33}V_{12}^2 \\ = \left(\frac{GM}{R^3} \right)^3 \sum_{l_1=0}^L \sum_{m_1=0}^{l_1} \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \sum_{l_3=0}^L \sum_{m_3=0}^{l_3} \left(\frac{R}{r} \right)^{l_1+l_2+l_3+9} \left[\right. \\ D_{l_1 m_1 l_2 m_2 l_3 m_3}^1(\varphi) [c_{l_1 m_1} \cos m_1 \lambda + s_{l_1 m_1} \sin m_1 \lambda] [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ [-c_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda] \\ + D_{l_1 m_1 l_2 m_2 l_3 m_3}^2(\varphi) [c_{l_1 m_1} \cos m_1 \lambda + s_{l_1 m_1} \sin m_1 \lambda] [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] \\ \left. [c_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda] \right]. \quad (5.12)$$

Im Gegensatz zu I_2 liegt in (5.12) mit den Produkten $c_{l_1 m_1} c_{l_2 m_2} c_{l_3 m_3}$ usw. eine Nicht-Linearität 2. Ordnung vor. Entsprechend den vorigen Ausführungen beziehen sich die Variablenkombinationen $l_1 m_1$, $l_2 m_2$ bzw. $l_3 m_3$ jeweils auf die Reihenentwicklung eines GG des Produktes der Form $V_{i_1 j_1} V_{i_2 j_2} V_{i_3 j_3}$. Die breitenabhängigen Funktionen in (5.12) lauten

$$D_{l_1 m_1 l_2 m_2 l_3 m_3}^1(\varphi) = \frac{m_2 m_3}{\cos^2 \varphi} \left[\right. \\ 2(l_1 + 2)(l_2 + 2) \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} P_{l_2 m_2} \left(\tan \varphi P_{l_3 m_3} + \frac{\partial P_{l_3 m_3}}{\partial \varphi} \right) \\ - (l_2 + 2)(l_3 + 2) P_{l_2 m_2} P_{l_3 m_3} \left(\frac{\partial^2 P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi^2} - (l_1 + 1) P_{l_1 m_1} \right) \\ - (l_1 + 2)(l_1 + 1) P_{l_1 m_1} \\ \left. \left(\tan \varphi P_{l_2 m_2} + \frac{\partial P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi} \right) \left(\tan \varphi P_{l_3 m_3} + \frac{\partial P_{l_3 m_3}}{\partial \varphi} \right) \right], \quad (5.13)$$

$$D_{l_1 m_1 l_2 m_2 l_3 m_3}^2(\varphi) = (l_3 + 2) \left(-(l_1 + 1) P_{l_1 m_1} - \frac{m_1^2}{\cos^2 \varphi} P_{l_1 m_1} - \tan \varphi \frac{\partial P_{l_1 m_1}}{\partial \varphi} \right) \\ \left((l_3 + 1) P_{l_3 m_3} \left(\frac{\partial^2 P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi^2} - (l_2 + 1) P_{l_2 m_2} \right) - (l_2 + 2) \frac{\partial P_{l_2 m_2}}{\partial \varphi} \frac{\partial P_{l_3 m_3}}{\partial \varphi} \right). \quad (5.14)$$

In (5.12) sind keine kubischen Terme der GG enthalten. Vielmehr ergibt sich die Nicht-Linearität 2. Ordnung ausschließlich aus gemischten Produkten zwischen den GG. Einerseits sind in diesen quadratische Terme jeweils eines GG enthalten — genauer gesagt treten hier die Nebendiagonalelemente der Koeffizientenmatrix \mathbf{V} quadratisch und diejenigen der Hauptdiagonalelemente linear auf. Andererseits enthält I_3 sowohl das Produkt der drei Haupt- als auch der drei Nebendiagonalelemente der symmetrischen Matrix \mathbf{V} .

5.4 Linearisierung

Wie zuvor gezeigt, ist bezüglich des Invariantensystems $\{I_1, I_2, I_3\}$ nur die erste Invariante I_1 linear in den unbekanntem Modellparametern. Die Nicht-Linearität nimmt für I_2 und I_3 jeweils um eine Ordnung zu. Um dennoch den Invariantenansatz im Rahmen einer linearen Ausgleichsrechnung zu behandeln, müssen die funktionalen Modelle (5.9) und (5.12) entsprechend linearisiert werden. Die Güte der Linearisierung lässt sich dabei beurteilen anhand folgender Kriterien:

- Größe des Linearisierungsfehlers
- Konvergenzverhalten
- Rechentechnischer Aufwand

Vor allem hinsichtlich des letzt genannten Aspekts werden im Folgenden zwei Möglichkeiten der Linearisierung behandelt.

Brute-force Linearisierung. Die strenge Linearisierung, hier als brute-force Linearisierung (BFL) bezeichnet, setzt an der Modellierung der Invarianten in Abhängigkeit der unbekanntem Koeffizienten c_{lm} und s_{lm} an. Die lineare Approximation der funktionalen Modelle gemäß Kapitel 5.3 wird durch die Bildung der partiellen Ableitungen nach den Unbekanntem erreicht. Speziell für die zweite Invariante muss ausgehend von (5.9) nach den Größen $c_{l_1 m_1}$, $s_{l_1 m_1}$, $c_{l_2 m_2}$ und $s_{l_2 m_2}$ differenziert werden. Die partielle Ableitung nach einem bestimmten Modellparameter wird im Folgenden mit den Variablen $v = \text{const}$ und $w = \text{const}$ angedeutet. Sie lauten somit

$$\frac{\partial I_2}{\partial c_{vw}} = \frac{\partial I_2}{\partial c_{l_1=v, m_1=w}} + \frac{\partial I_2}{\partial c_{l_2=v, m_2=w}}, \quad (5.15a)$$

$$\frac{\partial I_2}{\partial s_{vw}} = \frac{\partial I_2}{\partial s_{l_1=v, m_1=w}} + \frac{\partial I_2}{\partial s_{l_2=v, m_2=w}}. \quad (5.15b)$$

Daraus ergibt sich die Linearisierung von (5.9) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_2}{\partial c_{vw}} = & \left(\frac{GM}{R^3} \right)^2 \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \left(\frac{R}{r} \right)^{v+l_2+6} \left[\right. \\ & - (K_{vw l_2 m_2}^1(\varphi) + K_{l_2 m_2 vw}^1(\varphi)) \sin \omega \lambda [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ & \left. + (K_{vw l_2 m_2}^2(\varphi) + K_{l_2 m_2 vw}^2(\varphi)) \cos \omega \lambda [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] \right], \end{aligned} \quad (5.16a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_2}{\partial s_{vw}} = & \left(\frac{GM}{R^3} \right)^2 \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \left(\frac{R}{r} \right)^{v+l_2+6} \left[\right. \\ & (K_{vw l_2 m_2}^1(\varphi) + K_{l_2 m_2 vw}^1(\varphi)) \cos \omega \lambda [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ & \left. + (K_{vw l_2 m_2}^2(\varphi) + K_{l_2 m_2 vw}^2(\varphi)) \sin \omega \lambda [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] \right]. \end{aligned} \quad (5.16b)$$

Zur Linearisierung von I_3 muss ausgehend von (5.12) nach den Größen $c_{l_1 m_1}$, $s_{l_1 m_1}$, $c_{l_2 m_2}$, $s_{l_2 m_2}$, $c_{l_3 m_3}$ und $s_{l_3 m_3}$ differenziert werden. Analog zu (5.15) setzen sich die partiellen Ableitungen nach einem bestimmten Unbekanntemparameter zusammen aus

$$\frac{\partial I_3}{\partial c_{vw}} = \frac{\partial I_3}{\partial c_{l_1=v, m_1=w}} + \frac{\partial I_3}{\partial c_{l_2=v, m_2=w}} + \frac{\partial I_3}{\partial c_{l_3=v, m_3=w}}, \quad (5.17a)$$

$$\frac{\partial I_3}{\partial s_{vw}} = \frac{\partial I_3}{\partial s_{l_1=v, m_1=w}} + \frac{\partial I_3}{\partial s_{l_2=v, m_2=w}} + \frac{\partial I_3}{\partial s_{l_3=v, m_3=w}}. \quad (5.17b)$$

Die Linearisierung von (5.12) wird daraus resultierend zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_3}{\partial c_{vw}} = & \left(\frac{GM}{R^3} \right)^3 \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \sum_{l_3=0}^L \sum_{m_3=0}^{l_3} \left(\frac{R}{r} \right)^{v+l_2+l_3+9} \left[\right. \\ & D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^1(\varphi) \cos w\lambda \\ & [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] [-c_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda] \\ & - (D_{l_3 m_3 v w l_2 m_2}^1(\varphi) + D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^1(\varphi)) \sin w\lambda \\ & [c_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda] [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ & + (D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^2(\varphi) + D_{l_2 m_2 v w l_3 m_3}^2(\varphi) + D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^2(\varphi)) \cos w\lambda \\ & \left. [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] [c_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda] \right], \end{aligned} \quad (5.18a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_3}{\partial s_{vw}} = & \left(\frac{GM}{R^3} \right)^3 \sum_{l_2=0}^L \sum_{m_2=0}^{l_2} \sum_{l_3=0}^L \sum_{m_3=0}^{l_3} \left(\frac{R}{r} \right)^{v+l_2+l_3+9} \left[\right. \\ & D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^1(\varphi) \sin w\lambda \\ & [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] [-c_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda] \\ & + (D_{l_3 m_3 v w l_2 m_2}^1(\varphi) + D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^1(\varphi)) \cos w\lambda \\ & [c_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda] [-c_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda] \\ & + (D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^2(\varphi) + D_{l_2 m_2 v w l_3 m_3}^2(\varphi) + D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^2(\varphi)) \sin w\lambda \\ & \left. [c_{l_2 m_2} \cos m_2 \lambda + s_{l_2 m_2} \sin m_2 \lambda] [c_{l_3 m_3} \cos m_3 \lambda + s_{l_3 m_3} \sin m_3 \lambda] \right]. \end{aligned} \quad (5.18b)$$

Zu bemerken ist, dass $K_{vw l_2 m_2}^1(\varphi)$ symmetrisch ist, das heißt es gilt

$$K_{vw l_2 m_2}^1(\varphi) = K_{l_2 m_2 v w}^1(\varphi).$$

Jedoch tritt keine entsprechende Symmetrie für $K_{vw l_2 m_2}^2(\varphi)$ und den Summanden der dritten Invarianten auf:

$$\begin{aligned} K_{vw l_2 m_2}^2(\varphi) & \neq K_{l_2 m_2 v w}^2(\varphi), \\ D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^1(\varphi) & \neq D_{l_3 m_3 v w l_2 m_2}^1(\varphi) \neq D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^1(\varphi), \\ D_{vw l_2 m_2 l_3 m_3}^2(\varphi) & \neq D_{l_3 m_3 v w l_2 m_2}^2(\varphi) \neq D_{l_3 m_3 l_2 m_2 v w}^2(\varphi). \end{aligned}$$

Für den Iterationsstart der Invariantenanalyse ist eine Näherungslösung der Unbekanntenparameter erforderlich. Im Falle der terrestrischen Gravitationsfeldbestimmung steht dafür eine Vielzahl von Modellen zur Verfügung.

Um die Gesamtheit der partiellen Ableitungen zu erfassen, müssen in (5.16) und (5.18) jeweils alle Kombinationen (v, w) mit $v = 0, \dots, L$ und $w = 0, \dots, v$ evaluiert werden. Die Berechnung des linearisierten funktionalen Modells resultiert damit in einer vierfach (I_2) bzw. sechsfach (I_3) verschachtelten Schleife. Der Aufwand zur Berechnung der Invarianten (bzw. ihrer Linearisierung) ergibt sich gemessen an der Anzahl der Schleifendurchgänge wie folgt. Die Auswertung einer Doppelsumme bis zum maximalen Entwicklungsgrad L erfordert $(L(L+1)/2)$ Schleifendurchgänge, entsprechend eine Vierfachsumme $(L(L+1)/2)^2$ und eine Sechsfachsumme $(L(L+1)/2)^3$ Schleifendurchgänge. Für $L = 200$ ergibt dies Werte in der Größenordnung von 10^4 , 10^8 bzw. 10^{12} . Diese Tatsache, kombiniert mit einem iterativen Lösungsprozess lässt die Invariantenanalyse basierend auf der BFL vom rechentechnischen Standpunkt aus nur für eine moderate Auflösung des Gravitationsspektrums zu.

Frühzeitiger Reihenabbruch. Für hochauflösende Gravitationsfelder muss die exakte Berechnung der partiellen Ableitungen approximiert werden unter dem Gesichtspunkt, die Anzahl der notwendigen Schleifendurchgänge zu minimieren. Dazu hat sich die hier als frühzeitiger Reihenabbruch deklarierte Maßnahme als äußerst zweckmäßig erwiesen. Mit Bezug auf die Invariantenberechnung (5.9) und (5.12) wird die enorm rechenzeitaufwändige strenge Berechnung durch den frühzeitigen Abbruch der inneren Schleifen umgangen gemäß

$$l_{1\max} = L, \quad l_{2\max}, \quad l_{3\max} = L^{\text{ref}} < L. \quad (5.19)$$

Entsprechendes gilt für die Evaluierung der partiellen Ableitungen (5.16) und (5.18). Zu deren Berechnung liegt im Zuge des frühzeitigen Reihenabbruchs die Entwicklung des Näherungsfeldes bis zu einem bestimmten Grad $L^{\text{ref}} < L$ zugrunde. Letztlich entspricht dies einer Approximation der partiellen Ableitungen im Vergleich zu deren exakten Berechnung ($L^{\text{ref}} = L$). Es ist von fundamentaler Bedeutung, dass ein iteratives Vorgehen der abgebrochenen BFL keinen Sinn macht. Angenommen zur Linearisierung werden ausschließlich die „wahren“ Modellparameter bis zum Grad $L^{\text{ref}} \ll L$ verwendet. So können auch nach mehrfachen Iterationen die Parameter mit Grad größer als L^{ref} im Vergleich zur ersten Iteration nicht verbessert werden. Denn die Berechnung der partiellen Ableitungen erfolgt stets basierend auf der selben Approximation. Ein iteratives Vorgehen macht nur dann Sinn, wenn ab der zweiten Iteration der gesamte (oder zumindest ein erweiterter) Spektralbereich zur Linearisierung heran gezogen wird. Dann allerdings muss der frühzeitige Reihenabbruch verworfen werden.

Linearisierung über die Störungsrechnung. Die angesprochene rechentechnische Problematik lässt sich weit einfacher durch eine andere Wahl der Linearisierung beheben. Dazu wird die Linearisierung der Invarianten im Sinne einer Störungsrechnung vollzogen. Mit Beschränkung auf die zweite und dritte Invariante I_2 bzw. I_3 lautet die entsprechende Störung

$$\delta I_2 = I_2 - I_2^{\text{ref}}, \quad (5.20)$$

$$\delta I_3 = I_3 - I_3^{\text{ref}}. \quad (5.21)$$

Die Referenzwerte I_2^{ref} bzw. I_3^{ref} der Invarianten fundieren auf einem a priori bekannten Gravitationsfeld, bezüglich dessen die GG mit $\underline{U} = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j U_{ij}$ gegeben sind. Das tatsächliche Gravitationsfeld setzt sich zusammen aus dem Referenzfeld und einem unbekanntem Störfeld. Bezogen auf letzteres seien die GG mit $\delta \underline{V} = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \delta V_{ij}$ bezeichnet. Auf dem Niveau der GG gilt somit $V_{ij} = U_{ij} + \delta V_{ij}$. Durch Einsetzen in (5.20) und (5.21) werden die Invariantenstörungen zu

$$\begin{aligned} \delta I_2 &= I_2 - I_2^{\text{ref}} & (5.22) \\ &= -\frac{1}{2}(V_{11}^2 + V_{22}^2 + V_{33}^2) - V_{12}^2 - V_{13}^2 - V_{23}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}(U_{11}^2 + U_{22}^2 + U_{33}^2) + U_{12}^2 + U_{13}^2 + U_{23}^2 \\ &= -\frac{1}{2}(U_{11} + \delta V_{11})^2 - \frac{1}{2}(U_{22} + \delta V_{22})^2 - \frac{1}{2}(U_{33} + \delta V_{33})^2 \\ &\quad - (U_{12} + \delta V_{12})^2 - (U_{13} + \delta V_{13})^2 - (U_{23} + \delta V_{23})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}(U_{11}^2 + U_{22}^2 + U_{33}^2) + U_{12}^2 + U_{13}^2 + U_{23}^2 \\ &= -U_{11}\delta V_{11} - U_{22}\delta V_{22} - U_{33}\delta V_{33} & (5.23) \\ &\quad - 2(U_{12}\delta V_{12} + U_{13}\delta V_{13} + U_{23}\delta V_{23}) + \mathcal{O}^2(\delta V_{ij}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta I_3 &= I_3 - I_3^{\text{ref}} & (5.24) \\ &= V_{11}V_{22}V_{33} + 2V_{12}V_{13}V_{23} - V_{11}V_{23}^2 - V_{22}V_{13}^2 - V_{33}V_{12}^2 \\ &\quad - (U_{11}U_{22}U_{33} + 2U_{12}U_{13}U_{23} - U_{11}U_{23}^2 - U_{22}U_{13}^2 - U_{33}U_{12}^2) \\ &= U_{11}U_{22}\delta V_{33} + U_{11}\delta V_{22}U_{33} + \delta V_{11}U_{22}U_{33} & (5.25) \\ &\quad + 2(U_{12}U_{13}\delta V_{23} + U_{12}\delta V_{13}U_{23} + \delta V_{12}U_{13}U_{23}) \\ &\quad - \delta V_{11}U_{23}^2 - \delta V_{22}U_{13}^2 - \delta V_{33}U_{12}^2 \\ &\quad - 2(U_{11}U_{23}\delta V_{23} + U_{22}U_{13}\delta V_{13} + U_{33}U_{12}\delta V_{12}) + \mathcal{O}^2(\delta V_{ij}) + \mathcal{O}^3(\delta V_{ij}). \end{aligned}$$

Gleichung (5.23) stellt die linearisierte Störung in I_2 dar. Die quadratischen Terme in den Größen δV_{ij} sind vernachlässigt. Für die Störung δI_3 gilt analog (5.25). Vernachlässigung der quadratischen und kubischen Terme in den Störgradienten führt auf die lineare Approximation. Zur Linearisierung über die Störungsrechnung bedarf es einer Synthese der Referenzgradienten U_{ij} . In der ersten Iteration ist dafür externe Gravitationsfeldinformation notwendig. Von der zweiten Iteration an findet das Ergebnis der vorherigen Parameterschätzung Eingang zur Aufstellung des linearisierten Modells. Dabei ist erneut zu bemerken, dass ein möglichst effektives iteratives Vorgehen genau dann gegeben ist, falls zur Berechnung der partiellen Ableitungen die Referenzgradienten bis zum Grad $L^{\text{ref}} = L$ entwickelt werden.

Abschließende Bemerkungen. Die Linearisierung über die Störungsrechnung kann mit der BFL in Einklang gebracht werden. Dazu wird die Doppelsummenentwicklung der Referenzgradienten U_{ij} in (5.23) bzw. (5.25) eingesetzt und die resultierenden Terme zusammen gefasst. Letztlich wird damit wiederum (5.16a) bis (5.18b) erhalten. Die Referenzlösung (Näherungslösung) für die Linearisierung ist dort mit den Koeffizienten $c_{l_2 m_2}$, $s_{l_2 m_2}$ bzw. $c_{l_2 m_2}$, $s_{l_2 m_2}$, $c_{l_3 m_3}$, $s_{l_3 m_3}$ zu identifizieren. Der frühzeitige Reihenabbruch (5.19) findet sein Äquivalent im frühzeitigen Reihenabbruch der angesprochenen Synthese von Referenzgradienten.

Vom rechentechnischen Blickwinkel aus betrachtet, müssen für die Linearisierung über die Störungsrechnung lediglich die Referenzgradienten U_{ij} bereit gestellt werden. Dies erweist sich als weit weniger problematisch als die enorm aufwändige Evaluierung mehrfach verschachtelter Schleifen der BFL. Deren Berechnung erfolgt sinnvollerweise im Initialisierungsschritt einer jeden Iteration. Der zusätzliche Aufwand pro Iteration im Vergleich zum klassischen Analyseansatz in Kapitel 4 manifestiert sich folglich in einer Synthese der GG. Er ist abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes. Solange die Konvergenz des iterativen Prozesses nicht gefährdet wird, bewirkt die Wahl von $L^{\text{ref}} < L$ im schlimmsten Falle ein verlangsamtes Konvergenzverhalten. Damit würde gleichsam die Anzahl der notwendigen Iterationen zur Lösungsfindung ansteigen — ein freilich kontraproduktiver Effekt. Mit $L^{\text{ref}} = L$ wird die bestmögliche Linearisierung erreicht. Tatsächlich erweist sich, wie in Kapitel 8.6 gezeigt wird, der Linearisierungsfehler aufgrund des Reihenabbruchs als äußerst klein. Bereits die Ergebnisse nach der ersten Iteration ergeben für ein realitätsnahes Linearisierungsfeld eine sehr gute Approximation. Für eine reduzierte Genauigkeitsanforderung sind keine weiteren Iterationen notwendig. Darüber hinaus kann die Wahl von $L^{\text{ref}} < L$ den numerischen Aufwand soweit reduzieren, dass ein vorab definiertes Genauigkeitslimit eingehalten wird.

Wie bereits angeklungen, hängt die Größe des Linearisierungsfehlers weiterhin von der Güte des Linearisierungsfeldes ab. Im Falle der Erdgravitationsfeldanalyse kann als grobe Näherung beispielsweise das Normalfeld verwendet werden. Darüber hinaus liefern die GRACE Lösungen eine vortreffliche a priori Information. Da deren Auflösung auf den lang- und mittelwelligen Anteil des terrestrischen Kraftfeldes beschränkt ist, finden im hochfrequenten Bereich kombinierte Modelle Eingang.

5.5 Synthese unbeobachteter Gravitationsgradienten

Eine Folge des ersten Fundamentalsatzes der Invariantentheorie ist, dass kein vollständiges Invariantensystem $\{\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3\}$ derart existiert, dass sich mit Ausnahme der Spur einer Tensorcoeffizientenmatrix \mathbf{A} die Invariante \mathcal{J}_i nur aus einem Teil der Elemente A_{ij} zusammensetzt. Vielmehr sind die Invarianten eine Funktion aller Tensorelemente, infolgedessen sich deren Genauigkeit aus der Genauigkeit aller einzelnen GG ergibt. Dieser Aspekt ist für die Volltensordiometrie irrelevant. Denn in diesem Falle werden alle GG mit vergleichbarem Genauigkeitsniveau beobachtet. Für die allgemeine Gradiometrie kann dies jedoch nicht zwingend gewährleistet werden. Abhängig von der Beobachtungskonfiguration können bestimmte GG in ihrer Genauigkeit stark reduziert sein bzw. gelten als unbeobachtet für den praktischen Gebrauch. Damit entsteht das Problem, dass die Invarianten als Pseudo-Beobachtungen nur grob fehlerhaft evaluierbar sind (gemessen an den mit höchster Genauigkeit bereit gestellten GG). Die Gravitationsfeldanalyse basierend auf „falschen“ Beobachtungen führt zu einer „falschen“ Schätzung der Modellparameter. Im Folgenden wird ein Verfahren vorgestellt, um diesem fehlerhaften Einfluss entgegen zu wirken. Es gründet auf der Synthese nicht (bzw. mit limitierter Genauigkeit) beobachteter GG, welche als gradiometrische Vorinformation (GV) bezeichnet werden.

Die synthetische Bereitstellung von GG sei am Beispiel der GOCE Mission verdeutlicht. Wie in Kapitel 8 ausgeführt, lassen sich die Tensorelemente V_{12} und V_{23} nur mit stark reduzierter Genauigkeit beobachten im Vergleich zu den weiteren GG. Sie sind infolgedessen für den praktischen Gebrauch innerhalb der Invariantenanalyse nicht zu gebrauchen. Für eine möglichst genaue Modellierung der unbekanntem Gravitationsfeldparameter darf ihr Informationsgehalt jedoch nicht falsch wieder gegeben oder gar vernachlässigt werden. Abbildung 5.1 zeigt die Vorgehensweise, diese Elemente von Iteration zu Iteration in Form von gradiometrischer Vorinformation bereit zu stellen. Prinzipiell wird dabei die aktuelle Schätzung $\hat{\mathbf{x}}_{i-1}$ der Gravitationsfeldbestimmung zur synthetischen Berechnung der unbekanntem GG hergenommen. Basierend auf diesen synthetischen Werten erfolgt die Berechnung der Invarianten. Die verbesserte Näherungslösung $\hat{\mathbf{x}}_i$ dient als Grundlage zur neuerlichen Aufstellung der unbekanntem GG in der darauffolgenden Iteration. Allein für die erste Iteration fließt in Form der Näherungslösung $\hat{\mathbf{x}}_0$ externe a priori Information ein.

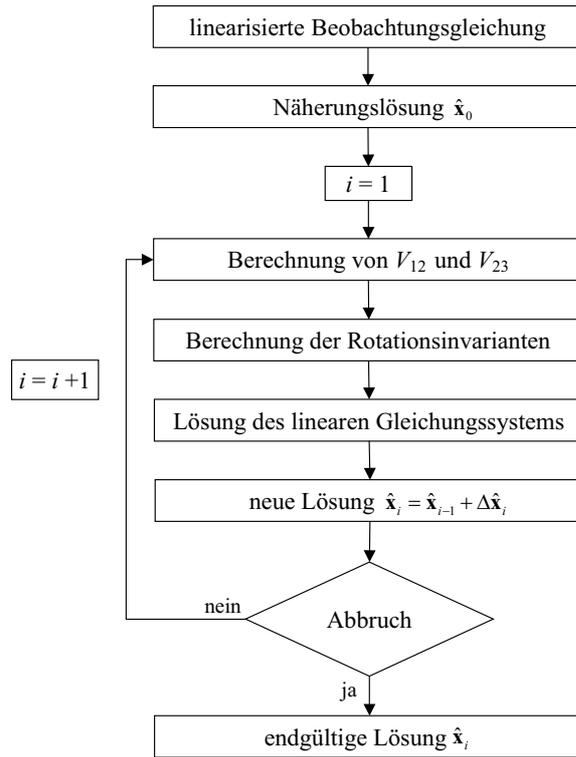


Abbildung 5.1: Synthese unbeobachteter GG

Für die Größenordnung der GG V_{12} und V_{23} gilt

$$V_{12}, V_{23} \ll V_{11}, V_{22}, V_{33}. \quad (5.26)$$

Sie nehmen damit nur einen sehr kleinen Einfluss auf die Invariantenberechnung im Vergleich zu den mit hoher Genauigkeit beobachteten Hauptdiagonalelementen des Gravitationstensors. Das heißt der Entwicklungsgrad L^{syn} der Synthese kann mit $L^{\text{syn}} \ll L$ bereits frühzeitig abgebrochen werden. Des weiteren bedingt (5.26), dass sich der iterative Prozess als wenig sensitiv erweist gegenüber der Wahl von \mathbf{x}_0 . Für die erste Iteration können die GG V_{12} und V_{23} gar zu null gesetzt werden. Zwar liefert dies ein schlechteres Ergebnis als die Einführung einer realitätsnahen Näherungslösung. Doch wirken sich die Startwerte $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ unsignifikant auf den weiteren Berechnungsprozess aus — vorausgesetzt ab der zweiten Iteration wird gemäß Abb. 5.1 verfahren. Dies findet in der Numerik in Kapitel 8.7 seine Bestätigung. Darin eröffnet sich im übrigen ein weiteres Argument die favorisierte Wahl der Invariantensysteme $\{I_1, I_2, I_3\}$ bzw. $\{J_1, J_2, J_3\}$ im Vergleich zu alternativen Basissystemen.

Abschließend sei bemerkt, dass sowohl die Berechnung der unbekanntenen GG als auch der Referenzgradienten für die Linearisierung über die Störungsrechnung in der Initialisierungsphase vor jeder Iteration erfolgt. Der numerische Aufwand kann zusammen gefasst werden mit:

- Linearisierung (Störungsrechnung): Synthese der U_{ij} bis Grad $L^{\text{ref}} \leq L$,
- Gradiometrische Vorinformation: Synthese der GG V_{12}, V_{23} bis Grad $L^{\text{syn}} \leq L$.

Im Initialisierungsschritt je Iteration fällt folglich die Synthese von GG bis zum maximalen Entwicklungsgrad $\max\{L^{\text{ref}}, L^{\text{syn}}\} \leq L$ an.

6. Die direkte Lösungsmethode

Der Umgang mit großdimensionierten linearen (oder linearisierten) Gleichungssystemen tritt heutzutage in den verschiedensten wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Problemstellungen auf. Dabei steht im Allgemeinen einer Vielzahl von Beobachtungen eine weit kleinere Zahl an unbekanntem Modellparametern gegenüber. Typischerweise wird die Lösung derartiger Systeme im Rahmen einer Ausgleichung nach der Methode der kleinsten Quadrate angegangen (Grafarend & Schaffrin 1993, Koch 1999). Neben den klassischen Wissenschaftsfeldern rund um die numerische Strömungsmechanik (CFD, Computational Fluid Dynamics) treten derartige Problemstellungen ebenso in der Thermodynamik, Chemie, Physik, Astronomie, Geophysik, den Wirtschaftswissenschaften etc. und letztlich auch in der Geodäsie auf.

Dabei liefert die Gravitationsfeldbestimmung vom rein mathematischen Standpunkt aus kein überbestimmtes, sondern vielmehr ein unterbestimmtes Ausgleichungsproblem. Gemäß (4.8) ist die Anzahl der unbekanntem Parameter nicht endlich. Erst durch die Definition des maximalen Entwicklungsgrades $L < \infty$, erfolgt die Umformulierung in eine überbestimmte Problemstellung. Dies jedoch hat zur Folge, dass die Schätzung der unbekanntem Parameter eine verzerrte Lösung bereit stellt. Deshalb liegt der Gedanke nahe, eine minimal verzerrte Lösung anzustreben, was im Gegensatz zur Ausgleichung nach der Methode der kleinsten Quadrate, auf die Bedingung des minimalen Bias führt (Grafarend 2006). Andererseits gehen für real anfallende Beobachtungen kurzweilige Spektralanteile jenseits des maximalen Entwicklungsgrades L im Messrauschen unter und sind somit nicht auflösbar. Aus diesem Grunde erfolgt die Bestimmung der Gravitationsfeldparameter typischerweise im Rahmen überbestimmter Gleichungssysteme. Entsprechend wird mit den funktionalen Zusammenhängen in den Kapiteln 4 und 5 verfahren.

Die Lösung eines derartigen LS Problems durch die Aufstellung und Inversion des zugehörigen Normalgleichungssystems wird als die direkte Lösungsmethode — oder auch brute-force Ansatz — bezeichnet. Diese wird in Kapitel 6.1 vorgestellt. Kapitel 6.2 befasst sich mit der Regularisierung des Minimierungsproblems für die Behandlung schlecht konditionierter Systeme.

6.1 Aufstellung des Normalgleichungssystems

Ein lineares überbestimmtes Gleichungssystem nimmt als Standard Gauß-Markov Modell die Form

$$E(\mathbf{y}) = \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{r}, \quad D(\mathbf{y}) = \mathbf{\Sigma} = \sigma^2\mathbf{P}^{-1} \quad (6.1)$$

an. Darin bringt die Designmatrix $\mathbf{A}(n \times u)$ den unbekanntem Parametervektor $\mathbf{x}(u \times 1)$ mit dem Vektor der Beobachtungen $\mathbf{y}(n \times 1)$ in Verbindung. Die Designmatrix beinhaltet den funktionalen Zusammenhang zwischen den beiden Vektoren und setzt sich aus den partiellen Ableitungen der Beobachtungsmodellierung nach den unbekanntem Gravitationsfeldparametern zusammen. Für ein exakt bestimmtes System ($n = u$) ist die Berechnung des Unbekanntemvektors eindeutig. Gilt jedoch $n > u$, so ist (6.1) nicht eindeutig invertierbar, vielmehr findet sich auf der rechten Seite des funktionalen Modells die Summe aus dem Beobachtungsvektor und dem Residuenvektor \mathbf{r} . Die Dispersion (oder Varianz-Kovarianzmatrix) der Beobachtungen $D(\mathbf{y}) = \mathbf{\Sigma}$ ist das Produkt aus dem a priori Varianzfaktor (Varianz der Gewichtseinheit) σ^2 und der inversen, positiv definiten Gewichtsmatrix \mathbf{P} . Die LS Schätzung der Unbekanntem erfolgt über die Minimierung der L_2 Norm des Residuenvektors

$$\min \|\mathbf{r}\|^2 = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathbf{\Sigma}^{-1}}^2. \quad (6.2)$$

Die Minimierungsaufgabe (6.2) ist gleichbedeutend mit

$$\frac{\partial(\mathbf{r}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{r})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} [(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y})] = 0 \quad (6.3)$$

bzw.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} [\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}] = 0, \quad (6.4)$$

woraus unmittelbar das Normalgleichungssystem resultiert mit

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{A} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}, \quad (6.5a)$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{y}, \quad (6.5b)$$

$$\mathbf{N} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}. \quad (6.5c)$$

Die beste lineare erwartungstreue Schätzung (BLUE, Best Linear Unbiased Estimate) des Unbekanntenvektors liefert die Inversion von (6.5) zu

$$\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{y} = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{b}. \quad (6.6)$$

Darüber hinaus wird die Varianz-Kovarianzinformation der Schätzung bereit gestellt mit

$$D(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{\mathbf{r}^T \mathbf{P} \mathbf{r}}{n - u} (\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A})^{-1} = \hat{\sigma}^2 (\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A})^{-1} = \hat{\sigma}^2 \mathbf{N}^{-1}, \quad (6.7)$$

worin die erwartungstreue Schätzung der Varianz der Gewichtseinheit enthalten ist mit $\hat{\sigma}^2 = \frac{\mathbf{r}^T \mathbf{P} \mathbf{r}}{n - u}$.

Die entsprechende LS Schätzung eines linearisierten Gleichungssystems liest sich ausgehend von (6.2)

$$\min \|\mathbf{r}_i\|^2 = \min_{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i} \|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) - (\mathbf{y} - \mathbf{y}_i)\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 = \min_{\Delta \mathbf{x}_i} \|\mathbf{A} \Delta \mathbf{x}_i - \Delta \mathbf{y}_i\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2. \quad (6.8)$$

Analog zu obigen Ausführungen resultiert daraus das linearisierte Normalgleichungssystem

$$\mathbf{N} \Delta \hat{\mathbf{x}}_i = \Delta \mathbf{b}_i. \quad (6.9)$$

Die Auflösung der Zielfunktion erfolgt iterativ. Dabei wird in jeder Iteration i der funktionale Zusammenhang zwischen dem Unbekanntenvektor \mathbf{x} und dem Beobachtungsvektor \mathbf{y} mit der Näherungslösung \mathbf{x}_i linearisiert. Für $i = 0$ muss die Näherungslösung als externe Information bereit gestellt werden. Für die weiteren Iterationen gilt $\hat{\mathbf{x}}_i = \hat{\mathbf{x}}_{i-1} + \Delta \hat{\mathbf{x}}_i$. Bei Konvergenz des iterativen Prozesses ist $\lim \Delta \mathbf{x}_{i \rightarrow \infty} = \mathbf{0}$. Die reduzierten Beobachtungen $\Delta \mathbf{y}_i = \mathbf{y} - \mathbf{y}_i$ stellen sich aus der Differenz zwischen dem tatsächlichen Beobachtungsvektor und demjenigen basierend auf der Näherungslösung ein. Weiter ist $\Delta \mathbf{b}_i = \mathbf{A}^T \mathbf{P} \Delta \mathbf{y}_i$. Für die Handhabung nicht-linearer Ausgleichungsprobleme sei zudem auf Lohse (1994) verwiesen.

Dekorrelation. Zunächst sei von unkorrelierten, gleich genauen Beobachtungen ausgegangen, womit sich in (6.6) die Gewichtsmatrix zur Einheitsmatrix vereinfacht, $\mathbf{P} = \mathbf{I}$. Die Inversion des Normalgleichungssystems geht mit der Inversion von $\mathbf{N} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ einher. Die Normalgleichungsmatrix ist symmetrisch und positiv definit, womit die Inversion sehr effizient durch Cholesky Zerlegung zu erreichen ist. Die Dimension von \mathbf{N} ist mit $(u \times u)$ im Allgemeinen wesentlich geringer als die Dimension $(n \times u)$ der Designmatrix \mathbf{A} , da $u \leq n$ gilt und für stark überbestimmte LS Probleme gar $u \ll n$ wird. Um deshalb den speichertechnischen Aufwand zur Realisierung der direkten Lösungsmethode so gering wie möglich zu halten, kann der Aufbau des Normalgleichungssystems durch blockweise Verarbeitung der Designmatrix erfolgen:

$$\mathbf{N} = \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_1 + \dots + \mathbf{A}_j^T \mathbf{A}_j = \sum_{i=1}^j \mathbf{A}_i^T \mathbf{A}_i = \sum_{i=1}^j \mathbf{N}_i, \quad (6.10)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}_1^T \mathbf{y}_1 + \dots + \mathbf{A}_j^T \mathbf{y}_j = \sum_{i=1}^j \mathbf{A}_i^T \mathbf{y}_i = \sum_{i=1}^j \mathbf{b}_i. \quad (6.11)$$

Dabei nimmt die Zeilendimension d jeder Blockmatrix $\mathbf{A}_i (d \times u)$, $i = 1, 2, \dots, j$ (mit $j = \frac{n}{d}$) einen beliebigen ganzzahligen Wert $1 \leq d \leq n$ an und ist für praktische Anwendungen derart zu wählen, dass $d \ll n$ gilt. Letztlich dominiert aus speichertechnischer Sicht für die direkte Lösungsmethode die Dimension des Unbekanntenvektors und damit stellen sich die Anforderungen nach Tabelle 1.2 ein.

Für $\mathbf{P} \neq \mathbf{I}$ sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- Unkorrelierte, jedoch unterschiedlich genaue Beobachtungen:
Die Gewichtsmatrix \mathbf{P} nimmt Diagonalstruktur an, womit zur Evaluierung des Produktes $\mathbf{A}^T \mathbf{P}$ in (6.5b) lediglich jede Zeile \mathbf{a}_j von \mathbf{A} mit einem Skalar s_j multipliziert werden muss, um die Gewichtung entsprechend zu berücksichtigen.

- Korrelierte Beobachtungen:

Korrelationen zerstören die Diagonalstruktur der Gewichtsmatrix \mathbf{P} . Abhängig von der Korrelationslänge nimmt sie vielmehr Bandstruktur an oder kann gar komplett besetzt sein. Folglich müssen sämtliche Matrix-Matrix bzw. Matrix-Vektor Operationen zur (blockweisen) Aufstellung des gewichteten Normalgleichungssystems (6.5) explizit ausgeführt werden. Dies bringt einen enormen rechenzeit-technischen Aufwand mit sich. Dem gegenüber steht ein Verfahren, welches die Beobachtungen einem Dekorrelationsprozess unterzieht (Schuh 1996, Pail & Plank 2002, Klees et al. 2003), so dass daraus letztlich die korrelierte Gewichtsmatrix auf Diagonalstruktur transformiert wird. Die Dekorrelation entspricht einer Filterung der Beobachtungen unter Verwendung des Filters \mathbf{F} , welcher sich aus der Zerlegung der inversen Dispersionsmatrix ergibt gemäß $\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$. Mit genannter Zerlegung wird (6.5a) zu

$$\mathbf{A}^T \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{A} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{y}, \quad (6.12a)$$

$$\bar{\mathbf{A}}^T \bar{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{A}}^T \bar{\mathbf{y}}. \quad (6.12b)$$

Die manipulierten Beobachtungen $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{F} \mathbf{y}$ sind nunmehr unkorreliert. Mit $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{F} \mathbf{A}$ muss der Filter gleichsam auf die Designmatrix angewandt werden. Gleichung (6.12b) kann invers zu obiger Ableitung des Normalgleichungssystems aus der Minimierungsaufgabe in eben letztere zurück formuliert werden, woraus die dekorrelierte Minimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x}} \|\bar{\mathbf{r}}\|^2 = \min_{\mathbf{x}} \|\bar{\mathbf{A}} \mathbf{x} - \bar{\mathbf{y}}\|^2 \quad (6.13)$$

resultiert. Sie enthält im Unterschied zu (6.2) die Varianz-Kovarianzinformation der Beobachtungen in Form des Filters \mathbf{F} .

6.2 Regularisierung

Regularisierungstechniken kommen zum Einsatz, um Instabilitäten bei der Lösung schlecht gestellter (ill-posed) Inversionsprobleme beizukommen. Schlecht gestellt bedeutet in diesem Zusammenhang, dass der Lösungsvektor $\hat{\mathbf{x}}$ nicht kontinuierlich von den Beobachtungen \mathbf{y} abhängt (Tikhonov 1963, Hanke & Hansen 1993). Das heißt selbst kleine Unsicherheiten in den Beobachtungen bewirken einen großen Fehlereinfluss auf die Schätzung des Unbekanntenvektors. Ein derartiges Verhalten ist eine typische Eigenschaft inverser Probleme. Ein Indiz dafür bildet das Verhältnis zwischen dem größten und kleinsten Singulärwert der Normalgleichungsmatrix, welches als die Kondition der Matrix bezeichnet wird und im idealen Fall den Wert eins annimmt. Die Kondition wird unendlich für das Auftreten eines Singulärwerts von null. Tritt dieser Fall ein, so hat die Matrix keinen vollen Rang, sie ist singulär, gleichsam ist die Lösung des Normalgleichungssystems nicht eindeutig. In der Praxis tritt eher die Situation auf, dass Singulärwerte nahe null auftreten, was zwar eine formell eindeutige Schätzung zulässt, diese jedoch numerisch instabil wird.

Verschiedene Arten der Regularisierung wurden in der Vergangenheit für ihre Verwendung in unterschiedlichen Disziplinen untersucht, so z.B. die Methode von Tikhonov-Phillips, abgebrochene Singulärwertzerlegung, Mollifier Verfahren oder iterative Regularisierungsmethoden. Hier wird ausschließlich auf die Tikhonov-Phillips Regularisierung (Phillips 1962, Tikhonov 1963) eingegangen, welche sich für satellitengeodätische Anwendungen vielfach bewährt hat, wie beispielsweise in Kusche & Klees (2002a), Ditmar et al. (2003b) und Schmidt et al. (2007) gezeigt wird.

Ausgehend von der dekorrelierten Minimierungsaufgabe, vgl. (6.13), wird im Folgenden die Zusatzbedingung $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|^2$ zur Minimierung des Betrags des Unbekanntenvektors eingeführt. Daraus resultiert die erweiterte Formulierung

$$\min_{\mathbf{x}} \{ \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \kappa \|\mathbf{x}\|_{\mathbf{K}}^2 \} = \min_{\mathbf{x}} \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\kappa} \mathbf{K} \end{bmatrix} \mathbf{x} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \right\|^2 \quad (6.14)$$

mit dem positiven — als Regularisierungsparameter bezeichneten — Lagrange Multiplikator κ und der Regularisierungsmatrix \mathbf{K} . Die Stabilisierung der Lösung erfolgt unter der Bedingung der beschränkten Schätzung $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{K}}^2 \leq \kappa$. Der Zusatzterm bewirkt, dass jene Spektralanteile, welchen kleinen Singulärwerten zugeordnet sind, gedämpft werden, was gleichsam einer Glättung der Lösung entspricht. In dieser Ausdrucksweise kann die Regularisierungsmatrix als Glättungsnorm interpretiert werden. Das relative Gewicht der Terme $\|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ und $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{K}}$ hängt von der Größe des a priori unbekanntes Skalars κ ab. Wird der Regularisierungsparameter

zu klein angesetzt, so ist (6.14) nahe dem schlecht konditionierten Minimierungsproblem. Andererseits läuft (6.14) Gefahr, für einen zu großen Wert von κ gegen eine Lösung zu tendieren, welche mit dem originären Problem nicht mehr viel gemein hat. Somit stellt die adäquate Balance der beiden Terme die fundamentale Aufgabe zur Lösung des regularisierten Systems dar. Da der optimale Regularisierungsparameter κ_{opt} a priori unbekannt und mithin nicht evaluierbar ist, scheint es sinnvoll das LS Problem (6.14) für ein ganzes Spektrum κ_i , $i = 1, 2, \dots, i_{\text{max}}$ zu lösen. Daraus kann der optimale Wert mittels eines bestimmten Qualitätskriteriums aus den Schätzungen $\hat{\mathbf{x}}_{\kappa_i}$ ausgesondert werden, wie beispielsweise in Hanke & Hansen (1993), Kilmer & O'Leary (2001), Koch & Kusche (2002) oder Kusche & Klees (2002a) beschrieben. Cai et al. (2004) widmet sich davon abweichend der analytischen Bestimmung des optimalen Regularisierungsparameters. In ihrer allgemeinen Form kann die Zusatzbedingung erweitert werden zu $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{ap}}\|^2$. Darin wird die a priori Information \mathbf{x}_{ap} der Unbekannten eingeführt, was einem Signalzwang entspricht (Xu 1992, Sneeuw 2000). Die a priori Information muss sich nicht zwangsläufig auf das gesamte Unbekanntenspektrum erstrecken. Vielmehr ist es durch erwähnte Zusatzbedingung möglich, den Signalzwang nur innerhalb eines bestimmten Spektralbereichs einzusetzen.

Mit

$$E \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_{\text{ap}} \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{x}, \quad D \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_{\text{ap}} \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \kappa \mathbf{K} \end{bmatrix} \quad (6.15)$$

führt die regularisierte Extremwertaufgabe analog zu Kapitel 6.1 auf die Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} [(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y})^T(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{ap}})^T \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{ap}})] = 0 \quad (6.16)$$

und schließlich auf das regularisierte Normalgleichungssystem

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \kappa \mathbf{K}) \hat{\mathbf{x}}_{\kappa} = \mathbf{A}^T \mathbf{y} + \kappa \mathbf{K} \mathbf{x}_{\text{ap}}, \quad (6.17)$$

$$\mathbf{N}_{\text{reg}} \hat{\mathbf{x}}_{\kappa} = \mathbf{b} + \mathbf{b}_{\text{ap}}. \quad (6.18)$$

Für $\mathbf{x}_{\text{ap}} = \mathbf{0}$ wird $\mathbf{b}_{\text{ap}} = \kappa \mathbf{K} \mathbf{x}_{\text{ap}} = \mathbf{0}$. Die Normalgleichungsmatrizen \mathbf{N} und \mathbf{N}_{reg} unterscheiden sich durch den Regularisierungsterm $\kappa \mathbf{K}$, wobei die Regularisierungsmatrix Diagonalstruktur aufweist. Die regularisierte Lösung $\hat{\mathbf{x}}_{\kappa}$ ist eine verzerrte Schätzung des ursprünglichen Gauß-Markov Modells (6.1). Die erwartungstreue Schätzung wird aufgegeben zu Gunsten einer stabilen numerischen Vorgehensweise. Die Wahl von \mathbf{K} ist nahe mit dem zu lösenden Problem verbunden. In der Satellitengeodäsie zeigt sich, dass vornehmlich die Bestimmung der Gravitationsfeldkoeffizienten hohen Grades stabilisiert werden muss, da das in den Beobachtungen enthaltene Gravitationssignal mit wachsender Frequenz stark abnimmt. Folglich werden im hohen Frequenzbereich die Beobachtungen durch die Messfehler dominiert. Die Aufgabe der Regularisierung besteht darin, das hochfrequente Signal zu verstärken um gleichsam dessen Bestimmung zu ermöglichen. Somit liegt es nahe, die inverse Kaula-Regel zur Berechnung der Diagonalelemente heran zu ziehen (Regularisierung mit Signalzwang), mit welcher sich diese in Abhängigkeit des Grades l zu $10^{10}l^4$ ergeben. Die stabile Schätzung hochfrequenter Anteile (hochgradiger Koeffizienten) wird durch die Bedingung basierend auf erster bzw. zweiter (radialer) Ableitung mit $10^{10}(l+1)^2l^4$ bzw. $10^{10}(l+1)^2(l+2)^4l^4$ gar verstärkt erzwungen (Kusche & Klees 2002a).

7. Die iterative Lösungsmethode

Die im vorigen Kapitel vorgestellte direkte Lösungsmethode fundiert auf der Aufstellung des kompletten Normalgleichungssystems. Zur Berechnung hochauflösender Gravitationsfelder erfordert dies gleichsam eine enorme Arbeitsspeicheranforderung, vgl. Tabelle 1.2. Gewöhnliche PCs erlauben nur eine sehr beschränkte Anwendung dieser Methode und auch parallele Plattformen, siehe dazu Kapitel 9, sind hinsichtlich eines gemeinsamen Arbeitsspeichers dieser Größe Einschränkungen unterworfen betreffend der Anzahl der parallel geschalteten Prozessoren. Iterative Lösungsmethoden überbestimmter linearer Gleichungssysteme kommen hingegen mit einer sehr geringen Speicherverfügbarkeit aus. Sie sind damit plattformunabhängiger und können aus speichertechnischer Sicht auf jedem gewöhnlichen PC ausgeführt werden. Als iterativer Löser wird hier das LSQR Verfahren behandelt.

Die Entwicklung der LSQR Methode reicht zurück an den Anfang der siebziger Jahre. Jedoch erst zu Beginn der achtziger Jahre sollten die Arbeiten von Paige & Saunders (1982a, 1982b) im Detail publiziert werden. LSQR ist ein Akronym für ein bestimmtes Verfahren zur Lösung (schlecht konditionierter) linearer LS Probleme unter der Durchführung einer QR Zerlegung. Die Methode findet für geophysikalische Anwendungen große Resonanz, ist jedoch in der Geodäsie weitgehend unbeachtet. Tatsächlich wird der Umgang von Ausgleichungsproblemen in der Geodäsie traditionell Methoden basierend auf den konjugierten Gradienten (CG) zugeschrieben (Hestenes & Stiefel 1952), woraus sogenannte CGLS Verfahren resultieren. Deren Anwendung im Bereich der satellitengeodätischen Gravitationsfeldbestimmung findet sich unter anderem in Schuh (1996), Pail & Plank (2002) und Ditmar et al. (2003a). Entsprechende Studien unter der Verwendung von LSQR finden sich hingegen eher selten. Beispiele hierfür sind Kusche & Mayer-Gürr (2001), Baur & Austen (2005) sowie Baur et al. (2007a).

Dabei handelt es sich sowohl bei LSQR als auch bei CGLS um Krylov-Raum Methoden, welche in iterativer Weise die Lösung eines linearen Gleichungssystems durch die Bereitstellung aufeinanderfolgender Approximationen angehen. Beide Verfahren erzeugen von der mathematischen Betrachtungsweise aus die gleichen Iterationsergebnisse, stellen ähnliche Speicheranforderungen und weisen eine vergleichbare Anzahl an Operationen auf. Jedoch zeigt sich der LSQR Algorithmus aus theoretischen Erwägungen hinsichtlich der Stabilität des iterativen Prozesses den CG Methoden im Vorteil (Paige & Saunders 1982a, Björck 1996, Jacobsen et al. 2003), weshalb hier die Fokussierung ausschließlich auf das LSQR Verfahren erfolgt.

Der originären LSQR Methode widmet sich Kapitel 7.1. Wie bereits in Kapitel 6.2 angesprochen, kommt die Gravitationsfeldanalyse als inverses Problem ohne entsprechende Regularisierungstechniken für eine stabile Schätzung der unbekannt Parameter oftmals nicht aus. Kapitel 7.2 führt die Tikhonov-Phillips Regularisierung in den bestehenden Algorithmus ein. Das LSQR Verfahren ist in seiner ursprünglichen Formulierung aufgrund des langsamen Konvergenzverhaltens wenig effizient, weshalb dessen maßgeschneiderte Präkonditionierung angegangen wird. In Kapitel 7.3 liefert die für die Satellitengeodäsie vorherrschende blockdominante Struktur der Normalgleichungsmatrix einen entsprechenden Vorkonditionierer, während sich die hier nur am Rande behandelte Subspace Präkonditionierung von einer a priori bekannten Struktur des LS Problems weitgehend lossagt und die Präkonditionierung damit allgemeiner behandelt. Die Kombination aus Regularisierung und Präkonditionierung wird schließlich Thema von Kapitel 7.4 sein. Letztlich stellt das LSQR Verfahren mit seinen behandelten Erweiterungen eine hoch effiziente Alternative zur direkten Lösungsmethode in Kapitel 6 dar.

7.1 Das LSQR Verfahren

Zunächst sei das Minimierungsproblem (6.13) mit $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|^2$ in Erinnerung gerufen, dessen Bestandteile gemäß Kapitel 6 mit dem (hier dekorrelierten) Beobachtungsvektor \mathbf{y} , dem Unbekanntenvektor \mathbf{x} und der (hier dekorrelierten) Designmatrix \mathbf{A} identifiziert werden. Dieser Zusammenhang ist der Ausgangspunkt des LSQR Verfahrens, dessen wesentliche Schritte in Abb. 7.1 dargestellt sind.

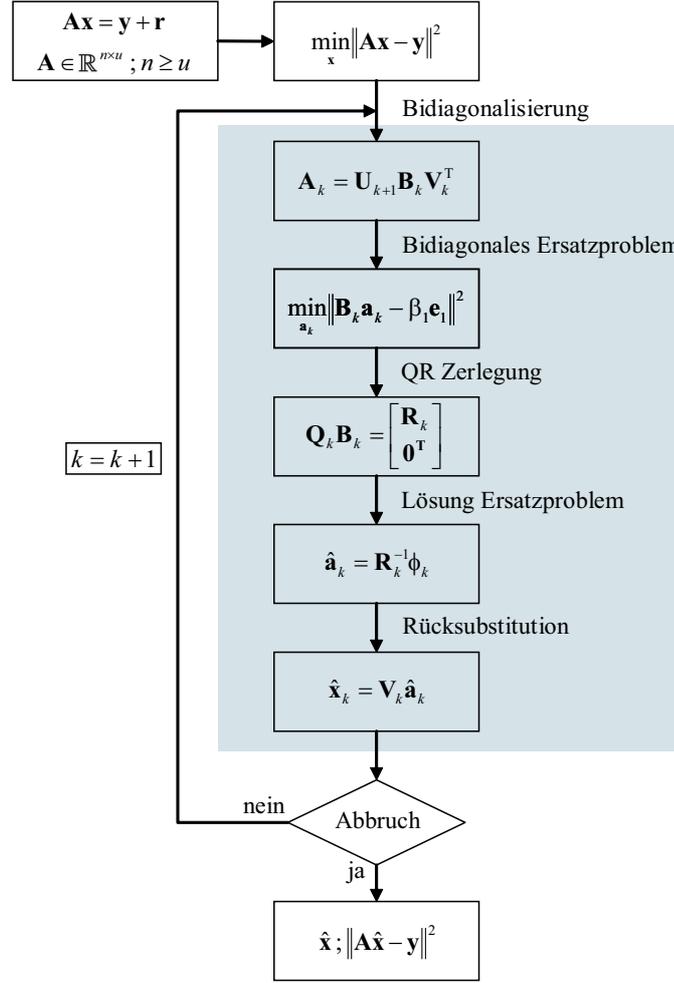


Abbildung 7.1: Schematischer Ablauf der LSQR Methode

Bidiagonalisierung. Beginnend mit einem Bidiagonalisierungsprozess wird zunächst das originäre Minimierungsproblem durch eine iterative Zerlegung der Designmatrix gemäß $\mathbf{A} \approx \mathbf{A}_k = \mathbf{U}_{k+1} \mathbf{B}_k \mathbf{V}_k^T$ auf ein vereinfachtes Ersatzproblem transformiert (Golub & Kahan 1965, Paige & Saunders 1982a):

$$\min_{\mathbf{a}_k} \|\mathbf{B}_k \mathbf{a}_k - \beta_1 \mathbf{e}_1\|^2. \quad (7.1)$$

Die Zerlegung von $\mathbf{A}(n \times u)$ in die zwei orthonormalen Matrizen $\mathbf{U}_{k+1} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k+1}]$ und $\mathbf{V}_k = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k]$ der Dimension $(n \times (k+1))$ bzw. $(u \times k)$ sowie die untere Bidiagonalmatrix \mathbf{B}_k der Dimension $((k+1) \times k)$ liest sich

$$\beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{A} \mathbf{v}_k - \alpha_k \mathbf{u}_k, \quad (7.2)$$

$$\alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1} - \beta_{k+1} \mathbf{v}_k, \quad (7.3)$$

mit den Startwerten $\beta_1 \mathbf{u}_1 = \mathbf{y}$ und $\alpha_1 \mathbf{v}_1 = \mathbf{A}^T \mathbf{u}_1$. Im Zuge eines jeden Iterationsschrittes k vergrößern sich genannte Matrizen, das heißt die Zerlegung schreitet innerhalb jedes Iterationsschrittes um eine Dimension voran. Für $k = u$ Iterationen ergibt sich \mathbf{A} als komplett zerlegt ($\mathbf{A}_{k=u} = \mathbf{A}$), jedoch ist für praktische Anwendungen die Konvergenz des Verfahrens im Allgemeinen bereits für $k \ll u$ gegeben. Die Vektoren $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k)$ und $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k)$ bilden jeweils die orthonormale Basis eines Krylov-Raums, hier bezeichnet mit $\mathcal{K}_k(\mathbf{A} \mathbf{A}^T, \mathbf{u}_1)$ und $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}^T \mathbf{A}, \mathbf{A}^T \mathbf{u}_1)$. Die Skalare $\alpha_k, \beta_k \geq 0$ sind derart gewählt, dass $\|\mathbf{u}_k\| = \|\mathbf{v}_k\| = 1$ gilt. Die Größen α_k bilden die Hauptdiagonalelemente von \mathbf{B}_k und β_k die Elemente der ersten unteren Nebendiagonalen. In (7.1) bezeichnet \mathbf{e}_1 die erste Spalte einer Einheitsmatrix entsprechender Dimension und weiter entspricht $\beta_1 = \|\mathbf{y}\|$ dem Betrag des Unbekanntenvektors \mathbf{y} . Dazu sei das Normalgleichungssystem $\mathbf{N} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}$, vgl. (6.5c), als Fixpunktiteration betrachtet gemäß

$$\hat{\mathbf{x}}_{k+1} = \hat{\mathbf{x}}_k + (\mathbf{N} \hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{b}). \quad (7.4)$$

Pseudocode 7.2: LSQR Methode zur Lösung von $\min \|\mathbf{r}\|^2 = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$

Initialisierung

1. $\beta_1 \mathbf{u}_1 = \mathbf{y}$
2. $\alpha_1 \mathbf{v}_1 = \mathbf{A}^T \mathbf{u}_1$
3. $\alpha_1 = \frac{\alpha_1}{\beta_1}$
4. $\bar{\phi}_1 = \beta_1$
5. $\bar{\rho}_1 = \alpha_1$

1. *Iteration:* $k = 1$

6. $\beta_2 \mathbf{u}_2 = \mathbf{A} \mathbf{v}_1 - \alpha_1 \mathbf{u}_1$
7. $\mathbf{h}_1 = \mathbf{A}^T \beta_2 \mathbf{u}_2$
8. $[c_1, s_1, \rho_1] = \text{givrot}(\bar{\rho}_1, \beta_2)$
9. $\phi_1 = c_1 \bar{\phi}_1$
10. $\bar{\phi}_2 = -s_1 \bar{\phi}_1$
11. $\mathbf{q}_1 = \frac{1}{\rho_1} \mathbf{v}_1$
12. $\mathbf{x}_1 = \phi_1 \mathbf{q}_1$
13. $\alpha_2 \mathbf{v}_2 = \mathbf{h}_1 - \beta_2^2 \mathbf{v}_1$
14. $\alpha_2 = \frac{\alpha_2}{\beta_2}$

Weitere Iterationen: for $k = 2 : u$

15. $\beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{A} \mathbf{v}_k - \alpha_k \mathbf{u}_k$
 16. $\mathbf{h}_k = \mathbf{A}^T \beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}$
 17. $\theta_{k-1} = s_{k-1} \alpha_k$
 18. $\bar{\rho}_k = c_{k-1} \alpha_k$
 19. $[c_k, s_k, \rho_k] = \text{givrot}(\bar{\rho}_k, \beta_{k+1})$
 20. $\phi_k = c_k \bar{\phi}_k$
 21. $\bar{\phi}_{k+1} = -s_k \bar{\phi}_k$
 22. $\mathbf{q}_k = \frac{1}{\rho_k} (\mathbf{v}_k - \theta_{k-1} \mathbf{q}_{k-1})$
 23. $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \phi_k \mathbf{q}_k$
 24. $\alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{h}_k - \beta_{k+1}^2 \mathbf{v}_k$
 25. $\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_{k+1}}{\beta_{k+1}}$
-

Die trigonometrischen Einträge $c = \cos \nu$ und $s = \sin \nu$ stehen dabei in den Matrixelementen (i, i) , (i, j) , (j, i) und (j, j) . Speziell hier bewirkt die Givens Rotation $\mathbf{G}_{k,k+1}$ der Iteration k die Eliminierung des Unterdiagonalelements β_{k+1} der Bidiagonalmatrix \mathbf{B}_k . Dies sei anhand der ersten Iteration genauer erläutert, für welche $\bar{\rho}_1 = \alpha_1$ gilt und demnach $[c_1, s_1, \rho_1] = \text{givrot}(\alpha_1, \beta_2)$. Die Größen α_1 und β_2 sind die Einträge der ersten Spalte der Matrix $\mathbf{B}_k = \mathbf{B}_1 \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$. Die Anwendung der Givens Rotation $\mathbf{G}_{1,2}(\nu)$ auf diesen Spaltenvektor führt auf

$$\mathbf{G}_{1,2}(\nu) \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 \\ -s_1 & c_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \nu & \sin \nu \\ -\sin \nu & \cos \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}. \quad (7.11)$$

Mit den Definitionen $c_1 = \cos \nu = \frac{\alpha_1}{\rho_1}$, $s_1 = \sin \nu = \frac{\beta_2}{\rho_1}$ und $\rho_1 = \sqrt{\alpha_1^2 + \beta_2^2}$ wird daraus $\mathbf{G}_{1,2}(\nu)[\alpha_1 \ \beta_2]^T = [\rho_1 \ 0]^T$, womit das Nebendiagonalelement der Matrix \mathbf{B}_1 eliminiert ist. Folglich gewährt die fortlaufende Anwendung von (7.10) die Diagonalisierung von \mathbf{B}_k , was gleichsam \mathbf{R}_k als obere bidiagonale Matrix bedingt. Deren Hauptdiagonalelemente seien mit ρ_1, \dots, ρ_k bezeichnet, die der ersten oberen Nebendiagonalen mit $\theta_1, \dots, \theta_{k-1}$. Die orthogonale Matrix \mathbf{Q}_k setzt sich aus dem Produkt der Givens Rotationen zusammen,

$$\mathbf{Q}_k = \mathbf{G}_{k,k+1} \mathbf{G}_{k-1,k} \dots \mathbf{G}_{1,2}, \quad (7.12)$$

was letztlich auf die Schätzung

$$\hat{\mathbf{a}}_k = \mathbf{R}_k^{-1} \phi_k \quad (7.13)$$

führt zur Lösung des bidiagonalen Ersatzproblems.

Die Schätzung des originären Unbekanntenvektors $\hat{\mathbf{x}}_k$ steht mit dem substituierten Unbekanntenvektor $\hat{\mathbf{a}}_k$ über die orthonormale Matrix \mathbf{V}_k in Verbindung mit

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}_k. \quad (7.14)$$

Weiter gilt $\hat{\mathbf{x}}_k \in \mathcal{K}_k(\mathbf{A}^T \mathbf{A}, \mathbf{A}^T \mathbf{u}_1)$, womit die Näherungslösung $\hat{\mathbf{x}}_k$ in dem Unterraum eingebettet ist, welcher durch die Vektoren $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k)$ aufgespannt wird und damit kann gleichsam $\hat{\mathbf{x}}_k$ als Linearkombination dieser

Vektoren repräsentiert werden. Tatsächlich enthält $\hat{\mathbf{a}}_k$ die entsprechenden Linearfaktoren. Zur Evaluierung von (7.14) müssen streng genommen alle Vektoren $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k)$ vorliegen, das heißt im Speicher gehalten werden. In Paige & Saunders (1982a) wird diese Problematik durch eine einfache Rekursionsbeziehung umgangen, nach der sich $\hat{\mathbf{x}}_k$ aus der Lösung der Iterierten $\hat{\mathbf{x}}_{k-1}$ und dem Vektor \mathbf{v}_k der aktuellen Iteration k zusammensetzt.

Mit Pseudocode 7.2 ist die Realisierung des LSQR Algorithmus dargestellt. Dabei ist für die Implementierung darauf zu achten, dass die Designmatrix zeilenweise aufgebaut und verarbeitet wird sowie deren zweimalige Berechnung in (7.2) bzw. (7.3) vermieden werden kann. Dazu wird der Hilfsvektor \mathbf{h}_k eingeführt mit $\mathbf{h}_k = \sum_j \mathbf{a}^j u_{k+1}^j$. Nach Berechnung der j -ten Zeile von \mathbf{A} ergibt sich der j -te Zuschlag des Gesamtprodukts $\mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1}$ aus der j -ten Zeile \mathbf{a}^j selbst sowie dem j -ten Element des (unnormierten) Vektors \mathbf{u}_{k+1} , welches mit u_{k+1}^j bezeichnet und zum entsprechenden Zeitpunkt mit (7.2) bereits verfügbar ist. Der iterative Prozess zur Bestimmung des Unbekanntenvektors wird genau dann verlassen, wenn die k -te Iteration eine vorab definierte Güte der Lösung erreicht hat. Die Definition eines entsprechenden Abbruchkriteriums wird Bestandteil folgender Ausführungen sein.

Iterationsabbruch. Grundsätzlich kommen abhängig von der Philosophie des Abbruchs folgende Ansätze in Betracht:

- Mathematische Abbruchkriterien:

Sie basieren meist auf der Residuenquadratsumme $\|\hat{\mathbf{r}}_k\|^2 = \|\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{y}\|^2$, welche innerhalb jeder Iteration k mit

$$\|\hat{\mathbf{r}}_k\|^2 = \bar{\phi}_{k+1}^2 = \bar{\phi}_1^2 s_k^2 s_{k-1}^2 \dots s_1^2 = \beta_1^2 s_k^2 s_{k-1}^2 \dots s_1^2 \quad (7.15)$$

ohne rechentechnischen Mehraufwand bereit gestellt wird (Paige & Saunders 1982a). Der iterative Prozess findet sein Ende, wenn $\|\hat{\mathbf{r}}_k\|^2$ oder ein damit verbundenes Funktional unter eine vorab definierte Schranke fällt. Eine derartige Vorgehensweise steht einzig mit den mathematischen, internen Eigenschaften der Methode in Verbindung und erlaubt damit keine physikalische Interpretation des behandelten Problems der Gravitationsfeldanalyse.

- Kreuzvalidierung (CV, Cross Validation):

Der Iterationsabbruch unter Verwendung des CV Funktionals wird in Björck (1996) und Kusche & Mayer-Gürr (2001) genauer beleuchtet. Das Prinzip sagt sich davon los, den Abbruch an der Änderung des Lösungsvektors von Iteration zu Iteration fest zu machen. Vielmehr findet der Berechnungsprozess ein Ende, wenn die beliebige Beobachtung $y_i \in \mathbf{y}$ hinreichend genau präzifizierbar ist aus der Schätzung $\hat{\mathbf{x}}_k^i$, welche die k -te Iterierte bezeichnet unter Verwendung des manipulierten Beobachtungsvektors $\mathbf{y}_i = y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n$.

- Problemspezifisches Abbruchkriterium:

Um das Abbruchkriterium mit einer physikalischen Interpretation des zu lösenden Problems zu verbinden, kann dieses auf ein bestimmtes Funktional des Gravitationsfeldes bezogen werden. Die Änderung des breitengewichteten RMS (WRMS, Weighted Root Mean Square) Wertes von Geoidhöhen basierend auf sukzessiven Approximationen an den Unbekanntenvektor stellt beispielsweise ein solches Funktional dar. Der Abbruch setzt bei dieser Vorgehensweise genau dann ein, wenn die Differenz aufeinanderfolgender WRMS Werte einen vorab definierten Schwellenwert δ unterschreitet.

Aufgrund der engen Beziehung zur physikalischen Problemstellung wird hier ausschließlich das problemspezifische Abbruchkriterium heran gezogen. Die approximierte Geoidhöhe N_i^k im Punkt $P_i(\lambda_i, \varphi_i, r_i)$ bezüglich der Parameterschätzung c_{lm}^k, s_{lm}^k nach der k -ten Iteration berechnet sich dabei mit

$$N_i^k = R \sum_{l=2}^L \sum_{m=0}^l P_{lm}(c_{lm}^k \cos m\lambda_i + s_{lm}^k \sin m\lambda_i). \quad (7.16)$$

Für den WRMS Wert der Geoidhöhen gilt weiterhin

$$\text{WRMS}_N^k = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^M ((N_i^k)^2 \cos \varphi_i)}{\sum_{i=1}^M \cos \varphi_i}}, \quad (7.17)$$

worin M für die Anzahl der Berechnungspunkte steht, deren Verteilung vorzugsweise auf einem regelmäßigen Gitter (hier mit einer Maschenweite von 1° gewählt) vorgenommen werden sollte. Dabei ist zur Evaluierung

von (7.17) die missionsspezifische Satellitenbahn zu berücksichtigen. Allgemein gilt $|\varphi| < 90^\circ$, jedoch nur für einen polaren Orbit ist eine globale Beobachtungsüberdeckung gegeben. Im Falle des GOCE Satelliten beispielsweise trifft dies nicht zu und mithin für den Großteil von künstlichen Erdsatelliten. So gilt für GOCE $\varphi_{\max}^{\text{GOCE}} \approx \pm 83,4^\circ$. Abbildung 7.2 zeigt die entsprechende Struktur der Geoidhöhenfehler, dargestellt in RMS Werten pro Breitenkreis.

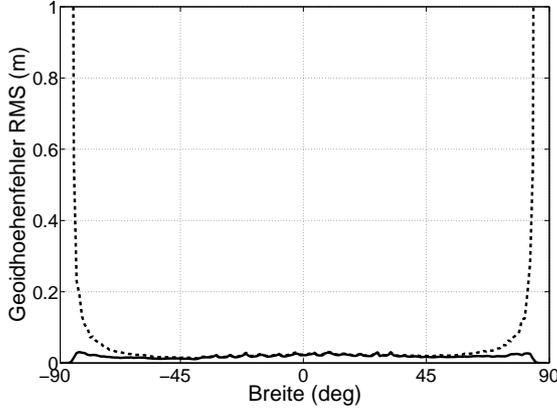


Abbildung 7.2: RMS Werte der Geoidhöhenfehler pro Breitenkreis ($L = 200$). Durchgezogene Kurve: $m_s = 20$, gestrichelte Kurve: $m_s = 0$

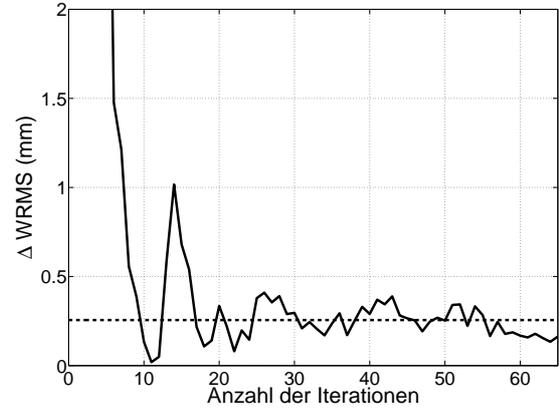


Abbildung 7.3: Typisches Konvergenzverhalten der LSQR Methode

Für $|\varphi| > |\varphi_{\max}^{\text{GOCE}}|$ sind die Werte nicht repräsentativ bezogen auf die Schätzung des Unbekanntenvektors und dürfen deshalb zur Berechnung von (7.17) nicht heran gezogen werden. Da das Polarlochproblem die Bestimmung der niederen Ordnungen des Gravitationspektrums scheitern lässt, kann alternativ zur regional beschränkten Evaluierung von (7.17) der Koeffizientenanteil mit Ordnung $m < m_s$ zur Berechnung von WRMS_N^k vernachlässigt werden, was nach Abb. 7.2 im signifikanten Ortsbereich offensichtlich zum selben Ergebnis, jedoch in den polaren Gebieten zu keinen überdimensional großen Werten führt. Das Abbruchkriterium schließlich ist definiert als die Differenz zweier aufeinanderfolgender Evaluierungen von (7.17), $\Delta \text{WRMS}_N^{k,k-1} = \text{WRMS}_N^k - \text{WRMS}_N^{k-1}$, welche am Ende einer jeden Iteration k berechnet wird. Fällt $\Delta \text{WRMS}_N^{k,k-1}$ unter einen vorab definierten Schwellenwert δ , das heißt gilt $\Delta \text{WRMS}_N^{k,k-1} < \delta$, so wird der iterative Prozess abgebrochen. Aufgrund des nicht-monotonen Konvergenzverhaltens der LSQR Methode, wie beispielhaft in Abb. 7.3 gezeigt, sollte der Lösungsprozess, nachdem der Schwellenwert erreicht ist, für eine gewisse Anzahl von Iterationen fortgesetzt werden, um sicher zu gehen, die geforderte Genauigkeit der Schätzung tatsächlich getroffen zu haben.

Bereitstellung der Varianz-Kovarianzmatrix. Zur Lösung eines linearen Gleichungssystems ist in allgemeiner Betrachtungsweise die generalisierte Inverse \mathbf{A}^{-g} der Designmatrix \mathbf{A} zu bilden. Für die Dispersion der Schätzung $\hat{\mathbf{x}}$ gilt dann (Menke 1984)

$$D(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\sigma}^2 \mathbf{A}^{-g} (\mathbf{A}^{-g})^T. \quad (7.18)$$

Speziell für ein überbestimmtes LS Problem ist die generalisierte Inverse gegeben mit $\mathbf{A}^{-g} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$, woraus sich unmittelbar $D(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\sigma}^2 (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} = \hat{\sigma}^2 \mathbf{N}^{-1}$ ergibt. Für die direkte Lösungsmethode erfolgt die Berechnung von $D(\hat{\mathbf{x}})$ durch Inversion der Normalgleichungsmatrix \mathbf{N} . Diese stellt LSQR nicht bereit. Ebenso wenig liefert das iterative Verfahren einen expliziten Ausdruck der generalisierten Inversen \mathbf{A}^{-g} , womit gleichsam die exakte Evaluierung der Varianz-Kovarianzmatrix ausbleibt. Zhang & McMechan (1995) leiten eine auf LSQR basierte Methode zur Berechnung von $D(\hat{\mathbf{x}})$ ab. Das resultierende modifizierte Verfahren, dort als LSQRA bezeichnet, unterscheidet sich jedoch deutlich von der ursprünglichen Methode. Ein alternativer Ansatz wird in Yao et al. (1999) verfolgt. Er gründet auf der expliziten Darstellung von \mathbf{A}^{-g} und wird seiner Einfachheit halber im Folgenden skizziert. Ausgehend von Ersatzproblem (7.1) liest sich das entsprechende Normalgleichungssystem

$$\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k \hat{\mathbf{a}}_k = \mathbf{B}_k^T \beta_1 \mathbf{e}_1 \quad (7.19)$$

bzw. es gilt

$$\hat{\mathbf{a}}_k = (\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k)^{-1} \mathbf{B}_k^T \beta_1 \mathbf{e}_1 = \mathbf{B}_k^{-g} \beta_1 \mathbf{e}_1. \quad (7.20)$$

Darin ist $\mathbf{B}_k^{-g} = (\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k)^{-1} \mathbf{B}_k^T$ die generalisierte Inverse der Bidiagonalmatrix \mathbf{B}_k . Weiter kann $\mathbf{U}_{k+1} \beta_1 \mathbf{e}_1 = \mathbf{y}$ geschrieben werden, womit unmittelbar

$$\hat{\mathbf{a}}_k = \mathbf{B}_k^{-g} \mathbf{U}_{k+1}^T \mathbf{y}, \quad (7.21)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \mathbf{V}_k \hat{\mathbf{a}}_k = \mathbf{V}_k \mathbf{B}_k^{-g} \mathbf{U}_{k+1}^T \mathbf{y} = \mathbf{A}_k^{-g} \mathbf{y} \quad (7.22)$$

resultiert. Die generalisierte Inverse ist gefunden mit $\mathbf{A}_k^{-g} = \mathbf{V}_k \mathbf{B}_k^{-g} \mathbf{U}_{k+1}^T$. Dieser Ausdruck in (7.18) eingesetzt führt auf

$$D(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\sigma}^2 \mathbf{A}^{-g} (\mathbf{A}^{-g})^T \cong D_k(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\sigma}^2 \mathbf{V}_k (\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k)^{-1} \mathbf{V}_k^T. \quad (7.23)$$

Das Produkt $\mathbf{N}_k^{-1} = \mathbf{V}_k (\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k)^{-1} \mathbf{V}_k^T$ ist die k -te Approximation der inversen Normalgleichungsmatrix $\mathbf{N}^{-1} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$.

Die Aufnahme der Berechnung von $D_k(\hat{\mathbf{x}})$ erfordert einen geringen Eingriff in die ursprüngliche Implementierung. Für die approximative Berechnung der Dispersionsmatrix gemäß (7.23) müssen lediglich die Matrizen \mathbf{V}_k und \mathbf{B}_k im Speicher gehalten und das Produkt $\mathbf{V}_k (\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k)^{-1} \mathbf{V}_k^T$ berechnet werden. Andererseits wirkt dies der eigentlichen Motivation der LSQR Methode entgegen. Denn eine Stärke des Verfahrens liegt in seiner speichertechnisch problemlosen Handhabung. Demnach gestaltet sich Berechnung von $D_k(\hat{\mathbf{x}})$ nur für eine geringe Anzahl von Iterationen als unbedenklich. Dabei ist die Güte der Approximation von der Anzahl der Iterationen abhängig. Weiter zeigt sich, dass $\hat{\mathbf{x}}$ und $D_k(\hat{\mathbf{x}})$ ein durchaus unterschiedliches Konvergenzverhalten aufweisen können. Im Allgemeinen wird die Konvergenz der Schätzung $\hat{\mathbf{x}}$ schneller erreicht als diejenige der Varianz-Kovarianzinformation. Der Abbruch des iterativen Prozesses sollte deshalb an beide Größen gekoppelt sein. Diese Problematik wird in Yao et al. (1999) ausführlich diskutiert. Die notwendige Anzahl an Iterationen zur „korrekten“ Berechnung von $D(\hat{\mathbf{x}})$ bleibt jedoch ein kontroverses Thema. In jedem Falle ist $D_k(\hat{\mathbf{x}})$ die für den Unterraum der Lösung exakte Dispersionsmatrix.

Reorthogonalisierung. In obiger Ableitung der approximierten Dispersionsmatrix wird die Orthonormalität der Matrix \mathbf{U}_{k+1} voraus gesetzt ($\mathbf{U}_{k+1}^T \mathbf{U}_{k+1} = \mathbf{I}$). Die an Genauigkeit begrenzte Numerik jedoch zerstört diese Eigenschaft mit fortschreitendem Iterationsprozess mehr und mehr. Demzufolge spielt die Reorthogonalisierung der Matrizen \mathbf{U}_{k+1} und \mathbf{V}_k speziell zur Evaluierung von $D_k(\hat{\mathbf{x}})$ eine bedeutende Rolle. Nach O’Leary & Simmons (1981) kann dies sehr einfach geschehen durch die Modifizierung des Bidiagonalisierungsprozesses (7.2) bzw. (7.3) gemäß

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{k+1}^* &= \mathbf{A} \mathbf{v}_k - \alpha_k \mathbf{u}_k, \\ \text{Reorthogonalisierung: } \beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} &= \mathbf{u}_{k+1}^* - \mathbf{U}_k (\mathbf{U}_k^T \mathbf{u}_{k+1}^*), \\ \mathbf{v}_{k+1}^* &= \mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1} - \beta_{k+1} \mathbf{v}_k, \\ \text{Reorthogonalisierung: } \alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{v}_{k+1}^* - \mathbf{V}_k (\mathbf{V}_k^T \mathbf{v}_{k+1}^*). \end{aligned}$$

Zusätzlich zu \mathbf{V}_k muss damit im Zuge der Reorthogonalisierung die Matrix \mathbf{U}_k im Speicher verfügbar sein.

Abschließende Bemerkungen. Das LSQR Verfahren angewandt auf ein linearisiertes Gleichungssystem resultiert in ein doppelt iteratives Vorgehen. Ausgehend vom (hier dekorrelierten) Minimierungsproblem (6.8) mit

$$\min_{\Delta \mathbf{x}_i} \|\mathbf{A} \Delta \mathbf{x}_i - \Delta \mathbf{y}_i\|^2 \quad (7.24)$$

erfolgt die Berechnung der Schätzung $\Delta \hat{\mathbf{x}}_i$ über den iterativen Gleichungssystemlöser. Jedoch ist $\Delta \hat{\mathbf{x}}_i$ selbst nur der Zuschlag zur Näherungslösung $\hat{\mathbf{x}}_{i-1}$ gemäß $\hat{\mathbf{x}}_i = \hat{\mathbf{x}}_{i-1} + \Delta \hat{\mathbf{x}}_i$. In iterativer Weise wird jeweils dieser Zuschlag zur aktuellen Näherungslösung bestimmt.

7.2 Regularisierung

Neben der regularisierenden Eigenschaft iterativer Löser, welche sich durch einen Iterationsabbruch nach $k < u$ Approximationsschritten einstellt, ist davon unabhängig für die Lösung schlecht gestellter Systeme, vgl. Kapitel 6.2, die direkte Regularisierung des Minimierungsproblems erforderlich. Die Verbindung der regularisierenden Eigenschaften iterativer Löser (hier LSQR) mit einem direkten Regularisierungsverfahren (hier Tikhonov-Phillips) wird in Hanke & Hansen (1993) als hybrides Verfahren bezeichnet. Bestandteil dieses Kapitels ist die Erweiterung der LSQR Methode um die Tikhonov-Phillips Regularisierung, woraus das

als R-LSQR bezeichnete Verfahren resultiert. Bereits Paige & Saunders (1982a, 1982b) beleuchten die Regularisierung der LSQR Methode basierend auf dem erweiterten Minimierungsproblem (6.14). Jedoch wird in erwähnten Arbeiten ausschließlich auf die Formulierung mit der Einheitsmatrix als Regularisierungsmatrix, das heißt $\mathbf{K} = \mathbf{I}$, Bezug genommen, was im Folgenden als Regularisierung in Standardform verstanden wird.

Die Erweiterung auf die allgemeine Tikhonov-Phillips Regularisierung mit $\mathbf{K} \neq \mathbf{I}$ kann durch die Transformation des allgemein gestellten Regularisierungsproblems in Standardform erreicht werden (Björck 1996). Ausgehend von Darstellung (6.17) wird dazu eine Cholesky Faktorisierung der quadratischen Regularisierungsmatrix \mathbf{K} vorgenommen mit $\mathbf{K} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^T \mathbf{L}_{\mathbf{K}}$. Die Anwendung der Zerlegten $(\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T$ auf (6.17), zusammen mit der Substitution des unbekannt Parametervektors $\hat{\mathbf{x}}_{\kappa}$ gemäß $\hat{\mathbf{c}}_{\kappa} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}} \hat{\mathbf{x}}_{\kappa}$ führt direkt zu

$$((\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} + \kappa \mathbf{I}) \hat{\mathbf{c}}_{\kappa} = (\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{A}^T \mathbf{y}. \quad (7.25)$$

Schließlich wird mit der Substitution $\mathbf{A}_{\mathbf{K}} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1}$

$$\min_{\mathbf{c}} \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\mathbf{K}} \\ \sqrt{\kappa} \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{c} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (7.26)$$

Offensichtlich transformiert (7.25) das allgemeine Regularisierungsproblem in dessen Standardform (7.26). Somit lässt sich die Prozedur der Lösung von (6.14) nach \mathbf{x} direkt auf (7.26) zur Lösung nach \mathbf{c} übertragen. Die Schätzung des ursprünglichen Parametervektors wird über die Rücksubstitution $\hat{\mathbf{x}}_{\kappa} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \hat{\mathbf{c}}_{\kappa}$ erhalten. Es sei bemerkt, dass für die Tikhonov-Phillips Regularisierung \mathbf{K} Diagonalstruktur annimmt, womit $\mathbf{L}_{\mathbf{K}} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^T$ gilt mit $L_{ii} = \sqrt{K_{ii}}$.

Tabelle 7.1: Zusätzlicher rechenzeittechnischer Aufwand aufgrund Tikhonov-Phillips Regularisierung ($L = 200$, $n = 518\,400$ Beobachtungen, 1 Iteration)

Anzahl Regularisierungsparameter	Rechenzeit (%)
keine Regularisierung	100
1	100
10	100,4
100	100,9

Durch die Regularisierung der LSQR Methode mutiert die Bidiagonalmatrix \mathbf{B}_{k,κ_i} zu einer Tridiagonalmatrix. Damit ist durch die Berücksichtigung der Zusatzbedingung einzig die QR Zerlegung (7.8) durch die Regularisierung betroffen jedoch nicht deren Lösung, das heißt die Berechnung von $\hat{\mathbf{a}}_{k,\kappa_i}$ bzw. $\hat{\mathbf{x}}_{k,\kappa_i}$. Folglich ergibt sich der zusätzliche rechentechnische Aufwand durch die Regularisierung neben der Berücksichtigung von $\mathbf{A}_{\mathbf{K}} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1}$ in der Durchführung einer zusätzlichen (vorgeschaleten) Givens Rotation $\mathbf{G}_{k,k+2}$ pro Regularisierungsparameter i , und damit insgesamt i_{\max} Givens Rotationen innerhalb jedes Iterationsschrittes. Nach Tabelle 7.1 bedeuten die zusätzlichen Operationen selbst für eine große Anzahl an parallel anfallenden Regularisierungsparametern einen nur unerheblichen Mehraufwand. Mit der Einführung von 100 Regularisierungsparametern steigt für das dortige Beispiel die totale Rechenzeit eines Iterationsschrittes um weniger als 1% verglichen zur nicht regularisierten Variante.

Letztlich hängt der prozentuale Anteil primär von der Anzahl der Beobachtungen n ab, da deren Prozessierung den größten Teil des Verfahrens ausmacht. Pseudocode 7.3 zeigt die Implementierung der Regularisierung in den Algorithmus nach Pseudocode 7.2. Dabei wird die Operation $\mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1}$ nicht explizit ausgeführt, sondern gemäß des erweiterten Bidiagonalisierungsprozesses (nach Ausführung der vorgeschalteten Givens Rotation)

$$\beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{v}_k - \alpha_k \mathbf{u}_k, \quad (7.27)$$

$$\alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} = (\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1} - \beta_{k+1} \mathbf{v}_k, \quad (7.28)$$

werden die Produkte $\mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{v}_k$ und $(\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1}$ von rechts nach links evaluiert. Weiterhin bleibt die einmalige Berechnung der Designmatrix pro Iteration ausreichend. Denn für die praktische Vorgehensweise ist

Pseudocode 7.3: R-LSQR Methode — Ergänzungen zu Pseudocode 7.2 zur Lösung von $\min \|\mathbf{r}\|^2 = \min_{\mathbf{x}} \{\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \kappa \|\mathbf{x}\|_{\mathbf{K}}^2\}$

Initialisierung

- | | |
|---|--|
| <p>1a. Berechnung von $\mathbf{K} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^T \mathbf{L}_{\mathbf{K}}$ und dem inversen Cholesky Faktor $\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1}$</p> <p>2a. $\mathbf{v}_1 = (\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{v}_1$</p> <p>5a. $\mathbf{v}_1 = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{v}_1$</p> <p>1. <i>Iteration:</i> $k = 1$</p> <p>7a. $\mathbf{h}_1 = (\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{h}_1$</p> <p>7b. $[c_1, s_1, \rho_1] = \text{givrot}(\bar{\rho}_1, \sqrt{\kappa})$</p> <p>7c. $\bar{\rho}_1 = \rho_1$</p> <p>7d. $\bar{\phi}_1 = c_1 \bar{\phi}_1$</p> <p>12. $\mathbf{c}_1 = \phi_1 \mathbf{q}_1$</p> <p>12a. $\mathbf{x}_1 = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{c}_1$</p> <p>14a. $\mathbf{v}_2 = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{v}_2$</p> | <p><i>Weitere Iterationen:</i> for $k = 2 : u$</p> <p>16a. $\mathbf{h}_k = (\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{h}_k$</p> <p>18a. $[c_k, s_k, \rho_k] = \text{givrot}(\bar{\rho}_k, \sqrt{\kappa})$</p> <p>18b. $\bar{\rho}_k = \rho_k$</p> <p>18c. $\bar{\phi}_k = c_k \bar{\phi}_k$</p> <p>23. $\mathbf{c}_k = \mathbf{c}_{k-1} + \phi_k \mathbf{q}_k$</p> <p>23a. $\mathbf{x}_k = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{c}_k$</p> <p>25a. $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{v}_{k+1}$</p> |
|---|--|
-

zunächst $\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1}$ auf \mathbf{v}_k anzuwenden bevor \mathbf{A} zeilenweise aufgebaut wird. In diesem Falle ergibt sich die Aktualisierung des Hilfsvektors \mathbf{h}_k wie in Kapitel 7.1 beschrieben. Aufgrund der Regularisierung muss schließlich noch $(\mathbf{L}_{\mathbf{K}}^{-1})^T \mathbf{h}_k$ ausgeführt werden.

Die Prozedur zur Bestimmung des a priori unbekannt optimalen Regularisierungsparameters κ_{opt} gestaltet sich damit durch die parallele Prozessierung derer vieler auf eine effiziente Art und Weise. Ist das Spektrum der $\hat{\mathbf{x}}_{\kappa_i}$ bestimmt, so kann beispielsweise das L -Kurve Kriterium dazu verwendet werden, daraus die optimale Lösung und damit gleichsam κ_{opt} zu evaluieren. In dieser Tatsache spiegelt sich einer der größten Vorteile der LSQR Methode gegenüber alternativen Gleichungssystemlösern.

7.3 Präkonditionierung

Ursprünglich wurde die Präkonditionierung in der Satellitengeodäsie mit Blick auf das Normalgleichungssystem (6.5) eingeführt. Dies soll auch der Ausgangspunkt sein für die in diesem Kapitel behandelte Präkonditionierung der LSQR Methode, um daraus auf die entsprechende Technik hinsichtlich des LS Problems (6.2) schließen zu können.

Präkonditionierung der Normalgleichungsmatrix. Das Konvergenzverhalten eines iterativen Gleichungssystemlösers auf der Basis des Normalgleichungssystems ist vorrangig durch die Konditionszahl der Normalgleichungsmatrix bestimmt. Eine entsprechende Präkonditionierung ist in der Lage die Konditionszahl maßgeblich zu verbessern, um gleichsam eine Beschleunigung des iterativen Prozesses zu erreichen (Paige & Saunders 1982b, Benbow 1999). In der Satellitengeodäsie hat sich eine idealisierte Satellitenbahn als die Basis zur Konstruktion eines Präkonditionierers bewährt. Eine derartige Konfiguration ist charakterisiert durch eine geschlossene kreisförmige Bahn konstanter Inklination. Sie führt auf eine streng blockdiagonale Normalgleichungsmatrix (Colombo 1984). Diese nimmt mit ordnungsweiser Sortierung des Unbekanntenvektors, das heißt $\mathbf{x} = [c_{20}, \dots, c_{L0}, c_{21}, \dots, c_{L1}, \dots, c_{LL}, s_{21}, \dots, s_{LL}]^T$, die Struktur nach (7.29) an. Bei dieser Darstellung wird der Koeffizient c_{00} nicht geschätzt, sondern zu $c_{00} = 1.0$ fixiert. Die Koeffizienten der Ordnung $m = 1$ werden ebenfalls nicht bestimmt. Sie beschreiben den Massenmittelpunkt des gravitativen Körpers. Dieser sei im Koordinatenursprung des zugrunde liegenden Referenzsystems angenommen, womit besagte Koeffizienten den a priori Wert $c_{10} = c_{11} = s_{10} = 0$ erhalten.

Die Dimension der quadratischen Blöcke ${}_{c,s}\mathbf{H}_m^p \in \mathbb{R}^{p \times p}$ entlang der Hauptdiagonalen ist durch die Ordnung der Koeffizienten vorgegeben. Die maximale Dimension stellt sich mit ${}_{c}\mathbf{H}_{0,1,2}^{L-1}$ bzw. ${}_{s}\mathbf{H}_{1,2}^{L-1}$ für die Koeffizienten der Ordnungen $m = 0$, $m = 1$ und $m = 2$ ein. Für die weiteren Ordnungen nimmt die Größe der

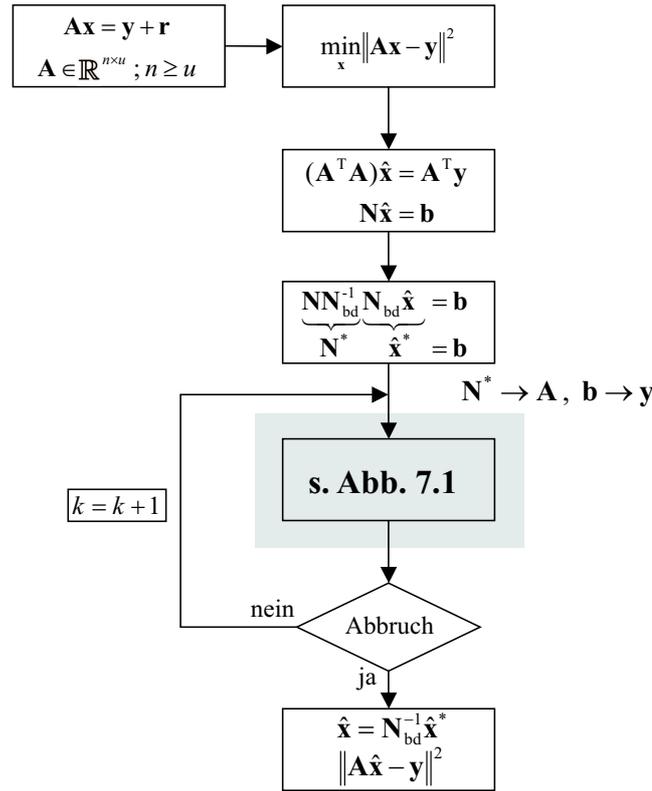


Abbildung 7.4: Schematischer Ablauf der PCN-LSQR Methode

Präkonditionierung der Designmatrix. Um der geschilderten Problematik beizukommen, ist es für das LSQR Verfahren angebracht, den blockdiagonalen Präkonditionierer der Normalgleichungsmatrix auf das ursprüngliche LS Problem (6.1) zurück zu formulieren. Der resultierende Algorithmus wird als PCA-LSQR bezeichnet und ist in Abb. 7.5 schematisch dargestellt. Ein entsprechender Präkonditionierer der Designmatrix \mathbf{A} lässt sich über Cholesky Zerlegung der symmetrischen, positiv definiten blockdiagonalen Approximation \mathbf{N}_{bd} der Normalgleichungsmatrix \mathbf{N} ableiten:

$$\mathbf{N}_{\text{bd}} = \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^T \mathbf{L}_{\mathbf{N}}. \quad (7.36)$$

Analog zur Formulierung des präkonditionierten Normalgleichungssystems (7.32) bewirkt der Einschub der Einheitsmatrix $\mathbf{I} = \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1} \mathbf{L}_{\mathbf{N}}$ auf der linken Seite von (6.1) eine Umformulierung des Ausgangsproblems gemäß

$$\mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1} \mathbf{L}_{\mathbf{N}} \mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{r}, \quad (7.37)$$

welches mit den Substitutionen $\mathbf{A}_{\mathbf{N}} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1}$ und $\mathbf{z} = \mathbf{L}_{\mathbf{N}} \mathbf{x}$ die auf der Ebene der Designmatrix präkonditionierte Form

$$\mathbf{A}_{\mathbf{N}} \mathbf{z} = \mathbf{y} + \mathbf{r} \quad (7.38)$$

annimmt. Der ursprüngliche Unbekanntenvektor ist wiederum über Rücksubstitution evaluierbar,

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1} \hat{\mathbf{z}}. \quad (7.39)$$

Aus programmiertechnischer Sicht muss allein die Ersetzung von \mathbf{A} der ursprünglichen LSQR Prozedur zu Gunsten von $\mathbf{A}_{\mathbf{N}} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1}$ vorgenommen werden. Dadurch ändert sich der Bidiagonalisierungsprozess gemäß

$$\beta_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{A} \mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1} \mathbf{v}_k - \alpha_k \mathbf{u}_k, \quad (7.40)$$

$$\alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} = (\mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1})^T \mathbf{A}^T \mathbf{u}_{k+1} - \beta_{k+1} \mathbf{v}_k. \quad (7.41)$$

Tatsächlich ist pro Iterationsschritt die einmalige Berechnung der Designmatrix ausreichend. Denn für die praktische Vorgehensweise ist zunächst $\mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1}$ auf \mathbf{v}_k anzuwenden bevor \mathbf{A} zeilenweise aufgebaut wird. In diesem Falle ergibt sich die Aktualisierung des Hilfsvektors \mathbf{h}_k wie in Kapitel 7.1 beschrieben. Aufgrund der

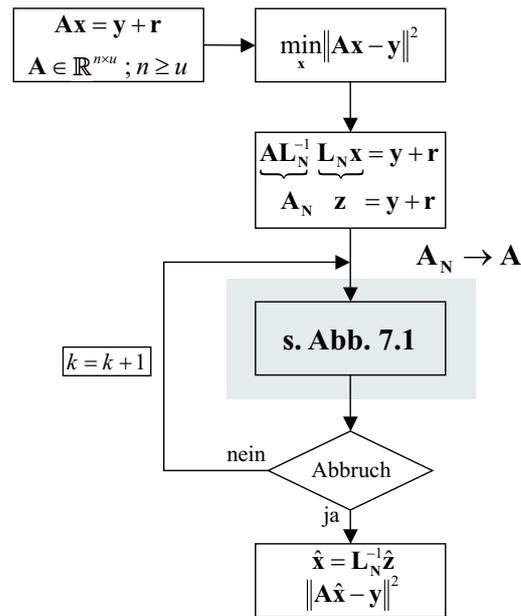


Abbildung 7.5: Schematischer Ablauf der PCA-LSQR Methode

Präkonditionierung muss schließlich noch das Produkt $(\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{h}_k$ ausgeführt werden. Es sei noch erwähnt, dass der rechentechnische Mehraufwand des PCA-LSQR Verfahrens im Vergleich zum ursprünglichen LSQR Algorithmus sich primär in der Berechnung des blockdiagonalen Präkonditionierers \mathbf{L}_N^{-1} äußert, welche einmalig im Initialisierungsschritt ausgeführt werden muss. Der Mehraufwand innerhalb der Iterationen gestaltet sich durch die zusätzliche Evaluierung der Matrix-Vektor Produkte $\mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{v}_k$, $(\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{h}_k$ und $\mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{z}_k$ vergleichsweise gering. Mit Pseudocode 7.4 ist die Implementierung des PCA-LSQR Verfahrens gegeben als Ergänzung zu Pseudocode 7.2.

Subspace Präkonditionierung. Schließlich soll als alternatives Präkonditionierungsverfahren noch kurz auf die Subspace Präkonditionierung eingegangen werden, welche in Hanke & Vogel (1999) behandelt und speziell für LSQR in Jacobsen et al. (2003) genauer ausgeführt wird. Die grundlegende Idee besteht in der Aufspaltung des Lösungsraumes in zwei Teilräume unterschiedlicher Dimension, womit das ursprüngliche LS Problem in zwei Teilprobleme zerfällt. Das kleinere davon ist so zu wählen, dass es problemlos durch direkte Inversion gelöst werden kann. Das größere Teilproblem geht in die LSQR Prozedur ein, wobei hierfür der Löser des kleinen Teilproblems als Präkonditionierer fungiert. Letztlich werden die Teillösungen der beiden

Pseudocode 7.4: PCA-LSQR Methode — Ergänzungen zu Pseudocode 7.2 zur

Lösung von $\min \|\mathbf{r}\|^2 = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$

Initialisierung

1a. Berechnung von $\mathbf{N}_{bd} = \mathbf{L}_N^T \mathbf{L}_N$ und dem inversen Cholesky Faktor \mathbf{L}_N^{-1}

2a. $\mathbf{v}_1 = (\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{v}_1$

5a. $\mathbf{v}_1 = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{v}_1$

1. Iteration: $k = 1$

7a. $\mathbf{h}_1 = (\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{h}_1$

12. $\mathbf{z}_1 = \phi_1 \mathbf{q}_1$

12a. $\mathbf{x}_1 = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{z}_1$

14a. $\mathbf{v}_2 = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{v}_2$

Weitere Iterationen: for $k = 2 : u$

16a. $\mathbf{h}_k = (\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{h}_k$

23. $\mathbf{z}_k = \mathbf{z}_{k-1} + \phi_k \mathbf{q}_k$

23a. $\mathbf{x}_k = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{z}_k$

25a. $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{v}_{k+1}$

Systeme zur Gesamtlösung zusammen gefasst. Der Vorteil dieser Methode für deren Gebrauch in der Satellitengeodäsie liegt darin, dass sie weit geringere Anforderungen an die Struktur der Normalgleichungsmatrix bzw. Designmatrix stellt als dies bei der blockdiagonalen Präkonditionierung der Fall ist. Letztere ist maßgeblich an die Bedingung der Blockdominanz gebunden, was zwar für eine Vielzahl von Satellitenmissionen zutrifft, jedoch nicht zwingend notwendig ist. Aufgrund ihrer Analogie zu Multi-Level Methoden wird die Subspace Präkonditionierung unter der Verwendung zweier Subspaces als Zwei-Level Methode bezeichnet. Wie Xu (1997) zeigt, entspricht die Multi-Level Prozessierung den sogenannten Multigrid Strategien. Letztere wurden hinsichtlich der Gravitationsfeldbestimmung unter anderem in Keller (2001) und Kusche (2001, 2002b) untersucht.

Ähnlich dem PCN-LSQR Verfahren erfordert auch die Subspace präkonditionierte Variante (SP-LSQR) die zweimalige Berechnung der Designmatrix innerhalb jeder Iteration, was für deren praktischen Gebrauch zunächst zu einem starken Nachteil wird. Inwieweit dieser sich gegenüber der PCA-LSQR Methode für nicht-blockdominante Satellitenkonfigurationen relativiert, bedarf besonderer Untersuchungen und soll nicht Bestandteil dieser Arbeit sein. Zu guter letzt sei noch darauf hingewiesen, dass die Subspace mit der blockdiagonalen Präkonditionierung kombiniert werden kann in dem Sinne, dass das größere Teilproblem mit PCA-LSQR gelöst wird.

7.4 Kombination der Regularisierung und Präkonditionierung

Die Kombination der in den vorigen Kapiteln behandelten Techniken ist aus logischer Sicht zunächst in der Reihenfolge sinnvoll, das regularisierte System zusätzlich zu präkonditionieren. Denn erst genannte Manipulation nimmt Einfluss auf die Güte der Parameterschätzung, während die Präkonditionierung die Qualität der Lösung unverändert lässt. Sie bewirkt „nur“ das notwendige Performancetuning. Die Präkonditionierung des regularisierten Minimierungsproblems (7.26) ergibt sich nach den Ausführungen in Kapitel 7.3 zu

$$\min_{\mathbf{c}} \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A}_K \mathbf{L}_{NK}^{-1} \mathbf{L}_{NK} \\ \sqrt{\kappa} \mathbf{L}_{NK}^{-1} \mathbf{L}_{NK} \end{bmatrix} \mathbf{c} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (7.42)$$

Darin bezeichnet \mathbf{L}_{NK} den Cholesky Faktor der blockdiagonalen Approximation von $\mathbf{N}_K = \mathbf{A}_K^T \mathbf{A}_K$. Mit den Substitutionen $\mathbf{A}_{KN} = \mathbf{A}_K \mathbf{L}_{NK}^{-1} = \mathbf{A} \mathbf{L}_K^{-1} \mathbf{L}_{NK}^{-1}$ und $\mathbf{d}_{KN} = \mathbf{L}_{NK} \mathbf{c} = \mathbf{L}_{NK} \mathbf{L}_K \mathbf{x}$ resultiert die Transformation in

$$\min_{\mathbf{d}_{KN}} \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{KN} \\ \sqrt{\kappa} \mathbf{L}_{NK}^{-1} \end{bmatrix} \mathbf{d}_{KN} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (7.43)$$

Der ursprüngliche Unbekanntenvektor \mathbf{x} wird einer zweifachen Substitution unterzogen. Dadurch wird jedoch nicht die Transformation des Minimierungsproblems in Standardform erreicht. Es liegt deshalb der Gedanke nahe, mittels einer Cholesky Zerlegung von \mathbf{L}_{NK}^{-1} diese analog zu (7.25) zu erzwingen. Ein solches Vorgehen ist jedoch nicht möglich, da \mathbf{L}_{NK}^{-1} eine Dreiecksmatrix ist und folglich deren Cholesky Zerlegung nicht existiert.

Aus diesem Grunde sei das alternative Vorgehen angesprochen, welches darin besteht, das präkonditionierte System zu regularisieren. Ausgehend von (7.38) wird unter Hinzunahme des Regularisierungsterms

$$(\mathbf{A}_N^T \mathbf{A}_N + \kappa \mathbf{K}_N) \hat{\mathbf{z}}_\kappa = \mathbf{A}_N^T \mathbf{y}. \quad (7.44)$$

Die Transformation in Standardform erfolgt analog zu (7.25) über die Cholesky Zerlegung von $\mathbf{K}_N = \mathbf{L}_{KN}^T \mathbf{L}_{KN}$:

$$((\mathbf{L}_{KN}^{-1})^T \mathbf{A}_N^T \mathbf{A}_N \mathbf{L}_{KN}^{-1} + \kappa \mathbf{I}) \mathbf{L}_{KN} \hat{\mathbf{z}}_\kappa = (\mathbf{L}_{KN}^{-1})^T \mathbf{A}_N^T \mathbf{y}. \quad (7.45)$$

Mit $\mathbf{A}_{NK} = \mathbf{A}_N \mathbf{L}_{KN}^{-1}$ und $\mathbf{d}_{NK} = \mathbf{L}_{KN} \hat{\mathbf{z}}_\kappa$ erhält man damit letztlich das Minimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{d}_{NK}} \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{NK} \\ \sqrt{\kappa} \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{d}_{NK} - \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (7.46)$$

Dieses gründet wiederum auf einer zweifachen Substitution des ursprünglichen Unbekanntenvektors, denn es gilt $\mathbf{x} = \mathbf{L}_N^{-1} \mathbf{L}_{KN}^{-1} \mathbf{d}_{NK}$. Die Matrix \mathbf{K}_N zur Regularisierung des präkonditionierten Systems muss an die bereits präkonditionierte Minimierungsaufgabe angepasst werden. Sie berechnet sich mit $\mathbf{K}_N = (\mathbf{L}_N^{-1})^T \mathbf{K} \mathbf{L}_N^{-1}$. Die gleichzeitig regularisierte und präkonditionierte Variante der LSQR Methode wird als RPCA-LSQR bezeichnet. Die Implementierung erfolgt aus der Verschmelzung von Pseudocode 7.3 und 7.4.

8. Fallstudie GOCE

Dieses Kapitel zeigt den praktischen Gebrauch der aufgezeigten Methoden hinsichtlich der ESA Satellitenmission GOCE (ESA 1999; 2000). Aufgrund der Messbandbreite des Gradiometerinstruments im Bereich von 5 mHz bis 0.1 Hz erlaubt die Mission die Detailmodellierung des terrestrischen Gravitationsfeldes bis in den kurzwelligen Spektralbereich. Nach einer kurzen Einführung in die Missionsbeschreibung, erfolgt in Kapitel 8.2 die Betrachtung der Genauigkeiten der Invarianten sowie der GG bezüglich der Tensortransformation. Kapitel 8.3 stellt die closed-loop Simulation dieser Fallstudie vor, welche in Kapitel 8.4 zunächst mittels des klassischen Analyseansatzes behandelt wird. Dem folgt die Invariantendarstellung in den Kapiteln 8.5 und 8.6. Der synthetischen Berechnung von GG widmet sich Kapitel 8.7.

8.1 Missionsbeschreibung

Der GOCE Satellit wird nach dem derzeitigen Status im Frühjahr 2008 ins All gebracht werden. Ein späterer Zeitpunkt würde die operationelle Phase in den Zeitraum einer erhöhten Sonnenaktivität rücken, was sich für die hoch komplexe Kompensation der nicht-gravitativen Störeinflüsse (drag-free Prinzip) wie die Atmosphärenreibung und den Strahlungsdruck der Sonne negativ auswirken würde. Um die Energieversorgung der Plattform sicher zu stellen, wird sich der Satellit auf einer sonnensynchronen Bahn bewegen, weshalb die Missionsdauer mit geplanten 20 Monaten voraussichtlich durch eine Standby-Phase unterbrochen wird, während welcher sich der Satellit für längere Zeit im Schatten der Erde befindet. Entgegen der ursprünglich geplanten Lagekontrolle mittels Feld-Effekt-Emission Triebwerken, wird diese Aufgabe durch Magnetfeldresonanzspulen realisiert. In Tabelle 8.1 sind einige Kenngrößen der GOCE Konfiguration zusammen gefasst, Abb. 8.1 zeigt eine skizzierte Darstellung des Satelliten mit seinen wichtigsten on-board Komponenten.

Tabelle 8.1: Kenngrößen des GOCE Satelliten und der GOCE Beschleunigungsmesser

Satellit		Beschleunigungsmesser	
Masse	1250 kg	Dimension der Probemasse	$4 \times 4 \times 1 \text{ cm}^3$
Länge	5 m	Masse der Probemasse	0,32 kg
Querschnittsfläche	0,8 m ²	Genauigkeit der hoch sensitiven Achsen	$10^{-12} \text{ m s}^{-2}$
	achteckig	Genauigkeit der reduziert sensitiven Achsen	10^{-9} m s^{-2}

Aufgrund des schnellen Abklingverhaltens des Gravitationspotenzials bzw. dessen Funktionale mit wachsender Distanz zum Geozentrum ist die enorm niedrigere Bahnhöhe von ca. 250 km über der Erdoberfläche eine Voraussetzung für eine möglichst detailgetreue Auflösung des statischen Erdgravitationsfeldes. Die GOCE

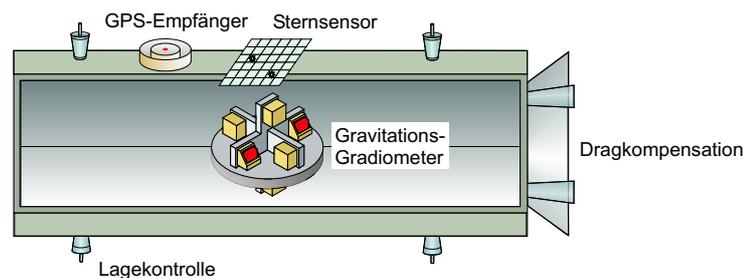


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung der GOCE on-board Komponenten (Quelle: GOCE Projektbüro Deutschland)

8.2 Genauigkeitsbetrachtungen

Die klassische Methode zur Gravitationsfeldanalyse aus Gradiometerbeobachtungen setzt die einzelnen GG direkt mit den unbekanntem Koeffizienten δv_{lm} in Verbindung, vgl. (4.21). Für ein solches Vorgehen ist die Transformationen zwischen dem Gradiometerreferenzsystem und dem Bezugssystem der harmonischen Analyse (Modellsystem) von primärer Bedeutung. Im Falle der Volltensorgradiometrie, bei der alle GG mit gleicher Genauigkeit σ_c angenommen werden, wirkt sich die Tensortransformation durch zwei Effekte aus:

1. Größenordnung der Rotationswinkel:

Der Satellit (und damit das Gradiometersystem) kann nicht exakt im Bahnsystem gehalten werden. Vielmehr ist davon auszugehen, dass er sowohl um seine quasi-radiale Achse („yaw“) als auch um die Achse in Richtung des Geschwindigkeitsvektors („roll“) eine Art Sinusschwingung ausführen wird mit einer Amplitude im Bereich von $a_{\eta_3} = 3, 5^\circ$ bzw. $a_{\eta_1} = 2, 2^\circ$ (Pail 2004). Über die Periodendauer lassen sich bisher nur vage Aussagen treffen, realistisch scheint die Periodendauer $T_{\text{rev}} = \frac{1}{f_{\text{rev}}}$ eines Umlaufs des Satelliten. Damit gilt für die Orientierungswinkel $\eta_i(t) = a_{\eta_i} \sin(2\pi f_{\text{rev}} t)$.

2. Unsicherheiten der Rotationswinkel:

Die Orientierung des Gradiometersystems bezüglich des Bahnsystems wird nicht perfekt bestimmbar sein, vielmehr treten Unsicherheiten auf, gegenüber welchen die Erdgravitationsfeldanalyse sehr sensibel reagiert. Die Genauigkeit der Orientierungswinkel wird von der Genauigkeit der Sternkameras bestimmt. In Pail (2004) wird eine normalverteilte Fehlercharakteristik (weißes Rauschen), $e_{\eta_i} \sim N(0, \sigma_{\eta_i})$, angenommen. Die dortige pessimistische Abschätzung der Standardabweichung liegt bei $\sigma_{\eta_i} = 20$ Bogensekunden.

Für die GOCE Konfiguration ist in Tabelle 8.2 die Genauigkeit der GG bezüglich unterschiedlicher Bezugssysteme in Abhängigkeit obiger Annahmen gegeben. Das konstante Genauigkeitsniveau der GG beträgt $\sigma_c = 6$ mE. Die Oszillation des Gradiometersystems um die quasi-radiale Achse des LORF verursacht eine Genauigkeitsdegradierung der Elemente V_{11} und V_{22} nach der Tensortransformation. Man beachte, dass sich erwähnte Richtung sowie diese der radialen Achse des Modellsystems nur geringfügig unterscheiden. Demgegenüber wirkt sich die Drehung um die along-track Achse vor allem negativ auf die Komponente V_{33} aus. Tatsächlich kann nach Tabelle 8.2 die ursprüngliche Messgenauigkeit der GG von 6 mE hinsichtlich der Systemtransformation nur für das Element V_{33} erhalten werden unter der Annahme, dass eine Rollbewegung des Satelliten, und damit gleichsam des Gradiometersystems, ausbleibt.

Tabelle 8.2: Genauigkeiten der GG bezüglich verschiedener Referenzsysteme (mE); $\sigma_c = 6$ mE, a_{η_1} (roll) = $2, 2^\circ$, a_{η_2} (pitch) = 0° , a_{η_3} (yaw) = $3, 5^\circ$, $\sigma_{\eta_i} = 20$ arcsec

	Gradiometersystem	Bahnsystem		Modellsystem	
		yaw	yaw+roll	yaw	yaw+roll
$\sigma_{V_{11}}$	6	14	14	67	69
$\sigma_{V_{22}}$	6	14	20	67	67
$\sigma_{V_{33}}$	6	6	14	6	14

Für GOCE sind die bisherigen Annahmen nicht ausreichend. Ergänzend zu den oben genannten Punkten kommt als dritter hinzu:

3. Unterschiedliches Genauigkeitsniveau der GG:

Nur die Elemente V_{11} , V_{22} , V_{33} und V_{13} des Gravitationstensors können mit einer Genauigkeit von 6 mE bestimmt werden. Für die verbleibenden Komponenten ist vielmehr ein Wert im Bereich von 1 E realistisch.

Wie aus Tabelle 8.3 ersichtlich, wirkt sich das unterschiedliche Genauigkeitsniveau der GG signifikant auf die Tensortransformation aus. Der negative Einfluss des Systemübergangs wird im Vergleich zu Tabelle 8.2 drastisch verstärkt. Wieder kann allein für die Komponente V_{33} die ursprüngliche Genauigkeit beibehalten werden unter Vernachlässigung der Oszillation um die along-track Achse. Als Folge dessen sollte die Gravitationsfeldanalyse basierend auf den GG im Gradiometersystem erfolgen, womit eine Transformation der Messungen umgangen werden kann. Bei diesem Vorgehen spielt sowohl die Größe der Orientierungswinkel η_i

Tabelle 8.3: Genauigkeiten der GG bezüglich verschiedener Referenzsysteme (mE) unter den Bedingungen von Tabelle 8.2 zzgl. einem reduzierten Genauigkeitsniveau der GG V_{12} und V_{23}

	Gradiometersystem	Bahnsystem		Modellsystem	
		yaw	yaw+roll	yaw	yaw+roll
$\sigma_{V_{11}}$	6	80	80	445	445
$\sigma_{V_{22}}$	6	80	94	445	445
$\sigma_{V_{33}}$	6	6	52	6	52

als auch das unterschiedliche Genauigkeitsniveau der GG hinsichtlich der Tensortransformation keine Rolle. Jedoch bleibt der Fehlereinfluss durch die Unsicherheiten der Rotationswinkel erhalten.

Der Invariantenansatz erlaubt hingegen die Analyse des Gravitationstensors unabhängig jeglichen Einflusses von Systemrotationen. Die Lage des Gradiometersystems bezüglich des Bahnsystems ist irrelevant und damit gleichsam die Größenordnung und Genauigkeit der betreffenden Orientierungswinkel. Tabelle 8.4 zeigt die Genauigkeiten der drei Fundamentalinvarianten I_1, I_2, I_3 in Abhängigkeit der Messgenauigkeiten der GG im Gradiometersystem. Um den Fehlereinfluss der ungenauen Tensorelemente auf die Berechnung der Invarianten zu umgehen, wurde bereits in Kapitel 5.5 die synthetische Berechnung der GG V_{12} und V_{23} aus gradiometrischer Vorinformation behandelt. Tatsächlich ist der Einfluss dieser Elemente auf die Invariantenberechnung bzw. auf das entsprechende linearisierte funktionale Modell so klein, dass sich ein Unterschied deren Genauigkeit von 6 mE zu 1 E nur geringfügig bemerkbar macht. Dieser Aspekt wurde bereits in Kapitel 5 angesprochen und findet hier seine numerische Bestätigung.

Tabelle 8.4: Größenordnung und Genauigkeit der Fundamentalinvarianten I_1, I_2, I_3

	I_1 (E)	I_2 (E ²)		I_3 (E ³)	
		$\sigma_{V_{12}, V_{23}} = 6 \text{ mE}$	$\sigma_{V_{12}, V_{23}} = 1 \text{ E}$	$\sigma_{V_{12}, V_{23}} = 6 \text{ mE}$	$\sigma_{V_{12}, V_{23}} = 1 \text{ E}$
I_i	–	$5,7 \cdot 10^6$	$5,7 \cdot 10^6$	$5,2 \cdot 10^9$	$5,2 \cdot 10^9$
σ_{I_i}	–	$2,014 \cdot 10^1$	$2,032 \cdot 10^1$	$3,379 \cdot 10^4$	$3,404 \cdot 10^4$

8.3 Closed-loop Simulation

Die Anwendung der in den vorigen Kapitel dargestellten Konzepte wird anhand einer closed-loop Simulation auf ihre Tauglichkeit für die SGG Analyse am Beispiel GOCE durchgeführt. Abbildung 8.3 zeigt die entsprechende Prozessierungskette von den simulierten Level 1b Beobachtungsdaten hin zur Erdgravitationsfeldlösung (Level 2 Produkt). Der Vergleich zwischen den Eingangsparametern für die Simulation und der Schätzung derselben erlaubt die Evaluierung der Prozessierungsschritte. Weiterhin ist die relative Beurteilung der Invariantenmethode gegenüber des klassischen Analyseansatzes gegeben.

In der Synthese erfolgt die Simulation des kinematischen Satellitenorbits und des Gravitationstensors als eine Zeitreihe basierend auf einem a priori bekannten Erdgravitationsfeld, für welches im Rahmen dieser Untersuchungen das EGM96 (Lemoine et al. 1998) komplett bis Grad und Ordnung 300 Eingang findet. Die Initialwerte für die numerische Bahnintegration über einen Zeitraum von 30 d (Samplingrate 5 s) sind in Tabelle 8.5 gegeben. Die Synthese der GG erfolgt bezüglich des LORF, vgl. Kapitel A.1. Der hier verwendete Datensatz wurde im Rahmen der IAG Special Commission 7 (SC7) Aktivitäten generiert (Ilk et al. 2003).

Die Vorprozessierung bringt die Beobachtungen mit der Modellierung des Gravitationsfeldes in Verbindung. Verschiedene Methoden zur numerischen Differentiation (z.B. Splines, smoothing Splines, Gregory-Newton Interpolation, Polynomregression) können angewandt werden, um aus der Position des Satelliten dessen Geschwindigkeit und Beschleunigung zu berechnen (Baur & Grafarend 2006, Reubelt et al. 2006). Diese

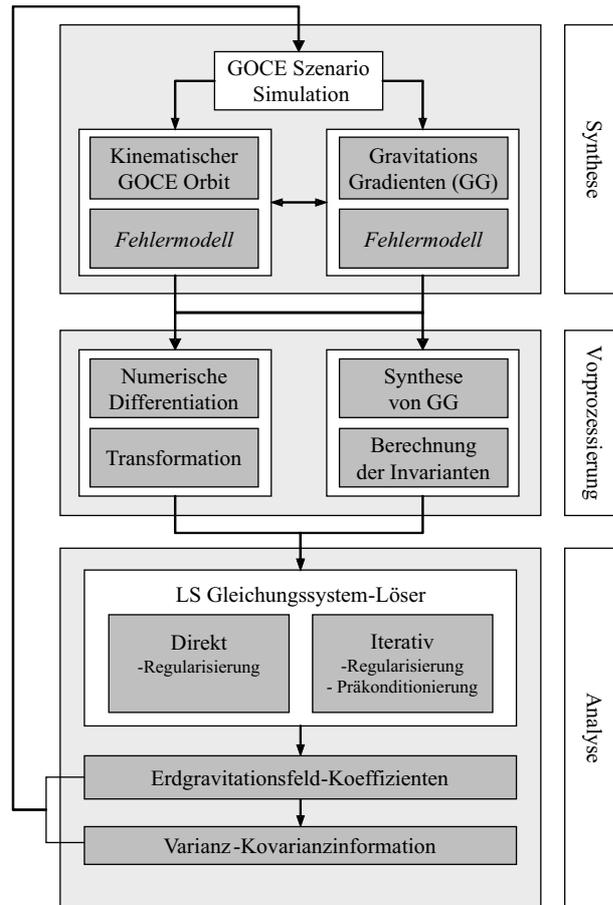


Abbildung 8.3: Flussdiagramm der closed-loop Simulation

werden für die Transformation der GG zwischen dem Bahnsystem und dem Referenzsystem der harmonischen Analyse (Modellsystem) benötigt, vgl. Kapitel A.2. Im Analyseschritt erfolgt schließlich die Schätzung der Eingangsparameter basierend auf den synthetischen Beobachtungsdaten. Für diese Aufgabe stehen sowohl der direkte Gleichungssystemlöser nach Kapitel 6 als auch die LSQR Methode nach Kapitel 7 zur Verfügung.

Stochastisches Modell. Um den Einfluss des Messrauschens untersuchen zu können, wird für die Gradiometrie ein realistisches Fehlermodell zur Verfügung gestellt. Das GOCE Gradiometer zeichnet sich durch einen beschränkten spektralen Bereich höchster Messgenauigkeit aus. Dieser reicht von 5 mHz bis 0,1 Hz und wird als Messbandbreite (MBW, Measurement Band Width) bezeichnet (ESA 1999). Nur innerhalb der MBW sind die GG mit einer Genauigkeit von wenigen mE erfassbar, außerhalb nimmt das Fehlerverhalten der Messungen stark zu. Die Frequenzabhängigkeit der Messgenauigkeit wird im Allgemeinen in Form von Fehlerspektraldichten (error PSD, error Power Spectral Density) beschrieben. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Gradiometermessrauschen ist gekennzeichnet durch eine Genauigkeit der quasi-radialen Tensorkomponente von ca. $3 \text{ mE Hz}^{-\frac{1}{2}}$ innerhalb der MBW.

Die Modellierung der zeitlichen Korrelationen zwischen den GG erfolgt anhand eines autoregressiven Moving-Average (ARMA) Prozesses. Dieses Vorgehen ist in Schuh (1996) im Detail beschrieben und soll hier nur kurz skizziert werden. Die Filtergleichung

$$\sum_{i=0}^{js} s_i y_{j-i} = \sum_{i=0}^{jt} t_i \bar{y}_{j-i} \quad (8.1)$$

setzt die korrelierten Beobachtungen mit den unkorrelierten Werten in Verbindung. In Matrixschreibweise liest sich (8.1)

$$\mathbf{S} \mathbf{y} = \mathbf{T} \bar{\mathbf{y}}, \quad (8.2)$$

wobei \mathbf{S} und \mathbf{T} Bandstruktur aufweisen. Die Breite der Bänder entspricht den Korrelationslängen js und

Tabelle 8.5: Initialwerte für die Simulation des GOCE Szenarios

Keplerelement	Bezeichnung	initialer Wert
große Halbachse der Bahnellipse	a	6628 000 m
Exzentrizität der Bahnellipse	e	0,001
Inklination der Bahnebene	I	$96,6^\circ$
Rektaszension des aufsteigenden Knotens	Ω	0°
Argument des Perigäums	ω	0°
mittlere Anomalie	M	0°

jt . Ist $js > 0$ und $jt > 0$, so liegt ein ARMA Prozess vor. Die Filterkoeffizienten lassen sich aus der Übertragungsfunktion des Filters ermitteln. Die Sequenz der korrelierten Beobachtungen wird aus (8.1) erhalten mit

$$y_j = \sum_{i=0}^{jt} t_i \bar{y}_{j-i} - \sum_{i=1}^{js} s_i y_{j-i} \quad (8.3)$$

bzw. lautet invers dazu der Dekorrelationsprozess

$$\bar{y}_j = \sum_{i=0}^{js} s_i y_{j-i} - \sum_{i=1}^{jt} t_i \bar{y}_{j-i}. \quad (8.4)$$

Beide rekursiven Prozesse können wiederum in Matrixschreibweise formuliert werden. Mit (8.2) gilt $\mathbf{y} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T} \bar{\mathbf{y}}$ bzw. $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{y}$. Damit wird für den Filter \mathbf{F} in (6.12)

$$\mathbf{F} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{S}, \quad (8.5)$$

$$\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T}. \quad (8.6)$$

Die Varianz-Kovarianzinformation der Invarianten lässt sich über Fehlerfortpflanzung ermitteln. Sei

$$\mathcal{J} = f(V_{11}, V_{12}, V_{13}, V_{22}, V_{23}, V_{33}) = c_1 V_{11} + \dots + c_6 V_{33} \quad (8.7)$$

das linearisierte funktionale Modell der Invariantenberechnung mit den Linearfaktoren c_i , so gilt für die Dispersion der Invarianten

$$\mathbf{D}(\mathcal{J}) = \mathbf{J} \mathbf{D}(\mathbf{V}) \mathbf{J}^T. \quad (8.8)$$

Darin ist \mathbf{J} die Matrix der Linearfaktoren und $\mathbf{D}(\mathbf{V})$ die gesamte Varianz-Kovarianzmatrix der GG. Diese setzt sich zusammen aus deren Dispersionsmatrizen und den Kovarianzmatrizen zwischen den einzelnen GG:

$$\mathbf{D}(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}(V_{11}) & \mathbf{C}(V_{11}, V_{12}) & \cdots & \mathbf{C}(V_{11}, V_{33}) \\ & \mathbf{D}(V_{12}) & \cdots & \\ & & \ddots & \\ sym. & & & \mathbf{D}(V_{33}) \end{pmatrix}. \quad (8.9)$$

Die Dimension von $\mathbf{D}(\mathbf{V})$ beträgt $6n \times 6n$. Mit Vernachlässigung der Korrelationen zwischen den verschiedenen Typen von GG nimmt $\mathbf{D}(\mathbf{V})$ blockdiagonale Struktur an und $\mathbf{D}(\mathcal{J})$ vereinfacht sich zu

$$\mathbf{D}(\mathcal{J}) = \mathbf{J}_1 \mathbf{D}(V_{11}) \mathbf{J}_1^T + \dots + \mathbf{J}_6 \mathbf{D}(V_{33}) \mathbf{J}_6^T. \quad (8.10)$$

Mit $\mathbf{D}(V_{11}) = (\mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1)^{-1}$ usw. in (8.10) eingesetzt, resultiert schließlich

$$\mathbf{D}(\mathcal{J}) = \mathbf{J}_1 \mathbf{F}_1^{-1} (\mathbf{J}_1 \mathbf{F}_1^{-1})^T + \dots + \mathbf{J}_6 \mathbf{F}_6^{-1} (\mathbf{J}_6 \mathbf{F}_6^{-1})^T = \sum_{i=1}^6 (\mathbf{J}_i \mathbf{F}_i^{-1}) (\mathbf{J}_i \mathbf{F}_i^{-1})^T. \quad (8.11)$$

Die Varianz-Kovarianzinformation der Invarianten wird primär durch die Anwendung der Linearfaktormatrix auf die inverse Filtermatrix erhalten. Letztere wurde in (8.6) bereits eingeführt zur Erzeugung der Sequenz korrelierter Beobachtungen. Der entsprechende Rekursionsprozess ist für die Evaluierung von (8.11) anzusetzen. Weitere — dazu gehörend auch numerische — Untersuchungen zur Berechnung von $\mathbf{D}(\mathcal{J})$ sowie die sich daran anschließende Notwendigkeit zur Dekorrelation der Invarianten sollen nicht Bestandteil dieser Arbeit sein.

Numerische Untersuchungen. Voraus bemerkt sei an dieser Stelle, dass sämtliche rechentechnische Einzelheiten zu den im Folgenden präsentierten Berechnungen in Kapitel 9 zu finden sind. In diesem Zusammenhang wird dort auch der Vergleich zwischen der direkten und iterativen Lösungsmethode angeführt, so dass hier volle Konzentration auf die Schätzung der Inputparameter gemäß Abb. 8.3 gelegt wird, deren Güte sich unabhängig von der Wahl des Gleichungssystemlösers zeigt. Dies erfolgt in vier Schritten:

1. Bestimmung einer Referenzlösung basierend auf dem in Kapitel 4 behandelten klassischen Analyseansatz. Diese Schätzung des Unbekanntenparameters dient zur relativen Validierung der Ergebnisse der Invariantenmethode.
2. Schätzung des Unbekanntenvektors mittels der Analyse der Invarianten I_2 und I_3 unter Berücksichtigung der BFL und der Technik des frühzeitigen Reihenabbruchs.
3. Schätzung des Unbekanntenvektors mittels der Analyse der Invarianten I_2 und I_3 unter Berücksichtigung der Linearisierung über die Störungsrechnung.
4. Schätzung des Unbekanntenvektors mittels der Analyse der Invarianten I_2 und I_3 unter Berücksichtigung gradiometrischer Vorinformation.

Die folgenden Lösungen werden primär in Form von (empirischen) Fehler RMS Werten pro Entwicklungsgrad l (DE-RMS, Degree-Error Root Mean Square) dargestellt, berechnet mit

$$\text{DE-RMS}_l = \sqrt{\frac{\sum_{m=-l}^l (v_{lm}^{\text{ref}} - \hat{v}_{lm})^2}{2l + 1}}. \quad (8.12)$$

Die Größen \hat{v}_{lm} bezeichnen darin die Schätzung der unbekanntenen Gravitationsfeldkoeffizienten und die v_{lm}^{ref} sind, falls anderweitig nicht angegeben, mit den Inputparametern der Simulation zu identifizieren, welche sich zu jenen des EGM96 ergeben.

Aufgrund der aus dem Bahndesign des GOCE Satelliten resultierenden Polarlochproblematik wird für sämtliche Darstellungen der DE-RMS_l Werte von den niederen Ordnungen abgesehen. Eine (sehr grobe) Faustformel nach v. Gelderen & Koop (1997) gibt die maximale nicht auflösbare Ordnung m_s in Abhängigkeit des Entwicklungsgrades l und der Inklination I mit $m_s = \lfloor \frac{\pi}{2} - I \rfloor l$ an.

Dieser Zusammenhang wurde über Quadraturverfahren abgeleitet. Für LS Probleme halbiert sich der Wert (Sneeuw & v. Gelderen 1997). Dies würde bei einer Auflösung von $L = 100$ in einer maximalen Dimension von $m_s = 6$ resultieren, entsprechend gilt $m_s = 12$ für $L = 200$. Ohne Berücksichtigung der Gradabhängigkeit von m_s und um darüber hinaus auf der sicheren Seite zu stehen, werden im Folgenden bei der Darstellung von DE-RMS_l Werten für eine Auflösung bis $L = 100$ die Ordnungen $m < m_s^{10} = 10$ und für $L = 200$ diejenigen für $m < m_s^{20} = 20$ vernachlässigt. Darüber hinaus sind teilweise die relativen empirischen Fehler pro Koeffizient dargestellt, welche sich berechnen mit

$$e_{v_{lm}}^{\text{rel}} = \left\| \frac{v_{lm}^{\text{ref}} - \hat{v}_{lm}}{v_{lm}^{\text{ref}}} \right\|. \quad (8.13)$$

8.4 Analyse der Gravitationsgradienten

Die Grundlage für den klassischen Analyseansatz bildet der lineare funktionale Zusammenhang (4.24). Das LS Problem wird demnach bezüglich des Gradiometerreferenzsystems (GRF) formuliert, welches für die hier durchgeführte Fallstudie mit dem Bahnsystem (LORF) zusammen fallen möge. Die entsprechenden Transformationen zwischen Modellsystem und LORF sind mit (A.27) und (A.23) gegeben. Letztere ist eine Funktion der Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung des Satelliten.

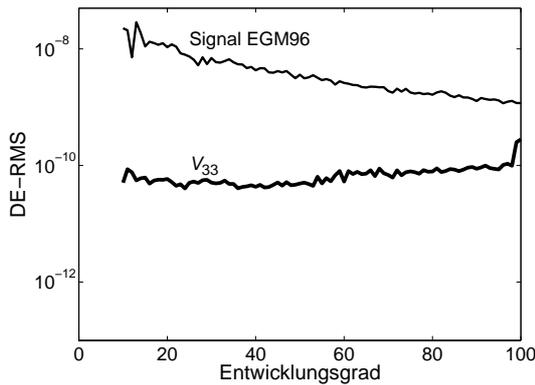


Abbildung 8.4: Analyse der Tensorkomponente V_{33} ; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

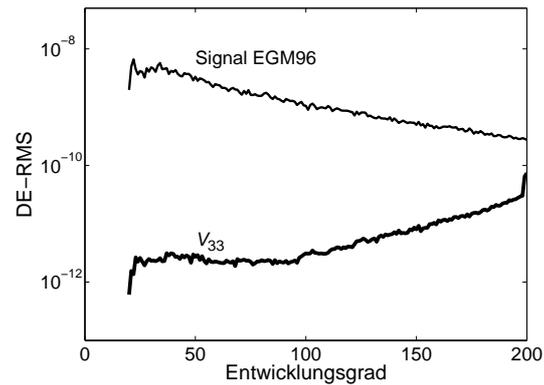


Abbildung 8.5: Analyse der Tensorkomponente V_{33} ; $L = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

Abbildungen 8.4 und 8.5 zeigen die Ergebnisse der Koeffizientenschätzung aus fehlerfrei simulierten Daten, dargestellt in $DE-RMS_l$ Werten. Dabei ist zu beachten, dass hier rein die Analyse der Tensorkomponente V_{33} erfolgt. Die Rückrechnung des Unbekanntenvektors wird für verschiedene Auflösungen voran getrieben. Leck-Effekte (spectral leakage) schlagen sich für eine niedere Auflösung weit stärker ins Gewicht als dies für eine detailreichere Modellierung der Fall ist, weshalb die Güte der Lösung mit zunehmendem Entwicklungsgrad steigt. Die Diagramme der relativen empirischen Fehler in den Abb. 8.6 und 8.7 bringen deutlich den Einfluss der polaren Datenlücken zum Ausdruck. Der Bereich nicht auflösbarer niederer Ordnungen vergrößert sich mit wachsendem Entwicklungsgrad. Betrachtet über das gesamte Spektrum nimmt er Keilform an.

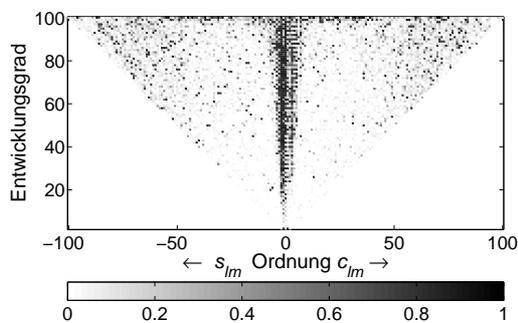


Abbildung 8.6: Relative Empirische Fehler gemäß Abb. 8.4

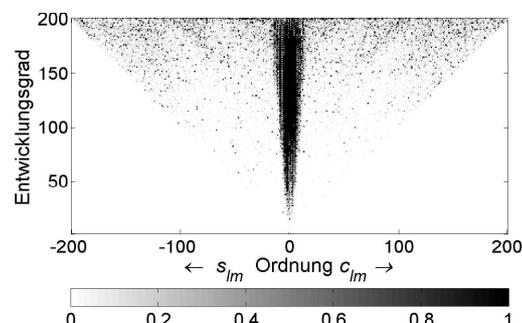


Abbildung 8.7: Relative Empirische Fehler gemäß Abb. 8.5

Wie bereits erwähnt, trägt im Vergleich zu den einzelnen weiteren Elementen die Tensorkomponente V_{33} den Hauptanteil der gradiometrischen Information. Dazu sei auf Abb. 8.8 und 8.9 verwiesen, welche eine Gegenüberstellung der quasi-radialen Analyse zu derjenigen basierend auf allen drei Hauptdiagonalelementen des Gravitationsensors zeigt. Durch die Hinzunahme der beiden horizontalen Komponenten steigt die Qualität der Lösung nur in geringem Maße. Im Folgenden wird stets die quasi-radiale Schätzung als Referenzlösung dienen, da die Invarianten separat betrachtet werden und somit die gleiche zeitliche Datenüberdeckung sowie Redundanz der Beobachtungen gewährleistet wird.

Schließlich zeigen Abb. 8.10 und 8.11 die Analyseergebnisse unter Berücksichtigung der realitätsnahen Fehlercharakteristik des GOCE Gradiometers. Ohne Dekorrelation der Beobachtungen erlaubt die 30-tägige Datensimulation keine Auflösung des Gravitationsfeldes über Grad und Ordnung 160 hinaus. Nur die Berücksichtigung der stochastischen Eigenschaften des Gradiometers gewährt im Analyseprozess die Gravitationsfeldbestimmung im kurzwelligen Spektralbereich.

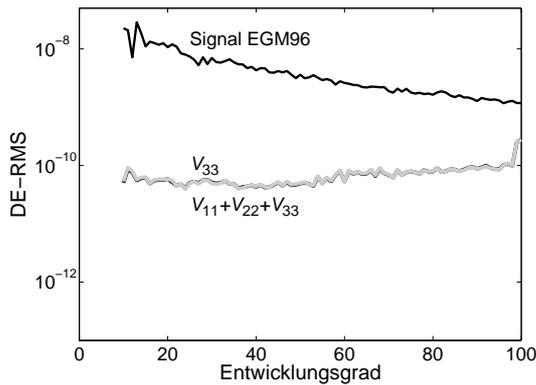


Abbildung 8.8: Analyse der Hauptdiagonalelemente des Gravitationsensors; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

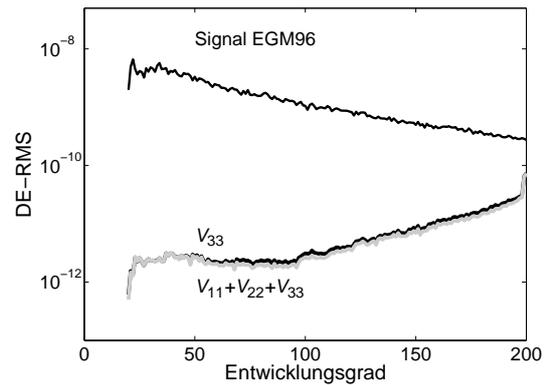


Abbildung 8.9: Analyse der Hauptdiagonalelemente des Gravitationsensors; $L = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

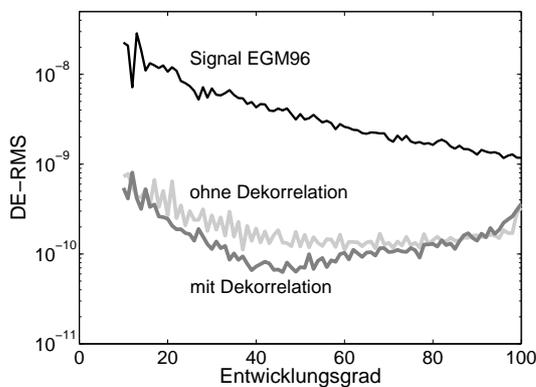


Abbildung 8.10: Analyse der Tensorkomponente V_{33} ; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerbehaftet)

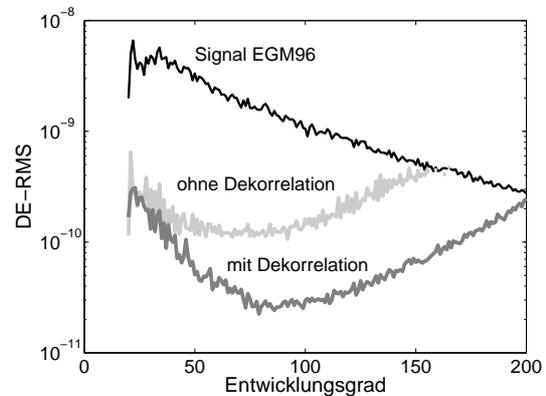


Abbildung 8.11: Analyse der Tensorkomponente V_{33} ; $L = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerbehaftet)

8.5 Invariantenanalyse — strenge Linearisierung (BFL)

Als Näherungsfeld der ersten Iteration zur Aufstellung der partiellen Ableitungen (5.16a) bis (5.18b) wird für die BFL das Normalfeld GRS80 bzw. alternativ dazu das Modell OSU86F (Rapp & Cruz 1986) verwendet. Wie in Kapitel 5.4 ausgeführt, bringt die strenge Linearisierung enorme rechentechnische Probleme mit sich. Deshalb wurde dort mit (5.19) der frühzeitige Reihenabbruch eingeführt. Zur Demonstration des Effekts dieser Maßnahme sei von der fehlerfreien Volltensorgradiometrie ausgegangen. In diesem Falle ist die Rekonstruktion von Nebendiagonalelementen nicht erforderlich. Der frühzeitige Reihenabbruch entspricht einer approximierten Evaluierung der Designmatrix \mathbf{A} . Abbildungen 8.12 und 8.13 zeigen Ergebnisse besagten Vorgehens, abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes. In die Näherungswerte \mathbf{y}_0 zur Bereitstellung des reduzierten Beobachtungsvektors, vgl. (6.8), geht entsprechend das Linearisierungsfeld bis zur Auflösung L^{ref} ein.

Die DE-RMS_l Werte der Invariantenlösungen in den genannten Abbildungen zeigen die Differenzen zur Referenzlösung in Abb. 8.4 auf. Die Fehlerkurve der letzteren findet sich in den Abb. 8.12 und 8.13 wieder. Zweierlei muss festgehalten werden. Zum einen erweist sich der Linearisierungsfehler als äußerst klein. Obige Ergebnisse stellen sich bereits nach der ersten Iteration ein. Die DE-RMS_l Werte bleiben abgesehen von den sehr niederen Graden sämtlich unterhalb der Fehlerkurve der V_{33} Schätzung. Zum anderen zeigt sich die Beschränkung auf ein sehr langwelliges Linearisierungsfeld als erste Näherung für völlig ausreichend. Die Summe aus Zentralterm (GRS80) und Abplattungsterm (GRS80) dominiert klar, was mittels des Vergleichs zur Lösung mit $L^{\text{ref}} = 10$ (OSU86F) deutlich wird. Daran schließt die Aussage, dass der iterative Prozess der Invariantenanalyse für die fehlerfreie Volltensorgradiometrie bereits nach der ersten Iteration sehr gute

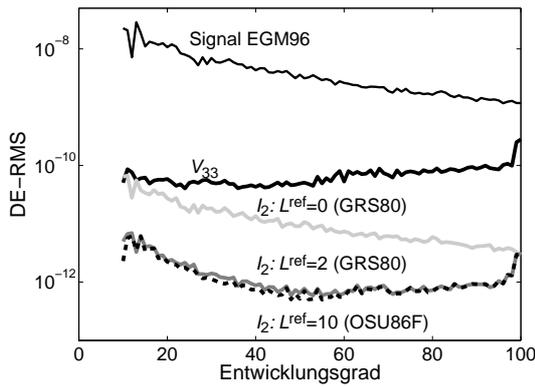


Abbildung 8.12: Analyse der Invariante I_2 , abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

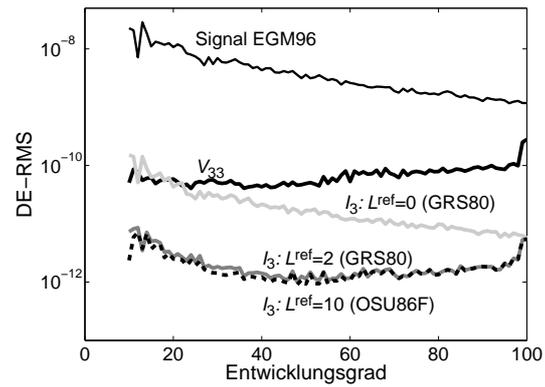


Abbildung 8.13: Analyse der Invariante I_3 , abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

Ergebnisse erzielt (siehe dazu auch Kapitel 8.6). Dies ist im übrigen eine Bedingung für die Maßnahme des frühzeitigen Reihenabbruchs, wenn davon ausgegangen wird, dass die verbesserte Schätzung zur Aufstellung der Designmatrix nur in dem Spektralbereich eingeht, welcher durch die Linearisierung abgedeckt ist. Das heißt eine Verbesserung der Parameterschätzung kann hier durch weitere Iterationen nicht erwartet werden. Dazu bedürfte es mit fortschreitendem Iterationsprozess der Linearisierung über den gesamten Spektralbereich der Gravitationsfeldauflösung. Dafür bietet sich die Linearisierung mittels der Störungsrechnung als weitaus effizienter an.

8.6 Invariantenanalyse — Linearisierung über die Störungsrechnung

Das funktionale Modell der Gravitationsfeldanalyse basierend auf der Störungsrechnung ist mit (5.23) bzw. (5.25) gegeben. Das Vorgehen umgeht die Maßnahme des frühzeitigen Reihenabbruchs, womit $L^{\text{ref}} = L$ gilt. Um die Äquivalenz der BFL und der Linearisierung über die Störungsrechnung aufzuzeigen, sind in den Abb. 8.14 und 8.15 dennoch die entsprechenden Ergebnisse für $L^{\text{ref}} = 0, 2, 10$ dargestellt. Wiederum kommen hierzu das Normalfeld GRS80 bzw. OSU86F zur Linearisierung zum Einsatz. Entsprechend der vorigen Darstellungen sind die Invariantenlösungen wiederum relativ zur quasi-radialen Schätzung zu verstehen. Letztere ist weiterhin in den Abbildungen enthalten. Darüber hinaus enthält Abb. 8.15 die Schätzung für $L^{\text{ref}} = 100$. Wie zu erwarten, unterscheidet sich diese nur geringfügig von $L^{\text{ref}} = 10$, da zuvor schon der

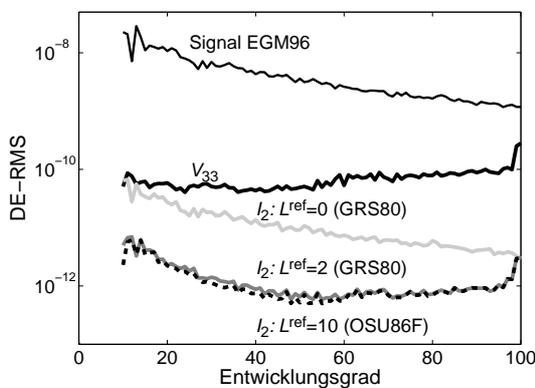


Abbildung 8.14: Analyse der Invariante I_2 , abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

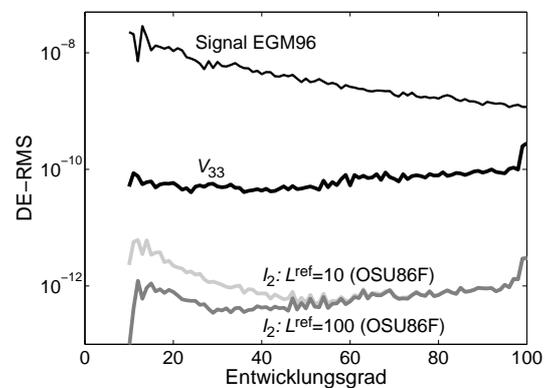


Abbildung 8.15: Analyse der Invariante I_2 , abhängig vom maximalen Entwicklungsgrad L^{ref} des Linearisierungsfeldes; $L = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

Linearisierungsfehler aufgrund des frühzeitigen Reihenabbruchs als klein erkannt wurde. Im Weiteren wird die fehlerfreie Volltensorgradiometrie betrachtet hinsichtlich

- dem Einfluss der Anzahl an Iterationen auf die Parameterschätzung und
- dem Einfluss des gewählten Linearisierungsfeldes.

Iterative Parameterschätzung. Zunächst bilden weiterhin fehlerfreie Beobachtungen den Ausgangspunkt für die Parameterschätzung. Außerdem gilt im Folgenden stets $L^{\text{ref}} = L$, das heißt ein frühzeitiger Reihenabbruch der Linearisierung findet nicht statt. Abbildungen 8.16 und 8.17 zeigen den Iterationsprozess ausgehend von der Wahl des Modells OSU86F als Linearisierungsfeld der ersten Iteration. Insgesamt sind drei Iterationen ausgeführt und die Invariantenlösungen wiederum in Form von Differenzen zur V_{33} Schätzung dargestellt. Für die praktische Anwendung zeigt sich, dass Konvergenz schon nach wenigen Iterationen erreicht ist. Tatsächlich stellt sich jeweils nach der zweiten Iteration keine erkennbare Verbesserung der Invariantenlösung gemessen an der quasi-radialen Referenzlösung ein. Damit kann der iterative Prozess bereits nach der zweiten Iteration abgebrochen werden.

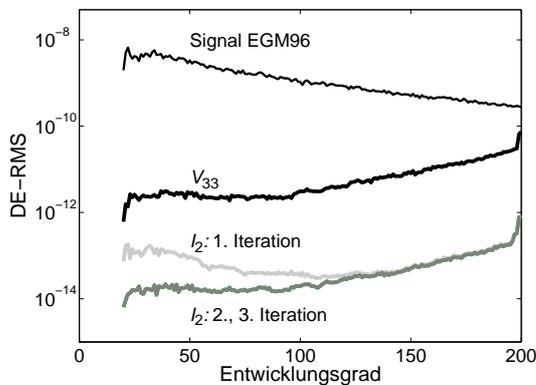


Abbildung 8.16: Analyse der Invariante I_2 ; $L = L^{\text{ref}} = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

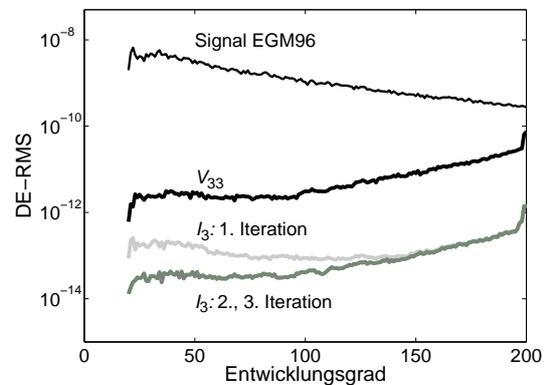


Abbildung 8.17: Analyse der Invariante I_3 ; $L = L^{\text{ref}} = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei)

Abbildungen 8.18 und 8.19 zeigen den Einfluss des Messrauschens auf die Invariantenanalyse. Für alle GG wurde dabei die gleiche Fehlercharakteristik angenommen. Eine Dekorrelation der Beobachtungen findet nicht statt. Im Gegensatz zu den bisherigen Darstellungen werden dabei die Invariantenlösungen nicht relativ zu der quasi-radialen Schätzung präsentiert. Vielmehr enthalten die Kurven die absoluten DE-RMS_I Werte. Auffallend ist, dass in Abb. 8.18 die Fehlerkurve der Invariantenanalyse unterhalb derjenigen der

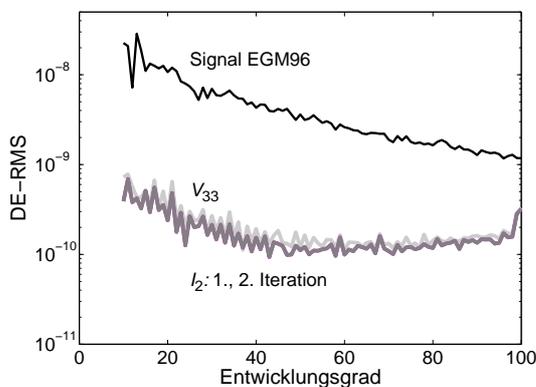


Abbildung 8.18: Analyse der Invariante I_2 ; $L = L^{\text{ref}} = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerbehaftet)

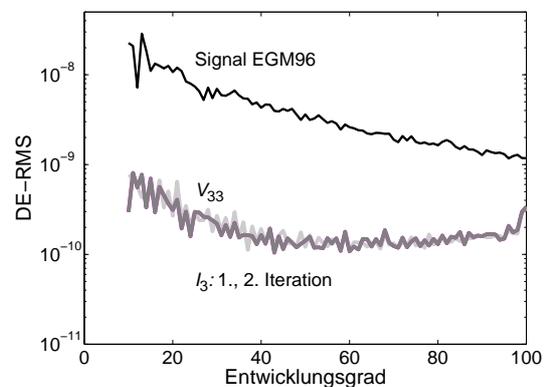


Abbildung 8.19: Analyse der Invariante I_3 ; $L = L^{\text{ref}} = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerbehaftet)

Referenzlösung verläuft. Ob die Invariantendarstellung jedoch tatsächlich weniger anfällig auf Messrauschen reagiert, muss umfassend untersucht werden. Die ersten Eindrücke stimmen zuversichtlich.

Wahl des Linearisierungsfeldes. Wie bereits mehrfach erwähnt, muss der iterative Prozess basierend auf a priori gegebener Information gestartet werden. Gemäß Abb. 8.20 wirkt sich die Güte des Näherungsfeldes auf das Ergebnis der ersten Iteration aus. Das Schwerfeldmodell EIGEN-GRACE02s (Reigber et al. 2005b) kommt der Simulationsgrundlage EGM96 weit näher als das Modell OSU86F. Entsprechend unterscheidet sich die Güte der Lösungen in Abb. 8.20. Ein signifikanter Unterschied ist ausschließlich im langwelligen Bereich bis ca. $l = 50$ ersichtlich. Bereits nach der zweiten Iteration, vgl. Abb. 8.21, ist kein wesentlicher Unterschied mehr zu erkennen. Damit zeigt sich, dass die Wahl des Linearisierungsfeldes nur geringen Einfluss auf den Iterationsprozess nimmt. Im Endeffekt kann jedes beliebige realitätsnahe Näherungsfeld heran gezogen werden, ohne das Konvergenzverhalten signifikant zu beeinflussen. Diese Ergebnisse stellen sich analog für die Analyse der Invariante I_3 ein.

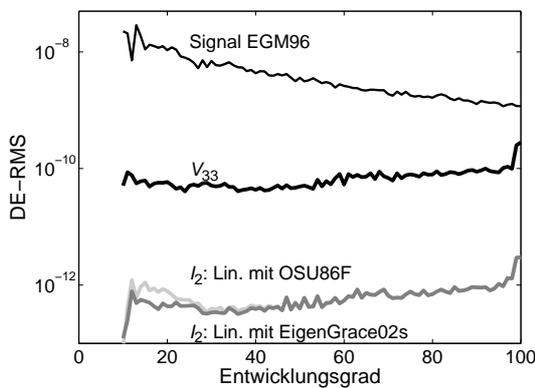


Abbildung 8.20: Analyse der Invariante I_2 ; $L = L^{\text{ref}} = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei), 1. Iteration

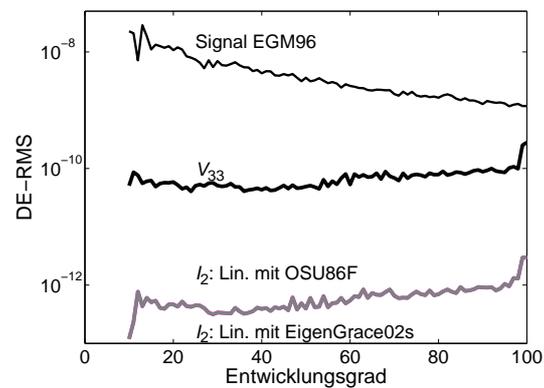


Abbildung 8.21: Analyse der Invariante I_2 ; $L = L^{\text{ref}} = 100$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei), 2. Iteration

8.7 Gradiometrische Vorinformation

Den bisherigen Berechnungen lag stets die Volltensorgradiometrie zugrunde, das heißt die Annahme, dass alle GG aus der Sensorregistration abgeleitet werden können. Im Weiteren erfolgt der Übergang auf die Gradiometrie vom Typ GOCE, für welche die Elemente V_{12} und V_{23} des Gravitationstensors als unbekannt angenommen sind. Gemäß Kapitel 5.5, im speziellen Abb. 5.1, wird deren synthetische Bereitstellung untersucht. Dazu werden die genannten GG für die erste Iteration alternativ

- zu null gesetzt ($GV = 0$) bzw.
- aus dem a priori Feld OSU86F ($GV = \text{OSU86F}$)

evaluiert. Für den letzt genannten Fall erfolgt die synthetische Berechnung bis zum maximalen Entwicklungsgrad $L^{\text{syn}} = L$. Des weiteren gilt für alle in diesem Kapitel durchgeführten Berechnungen $L^{\text{ref}} = L$. Auf die Darstellung der Invariante I_3 wird hier verzichtet. Die getroffenen Aussagen gelten für deren Analyse analog.

Wenngleich der Einfluss der Elemente V_{12} und V_{23} auf die Invariantenberechnung bzw. die Berechnung der Einträge der Designmatrix klein ausfällt, vgl. Tabelle 8.4, zerstört gemäß Abb. 8.22 und 8.23 deren ungenaue bzw. nicht vorhandene Bereitstellung eine möglichst hochwertige Parameterschätzung. In genannten Abbildungen ist wiederum die Ergebniskurve der V_{33} Schätzung enthalten. Die weiteren Plots der $DE\text{-}RMS_l$ Werte zeigen relativ dazu die Lösungen aus der Invariantenanalyse.

Die Vernachlässigung der Elemente ($GV=0$) führt auf das Ergebnis der ersten Iteration in Abb. 8.22. Die weiteren Lösungen stellen sich dann ein, wenn die jeweilige Schätzung der $(i - 1)$ -ten Iteration als Grundlage für die synthetische Berechnung der Elemente bis zum Entwicklungsgrad L^{syn} in der i -ten Iteration

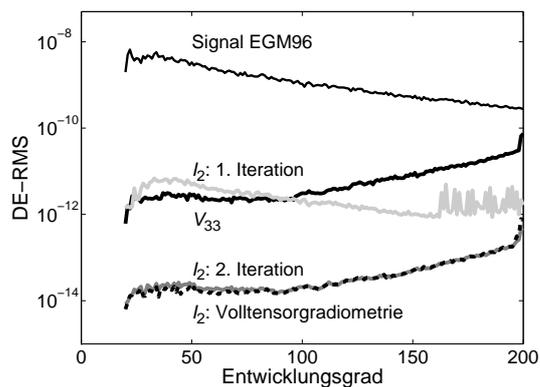


Abbildung 8.22: Analyse der Invariante I_2 ; $L = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei); $GV = 0$

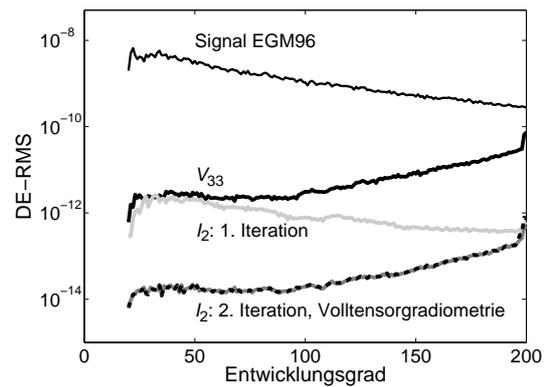


Abbildung 8.23: Analyse der Invariante I_2 ; $L = 200$; $n = 518\,400$ Beobachtungen (fehlerfrei); $GV = OSU86F$

heran gezogen wird. Gleiches Vorgehen ist angewandt in Bezug auf Abb. 8.23, wobei hier als initiale Näherungslösung im Sinne der gradiometrischen Vorinformation nicht die Trivallösung Eingang findet, sondern das Modell OSU86F. In diesem Falle konvergiert der iterative Prozess bezogen auf die erste Iteration schneller zur Solllösung, welche hier als diejenige verstanden wird, die sich im Falle der Volltensorgradiometrie einstellt. Letztlich führen beide Vorgehensweisen gleichermaßen zum Erfolg. Nach der zweiten Iteration ist für beide Methoden die Solllösung erreicht. Damit ist im Zuge der synthetischen Berechnung von GG keine a priori Information notwendig. In der ersten Iteration kann die Trivallösung verwendet werden. Ab der zweiten Iteration greift die Evaluierung der unbekanntten GG basierend auf dem aktuell vorliegenden Iterationsergebnis.

9. High Performance Computing

Ziel dieses Kapitels ist es auf rechentechnische Aspekte betreffend der vorhergegangenen numerischen Beispiele näher einzugehen. Bereits in Austen et al. (2006) wird das LSQR Verfahren mit der strengen Lösungsmethode dahingehend verglichen. Hier erfolgt einerseits die Erweiterung der Studien auf verschiedene Rechnerarchitekturen sowie andererseits die detaillierte Vorstellung einer effizienten Parallelisierung der Algorithmen. Diese Betrachtungsweisen haben zwar auf die Güte der vorgestellten Verfahren zur SGG Analyse keinen Einfluss, erweisen sich jedoch als fundamentale Grundlage für deren praktischen Gebrauch. Hinsichtlich der GOCE Datenauswertung resultiert aus zweierlei Gründen eine rechentechnisch äußerst anspruchsvolle Aufgabe. Diese sind

- die enorm große Anzahl der Beobachtungen n im Bereich 10^7 und
- die große Anzahl der unbekannt Parameter u im Bereich 10^4 .

Beide schlagen sich in der Dimension der Designmatrix $\mathbf{A}(n \times u)$ bzw. der Normalgleichungsmatrix $\mathbf{N}(u \times u)$ nieder. Für die Invariantenanalyse kommt hinzu, dass die Nicht-Linearität des entsprechenden funktionalen Modells mit einem iterativen Lösungsprozess einhergeht, was den Aufwand zur Schätzung des Unbekanntenvektors $\hat{\mathbf{x}}$ um die Anzahl der notwendigen Iterationen an die Näherungslösung vervielfacht. Im Folgenden wird nicht zwischen dem klassischen und dem Invariantenansatz unterschieden. Denn für eine gleich dimensionierte Problemgröße gestaltet sich der Aufwand zur Berechnung von \mathbf{A} für beide Methoden als vergleichbar groß wenn angenommen wird, dass

- die Linearisierung der Invariantenmethode über die Störungsrechnung erfolgt und
- für die klassische Vorgehensweise das Tangentialsystem als Analysesystem gewählt wird, das heißt eine Rotation der Basisfunktionen ausbleibt.

In diesem Falle ergibt sich der Mehraufwand des Invariantenansatzes primär in der Synthese der GG-Näherungswerte basierend auf dem Linearisierungsfeld bis Grad und Ordnung L^{ref} sowie der Bereitstellung der synthetischen GG (gradiometrische Vorinformation) mit einem maximalen Entwicklungsgrad von L^{syn} . Insgesamt umfasst der Mehraufwand folglich die Synthese der GG bis $\max\{L^{\text{ref}}, L^{\text{syn}}\} \leq L$. Der Aufwand zur Berechnung von $\mathbf{N} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ ist für beide Methoden identisch. Für verschiedene Analyseszenarien verdeutlicht Tabelle 9.1 den rechenzeitlichen Aufwand zur Aufstellung der Designmatrix auf einem standardmäßigen Arbeitsplatzrechner (Pentium 4 Prozessor, Taktfrequenz 3,4 GHz) mit einer Performance von knapp 4 GFlops (SANDRA Benchmark). Den Werten liegt die Analyse der quasi-radialen Tensorkomponente zugrunde. Sie wurden empirisch ermittelt unter der Annahme, dass sich für $L = \text{const}$ die Rechenzeit proportional zur Anzahl der Beobachtungen verhält.

Tabelle 9.1: Aufwand zur Berechnung der Designmatrix \mathbf{A} auf einem Standard-PC (Pentium 4, Taktfrequenz 3,4 GHz, Performance 4 GFlops)

Auflösung L	# Beobachtungszeitpunkte (10^6)	Aufwand Berechnung \mathbf{A} (d)
200	1	0,9
200	10	9
200	30	27
300	1	2
300	10	20
300	30	60

Offensichtlich ist der wirtschaftliche Einsatz einer seriellen Programmstruktur schon für moderat dimensionierte Gleichungssysteme nicht mehr denkbar. Vielmehr muss der Weg zur Verwendung von Multiprozessor-Systemen eingeschlagen werden. Das Prinzip besteht in der Aufteilung der rechentechnischen Arbeit auf eine Vielzahl von CPUs. Derartige Rechnerarchitekturen werden allgemein hin als Parallelrechner bezeichnet, für den Umgang mit diesen spricht man von Hochleistungsrechnen. Sehr leistungsstarke Parallelrechner sind auch unter dem Begriff Hochleistungsrechner oder Supercomputer geläufig. Durch Parallelisierung des Programmcodes werden die verschiedenen CPUs der Rechenplattform gesteuert. Wichtig ist dabei, dass durch die Verwendung allgemein anerkannter Parallelisierungs-Standards die Portabilität der Implementierung gewährleistet wird.

Der Erhalt optimierter Leistungsfähigkeit eines Algorithmus kann über verschiedene Parallelisierungskonzepte erreicht werden. Dabei bildet die Anzahl der Fließkommaoperationen pro Sekunde (Flops, Floating point operations per second) ein Maß für die absolute Geschwindigkeit einer Plattform. Heutige Supercomputer liegen mit ihrer theoretischen Spitzenleistung (TPP, Theoretical Peak Performance) im Teraflop-Bereich (für eine aktuelle Liste der weltweit schnellsten Rechner sei auf die Top 500 Liste verwiesen unter <http://www.top500.org>). Die tatsächlich erbrachte Leistung eines Rechners (bzw. einer Implementierung) ist hingegen meist deutlich geringer als die TPP.

Performanceparameter. Um die Güte einer Parallelisierung einordnen zu können, werden im Folgenden wenige markante Kenngrößen eingeführt (Alefeld et al. 2002). Der Speed-up S_p ermöglicht die Beurteilung der Leistungsfähigkeit einer parallelen Implementierung. Gewöhnlich ist darunter das Verhältnis

$$S_p = \frac{T_1}{T_p} \quad (9.1)$$

zu verstehen mit T_1 der Rechenzeit unter Verwendung einer CPU des parallelen Systems und T_p der Rechenzeit bei Verwendung von p Prozessoren der selben Plattform. Basierend auf dieser Größe lässt sich die Effizienz E_p eines parallelen Algorithmus ableiten mit

$$E_p = \frac{S_p}{p}, \quad (9.2)$$

welche meist in Prozent ausgedrückt wird. Da für bestimmte Problemgrößen eine sequentielle Berechnung, und damit die Evaluierung von T_1 , nicht möglich ist, kann eine entsprechende Beurteilung mittels des inkrementellen Speed-ups

$$S_p^i = \frac{\text{Laufzeit auf } \frac{p}{2} \text{ CPUs}}{\text{Laufzeit auf } p \text{ CPUs}} \quad (9.3)$$

erfolgen, welcher im idealen Fall den Wert 2 annimmt. Schließlich trifft das Gesetz von Amdahl eine Aussage darüber wie sich der nicht parallelisierbare (oder nicht parallelisierte) Anteil eines Programms auf den Speed-up auswirkt. Sei eben dieser prozentuale Anteil mit α bezeichnet und entsprechend der restliche Anteil, das heißt $(1 - \alpha)$, mit p Prozessoren parallelisiert, so beträgt der Speed-up

$$S_p = \frac{1}{\alpha + (1 - \alpha)/p}. \quad (9.4)$$

9.1 Rechnerarchitekturen

In diesem Kapitel werden die Grundzüge paralleler Rechenplattformen umrissen insoweit dies zum Verständnis der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Studien beiträgt. Eine detaillierte Klassifizierung verschiedener Rechnerarchitekturen ist unter anderem Flynn (1972) und Dowd & Severance (1998) zu entnehmen. Parallel arbeitende Systemarchitekturen basieren in der Regel sämtlich auf dem Multiple Instruction Multiple Data (MIMD) Prinzip. Der Begriff ist selbst erklärend: Mehrere Instruktionen werden auf mehrere Datensätze zugleich angewandt. Das grundsätzliche Unterscheidungsmerkmal hingegen liegt in der Art des Speicherzugriffs seitens der einzelnen CPUs.

Shared memory Systeme. MIMD Systeme mit gemeinsamem Speicher (SM, Shared Memory) werden als SM-MIMD Systeme bezeichnet. Die einzelnen CPUs haben über einen enorm schnellen Memory Interconnect Zugriff auf alle Speichereinheiten des Systems. Im Falle eines gleichberechtigten Zugriffs der Prozessoren auf die Speichereinheiten spricht man von Uniform Memory Access (UMA) bzw. Symmetric Multi-Processing

(SMP). Die Verbindung der Prozessierungselemente (z.B. mittels einem Bus oder Crossbar) bildet den limitierenden Faktor eines SMP Systems, was entsprechend eine limitierte Anzahl von CPUs mit sich bringt. Abbildung 9.1 zeigt den schematischen Aufbau eines Parallelrechners mit gemeinsamem Speicher.

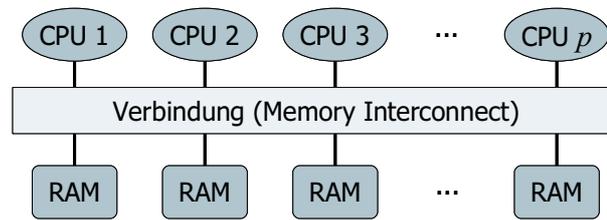


Abbildung 9.1: Schematischer Aufbau eines SMP Systems

SMP Systeme machen den Datenaustausch zwischen den Prozessierungseinheiten zum einen enorm einfach, da dieser vom Benutzer nicht gesteuert werden muss, und zum anderen schnell, da die CPUs stets Zugriff auf alle Informationen im gemeinsamen Speicher haben. Die Steuerung paralleler Einheiten wird meist über OpenMP (Chandra et al. 2001) gesteuert.

Distributed memory Systeme. Im Gegensatz dazu sind MIMD Systeme mit verteiltem Speicher (DM, Distributed Memory) im Prinzip beliebig erweiterbar. DMP (Distributed Memory Parallel) Architekturen zeichnen sich dadurch aus, dass jede CPU allein auf ihren lokalen Speicher automatischen Zugriff hat. Der Datenaustausch bzw. die Kommunikation zwischen den Prozessoren (bei DMP Systemen werden die einzelnen autonomen Prozessierungseinheiten als Knoten bezeichnet) erfolgt durch die benutzergesteuerte Versendung von Nachrichten über ein Node Interconnect. Abbildung 9.2 zeigt den schematischen Aufbau eines Parallelrechners mit verteiltem Speicher.

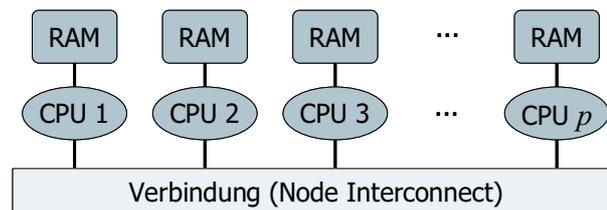


Abbildung 9.2: Schematischer Aufbau eines DMP Systems

Während jede CPU auf ihren individuellen Speicher sehr schnell zugreifen kann, ist die Zugriffsgeschwindigkeit auf die anderen Speichereinheiten reduziert, weshalb hier vom NUMA (Non-Uniform Memory Access) Konzept gesprochen wird. Die Effizienz einer Implementierung ist dabei stark von der notwendigen Kommunikation zwischen den Prozessoren abhängig. Erstrebenswert ist das Auftreten möglichst vieler Operationen, welche autonom und damit CPU intern ausgeführt werden können. Tatsächlich bildet die Kommunikation zwischen den Speicherelementen für mancherlei Anwendungen eine erhebliche Hürde. Auf DMP Systemen wird die Steuerung paralleler Einheiten meist über MPI (Message Passing Interface) gesteuert (Snir et al. 1995).

Das benutzerfreundliche SMP Konzept kann auf DMP Systeme ausgebaut werden durch die Simulation eines gemeinsamen Speichers. Kernstück einer solchen Architektur ist der dem System gemeinsame Cache, in den nicht-lokale Daten bei Bedarf über das Netzwerk geladen werden, weshalb derartige Systeme als ccNUMA (cache-coherent NUMA) Architekturen bezeichnet werden. Der Anwender glaubt ein SMP System vor sich zu haben. Eine solche Vorgehensweise erlaubt die Ausweitung des SMP Konzepts auf Systeme bis zu 256 CPUs und darüber hinaus. Jedoch geht im Allgemeinen die Effizienz mit wachsender Prozessoranzahl stark zurück. Eine gute Skalierung wird nur für eine moderate Anzahl von CPUs erreicht. Vor allem die Belegung und Freigabe von Speicher ist vom Benutzer gezielt zu steuern, um nicht überflüssig oft den langsamen Zugriff auf nicht-lokale Speichereinheiten in Kauf nehmen zu müssen.

Hybride Systeme. Als hybrides System, siehe Abb. 9.3, wird die Kombination des SMP und DMP Konzepts verstanden. Dabei sind mehrere so genannte SMP Knoten (SMP Systeme kleiner Dimension) über einen Node Interconnect miteinander verbunden.

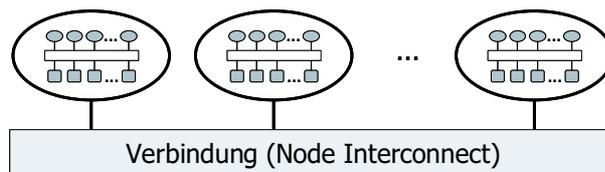


Abbildung 9.3: Schematischer Aufbau eines hybriden Systems

Das hybride System in Abb. 9.3 ist die spezielle Form eines Clusters, unter dem man allgemein eine (heterogene) Menge von Rechnern versteht, welche über ein Netzwerk (z.B. Myrinet oder Ethernet) miteinander verbunden sind. Der denkbar einfachste Cluster setzt sich aus normalen Arbeitsplatzrechnern zusammen (NOW, Network Of Workstations). In der Regel jedoch bilden die Knoten eines Clusters Dualprozessoren oder allgemein klein dimensionierte SMP Systeme.

Vektorrechner. Besonderer Erwähnung bedarf den so genannten Vektorrechnern, welchen die Eigenschaft innewohnt, eine Instruktion parallel mit mehreren Daten ausführen zu können (Prozessierung von Vektoroperationen). Tatsächlich können sowohl serielle Rechner als auch Parallelrechner als Vektorrechner ausgelegt sein, jedoch muss dies für letztere nicht zwingend der Fall sein. Um die Leistungsfähigkeit eines Vektorrechners ausnutzen zu können, muss die Programmstruktur bestmöglich vektorisiert sein, das heißt die Durchführung identischer Operationen auf eine Vielzahl von Daten muss vom Nutzer instruiert werden.

Verwendete Systeme. Für die Implementierung der direkten Lösungsmethode muss die Normalgleichungsmatrix aufgebaut und im Speicher gehalten werden, was abhängig vom Grad L der Gravitationsfeldauflösung die Speicheranforderung gemäß Tabelle 1.2 unmittelbar mit sich bringt. SMP und ccNUMA Systeme bieten sich für eine derartige Aufgabe weit mehr an als Plattformen mit verteiltem Speicher, da für letztere ein hoher Kommunikationsaufwand zwischen den einzelnen CPUs entsteht. Weder die Berechnung der Normalgleichungsmatrix noch die Inversion des Normalgleichungssystems kann weitgehend unabhängig auf dem lokalen Speicher erfolgen. Vielmehr gehen zur Berechnung der CPU spezifischen Anteile regelmäßig die Informationen mit ein, welche auf den parallel arbeitenden Einheiten anfallen. Der sich vielfach wiederholende Informationsaustausch erfolgt zu Lasten reduzierter Effektivität. Deshalb wird hier von der Implementierung der direkten Methode auf DMP Systemen abgesehen.

Die Berechnungen werden auf einem SGI Altix 3700 System (Aster) des Center for Computing and Networking Services (SARA) in Amsterdam durchgeführt. Die Plattform besteht aus 416 Intel Itanium 2 CPUs mit einer Taktfrequenz von 1,3 GHz und einem Speicher von je 2 GB. Die theoretische Spitzenleistung einer CPU beträgt 5,2 GFlops bzw. diese des Gesamtsystems 2,2 TFlops. Die 416 Prozessoren sind auf 5 Knoten aufgeteilt (1×32 CPUs, 2×64 CPUs, 2×128 CPUs). Jeder Knoten der Gesamtplattform bildet ein unabhängiges ccNUMA System. Konkret wird für die numerischen Studien ein Knoten bestehend aus 64 CPUs verwendet.

Entsprechend der Philosophie iterativer Gleichungssystemlöser werden Matrix-Matrix bzw. Matrix-Vektor Multiplikationen durch die wiederholte Ausführung von Vektor-Vektor Operationen umgangen. Dieses Vorgehen impliziert nur sehr geringe Anforderungen an notwendiger Speicherverfügbarkeit. Zudem können die Beobachtungen unabhängig voneinander prozessiert werden. Damit bieten sich neben SMP bzw. ccNUMA auch DMP Systeme für die Parallelisierung hervorragend an. Letztere vor allem mit dem Hintergrund, dass Cluster im Prinzip beliebig ausbaubar und damit der Beschleunigung iterativer Gleichungssystemlöser (im Sinne wachsender Anzahl von CPUs) keine Grenzen gesetzt sind.

Hier wird die Implementierung der iterativen Methode auf DMP Systemen genauer behandelt. Der Übergang zur Implementierung auf SMP oder hybriden Plattformen ist darauf basierend recht einfach zu bewerkstelligen und wird an entsprechender Stelle erläutert. Zudem sind DMP konzipierte Programme oftmals direkt auf SMP Architekturen portierbar. Umgekehrt gilt dies nicht. Die Berechnungen werden auf einem CRAY Opteron Cluster (Strider) des HöchstleistungsRechenzentrums Stuttgart (HLRS) durchgeführt. Das hybride System besteht aus 128 Knoten von AMD Dualprozessoren. Die einzelnen CPUs haben eine Taktfrequenz von 2 GHz und einen Speicher von je 2 GB. Die theoretische Spitzenleistung einer CPU beträgt 4 GFlops bzw. diese des Gesamtsystems 1,024 TFlops. In Tabelle 9.2 sind die Installations- und Performanceparameter der beiden genannten Systeme aufgelistet.

Tabelle 9.2: Installations- und Performanceparameter der Plattformen SGI Altix 3700 (Aster) und CRAY Opteron Cluster (Strider)

	Aster	Strider
CPU		
Typ	Intel Itanium 2	AMD
Taktfrequenz (GHz)	1,3	2
Speicher (GB)	2	2
Performance (GFlops)	5,2	4
System		
Anzahl Knoten	5	128
Anzahl CPUs	416	256
Speicher (GB)	832	512
Performance (TFlops)	2,2	1,024
Verbindung	IXS 16 GB s ⁻¹	Myrinet 2000

Zusammenfassend wird im Rahmen dieser Arbeit den Anforderungen der Lösungsmethoden entsprechend folgende Parallelisierung der Analysealgorithmen vorgenommen:

- Umsetzung der direkten Lösungsmethode auf einem ccNUMA System
Dazu wird ein Knoten des SGI Altix 3700 Systems (Aster) als Rechenplattform mit gemeinsamem Cache genutzt.
- Umsetzung der iterativen Lösungsmethode auf einem DMP System
Dazu wird der CRAY Opteron Cluster (Strider) für die Parallelisierung verwendet.

9.2 Parallelisierung der direkten Lösungsmethode

Die grundlegende Frage für den Übergang von einer seriellen zu einer parallelen Programmstruktur muss lauten: was kann parallelisiert werden bzw. was macht Sinn zu parallelisieren? Der rechentechnische Aufwand ergibt sich für die direkte Lösungsmethode wie folgt:

- Aufstellung der Designmatrix \mathbf{A} (Legendre Funktionen und deren Ableitung erster und zweiter Ordnung; erste und zweite Ableitung des Gravitationspotenzials)
Aufwand: siehe Tabelle 9.1
- Berechnung der (symmetrischen) Normalgleichungsmatrix $\mathbf{N} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ und des Normalgleichungsbeobachtungsvektors $\mathbf{b} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$
Aufwand: $\frac{1}{2}u^2n + \frac{1}{2}un + un = \frac{1}{2}u(u+1)n + un$
- Cholesky Zerlegung der (symmetrischen) Normalgleichungsmatrix $\mathbf{N} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$
Aufwand: $\frac{1}{6}u^3$
- Anwendung der Cholesky Faktorisierung (Vorwärts- und Rückwärtssubstitution) zur Inversion des Normalgleichungssystems, das heißt zur Bestimmung von $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{N}^{-1}\mathbf{b}$
Aufwand: u^2

Da im Allgemeinen $n \gg u$ gilt, liegt der hauptsächliche rechentechnische Aufwand in den ersten beiden Rechenschritten begründet. Die Inversion des Normalgleichungssystems, $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{N}^{-1}\mathbf{b}$, stellt im Vergleich dazu nur einen unwesentlichen Teil der Gesamtrechnenzeit dar (freilich hängt der Aufwand zur Berechnung von \mathbf{A} primär von der Anzahl der Beobachtungen ab. Bei kleiner Redundanz kann die Rechenzeit zur Inversion

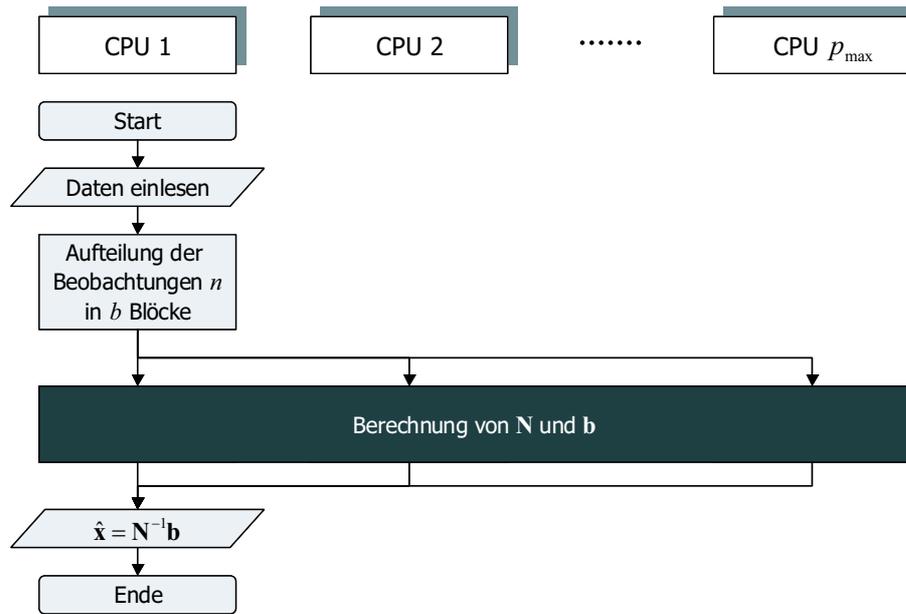


Abbildung 9.4: *Parallelisierung der direkten Lösungsmethode auf einem SMP oder ccNUMA System*

diejenige zum Aufbau der Designmatrix übersteigen). Mit diesem Hintergrund ist die durchgeführte Parallelisierung der direkten Lösungsmethode in Abb. 9.4 graphisch dargestellt.

Der Analysealgorithmus wird bis zum Aufbau der Designmatrix sequentiell durchgeführt. Danach teilen sich p_{\max} CPUs den Aufwand zur Berechnung des Normalgleichungssystems. Die Inversion des Systems sowie die Ausgabe der Schätzung $\hat{\mathbf{x}}$ erfolgt wiederum sequentiell. Der parallele Schritt ist in Abb. 9.5 genauer herausgearbeitet. Die einzelnen Datenblöcke der Dimension $\frac{n}{b}$ werden nach und nach abgearbeitet. Innerhalb eines Blockes i erfolgt die Aufteilung der Beobachtungen auf die beteiligten CPUs, das heißt die Parallelisierung greift bei der Verarbeitung der Beobachtungen innerhalb eines jeden Blockes. Dabei berechnet jede CPU ihre individuellen j_p Zeilen der Designmatrix, es gilt $\sum_{p=1}^{p_{\max}} j_p = \frac{n}{b}$. Die einzelnen CPUs greifen solange auf die Beobachtungen innerhalb des Blockes i zu, bis sämtliche Zeilen von \mathbf{A}_i berechnet sind. Danach erfolgt die Aktualisierung der globalen Felder $\mathbf{N} = \mathbf{N} + \mathbf{A}_i^T \mathbf{A}_i$ und $\mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{A}_i^T \mathbf{y}_i$. Diese werden durch die Verwendung numerischer Bibliotheken basierend auf dem LAPACK/BLAS Standard (Anderson et al. 1999) automatisch parallel ausgeführt. Die parallele Umgebung endet mit der kompletten Aufstellung des Normalgleichungssystems (es ist im übrigen möglich deren Inversion in die parallele Umgebung mit einzuschließen).

Die Implementierung gemäß Abb. 9.5 ist jedoch mit einem großen Nachteil verbunden. Die einzelnen CPUs greifen ohne fest definierte Reihenfolge auf die Beobachtungen zu, da deren Schnelligkeit und Auslastung durchaus variiert. Entsprechend werden diese in zufälliger Reihenfolge prozessiert und demnach spiegelt der Aufbau der Designmatrix nicht zwingend den zeitlichen Verlauf der Beobachtungen wieder. Diese Tatsache wird dann zur Schwierigkeit, wenn eine fest vorgegebene Reihenfolge der Datenprozessierung vorausgesetzt wird. Dies ist z.B. der Fall beim Auftreten von zeitlichen Korrelationen zwischen den Beobachtungen. Diese werden im Allgemeinen in Form der Dekorrelation, vgl. Kapitel 6.1, berücksichtigt. Die zeitliche Dekorrelation verlangt eine Prozessierung der Daten in zeitlich fortlaufender Reihenfolge. Außerdem muss gewährleistet sein, dass die bereits dekorrelierten Werte mit einer bestimmten Korrelationslänge vorliegen, um die Dekorrelation der aktuellen Beobachtung voran zu treiben. Beschäftigen sich jedoch mehrere CPUs zeitgleich in besagter Korrelationslänge, so ist eine derartige Prozessierung nicht möglich.

Letztlich ist es also erforderlich, die a priori gewünschte Reihenfolge der Prozessierung zu erzwingen. Dies kann prinzipiell auf zwei Arten erfolgen. Zum einen durch entsprechende Restriktionen, zum anderen durch eine anders zu wählende Parallelisierung. Die erste Möglichkeit kann durch Bedingungsabfragen realisiert werden und wirkt sich verheerend auf die Performance der parallelen Region aus — verständlich, da die Prozessoren immer wieder gebremst werden und viel Leerlauf haben. Folglich führt nur Variante zwei zum Erfolg. Dabei erfolgt die Verteilung der n Beobachtungen auf die p_{\max} Prozessoren derart, dass eine a priori festgelegte Anzahl (bzw. Reihenfolge) von Beobachtungen jeder einzelnen CPU zugeteilt wird. Die $\frac{n}{p_{\max}}$ Beob-

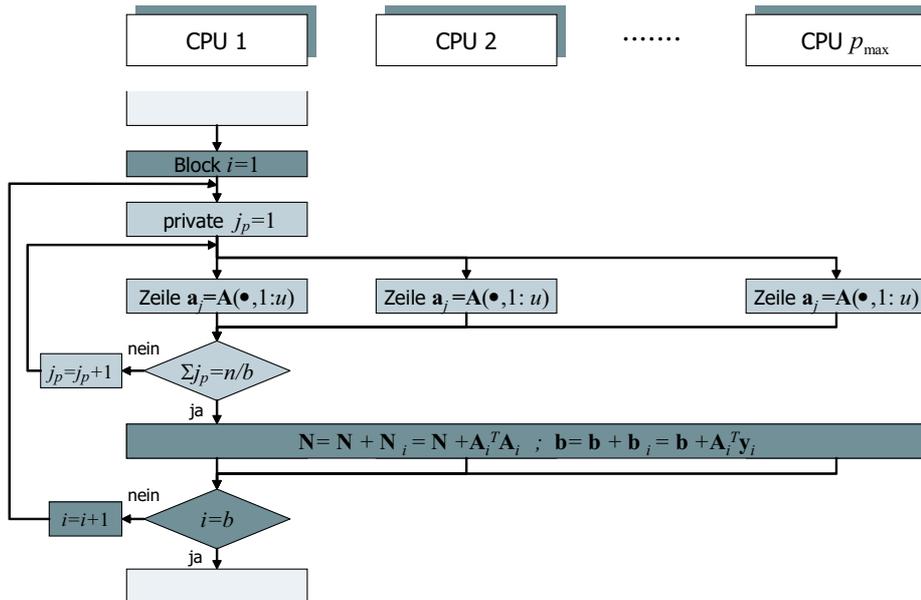


Abbildung 9.5: Parallelisierungsschritt gemäß Abb. 9.4 — Methode 1

achtungen pro Prozessor werden autonom abgearbeitet. Die Parallelisierung setzt so ein, dass nicht innerhalb der Blöcke parallelisiert wird, sondern diese selbst auf die CPUs aufgeteilt werden. Abbildung 9.6 zeigt dieses Vorgehen. Jede CPU teilt ihre $\frac{n}{p_{\max}}$ Beobachtungen in Prozessierungsblöcke ein. Damit entstehen einzig durch die Aufteilung der Daten auf die CPUs Bereiche, welche für die Dekorrelation nicht berücksichtigt sind. Dies kann durch die Überlappung der Beobachtungen um mindestens die Korrelationslänge (in der praktischen Anwendung hängt die Dimension der Überlappung von der Warmlaufphase des Dekorrelationsfilters ab) behoben werden.

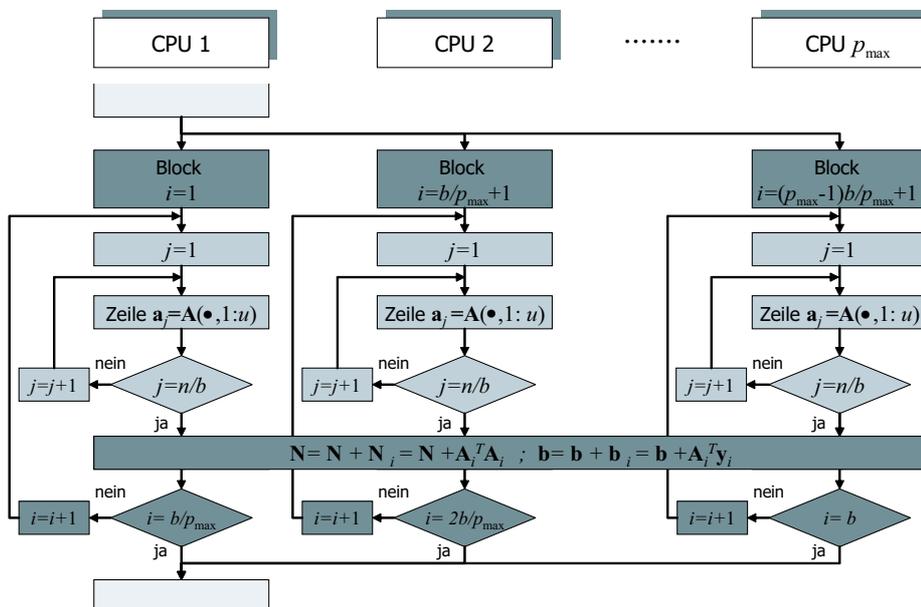


Abbildung 9.6: Parallelisierungsschritt gemäß Abb. 9.4 — Methode 2

Das alternative Parallelisierungsvorgehen bringt jedoch eine Reihe von Änderungen in der Implementierung mit sich. Jede CPU erhält ihre lokale Designmatrix $\mathbf{A}_i(\frac{n}{b} \times u)$, was speichertechnisch unproblematisch ist. Jedoch gilt dies nicht für die Normalgleichungsmatrix. Diese soll weiterhin global definiert sein (und davon keine Kopien existieren).

Somit stellt sich die Aufgabe, die lokale Designmatrix pro Prozessor in den globalen Variablen \mathbf{N} und \mathbf{b} gemäß $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ und $\mathbf{A}^T \mathbf{y}$ zu aktualisieren. Zwei Möglichkeiten wurden für dieses Vorgehen untersucht. (i) Jede CPU schreibt nacheinander in die globalen Variablen. Dieses Vorgehen kommt einer Entparallelisierung der algebraischen Operationen gleich und ist damit enorm langsam. (ii) Die algebraischen Operationen werden derart parallel ausgeführt, dass jeder Prozessor auf einen limitierten Speicherbereich der globalen Variablen schreibt (balancierte Aufteilung). Durch Permutation des Zugriffsbereichs schreibt jede CPU letztlich in die gesamten globalen Variablen. Damit es zu keiner Überlappung in der Berechnung kommt, müssen vor jeder Permutation die Prozessoren synchronisiert werden. Durch dieses Vorgehen ist ein Parallelisierungsgrad ähnlich dem Prinzip nach Abb. 9.5 erreicht. Allein die Synchronisation reduziert eine optimale Auslastung der CPUs.

Numerische Ergebnisse. Tabelle 9.3 fasst die erzielten Ergebnisse der direkten Lösungsmethode zusammen. Die Berechnungen erfolgen auf einem SGI Altix 3700 System, wobei bis zu 16 Prozessoren parallel zum Einsatz kommen. Deutlich erkennbar nimmt die Berechnung von $\mathbf{N} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ und $\mathbf{b} = \mathbf{A} \mathbf{y}$, das heißt die Aufstellung des Normalgleichungssystems, den Großteil des rechentechnischen Aufwands ein. Der prozentuale Anteil an der Gesamtlaufzeit beträgt meist über 90%.

Im Vergleich dazu nimmt der Aufbau der Designmatrix \mathbf{A} nur einen unwesentlichen Posten ein. Dies gilt teilweise auch für die Inversion des Normalgleichungssystems. Auffallend ist jedoch, dass die Inversionsprozedur mit steigender Anzahl an CPUs nicht wesentlich beschleunigt. Mit 16 Prozessoren ist gar eine deutliche Verlangsamung zu beobachten, was am zunehmenden Kommunikationsaufwand zwischen den einzelnen Prozessorelementen begründet liegt.

Der Speed-up bzw. die Effizienz der parallelen Implementierung nimmt für $L = 200$ ordentliche Werte an. Für $L = 100$ gilt dies ebenfalls bis einschließlich acht CPUs. Mit der Verwendung von 16 CPUs sinkt E_p auf 50%. Tatsächlich wurde dieses Verhalten schon in Austen et al. (2006) beobachtet.

Tabelle 9.3: Laufzeitergebnisse der direkten Lösungsmethode auf der SGI Altix 3700 (Aster), $n = 518\,400$ Beobachtungen

	$L = 100$				$L = 200$			
	Anzahl Prozessoren				Anzahl Prozessoren			
	1	4	8	16	1	4	8	16
Wall time (h)	3,84	1,10	0,66	0,48	64,46	17,06	9,06	5,57
Dateninput (min)	0,52	0,48	0,50	1,03	0,68	0,50	0,53	0,95
Referenzfeldabzug (min)	4,03	1,00	0,53	0,33	150,05	37,77	19,02	9,60
Aufbau \mathbf{A} (min)	5,84	2,08	1,32	0,77	31,68	8,10	4,32	2,77
Anteil an wall time (%)	2,5	3,2	3,3	2,7	0,8	0,8	0,8	0,8
Berechnung \mathbf{N} , \mathbf{b} (h)	3,64	1,07	0,61	0,42	61,43	15,71	8,05	4,46
Anteil an wall time (%)	94,8	97,3	92,4	87,5	93,8	92,1	88,8	80,0
Inversion (min)	1,52	0,63	0,67	1,35	59,38	34,67	37,08	53,35
Anteil an wall time (%)	0,7	1,0	1,7	4,7	1,5	3,4	6,8	15,6
Speed-up S_p	1	3,49	5,82	8,00	1	3,84	7,22	11,76
Effizienz E_p (%)	100	87	73	50	100	96	90	73

9.3 Parallelisierung der iterativen Lösungsmethode

Wiederum steht zu Beginn der parallelen Programmstruktur die Entscheidung darüber, welche Schritte des Algorithmus sinnvollerweise in einer parallelen Umgebung behandelt werden. Der rechentechnische Aufwand ergibt sich für die iterative Lösungsmethode wie folgt:

Optional einmalig in der Initialisierungsphase:

- Aufstellung des Prädiktionierers \mathbf{L}_N^{-1} (Berechnung der blockdiagonalen Normalgleichungsmatrix, blockweise Cholesky Zerlegung und Inversion des Cholesky Faktors)

Pro Iteration k :

- Aufstellung der Designmatrix \mathbf{A} (Legendre Funktionen und deren Ableitung erster und zweiter Ordnung; erste und zweite Ableitung des Gravitationspotenzials)
Aufwand: siehe Tabelle 9.1
- Berechnung der Vektoren \mathbf{v}_k und \mathbf{u}_{k+1}
Aufwand: $2un$

Der hauptsächliche Aufwand liegt in der Berechnung des Prädiktionierers sowie der wiederholten Aufstellung der Designmatrix. Letztere fällt pro Iteration für die sukzessive Zerlegung an. Es ist damit zweckmäßig den Aufbau von \mathbf{A} , und damit den Bidiagonalisierungsprozess, zu parallelisieren. Besagter Rechenabschnitt, das heißt die Berechnung von \mathbf{v}_k und \mathbf{u}_{k+1} , kann für jede Zeile der Designmatrix unabhängig ausgeführt werden, womit die Parallelisierung der LSQR Methode entsprechend Abb. 9.7 erfolgt. Der wesentliche parallele Schritt ist in Abb. 9.8 genauer dargestellt.

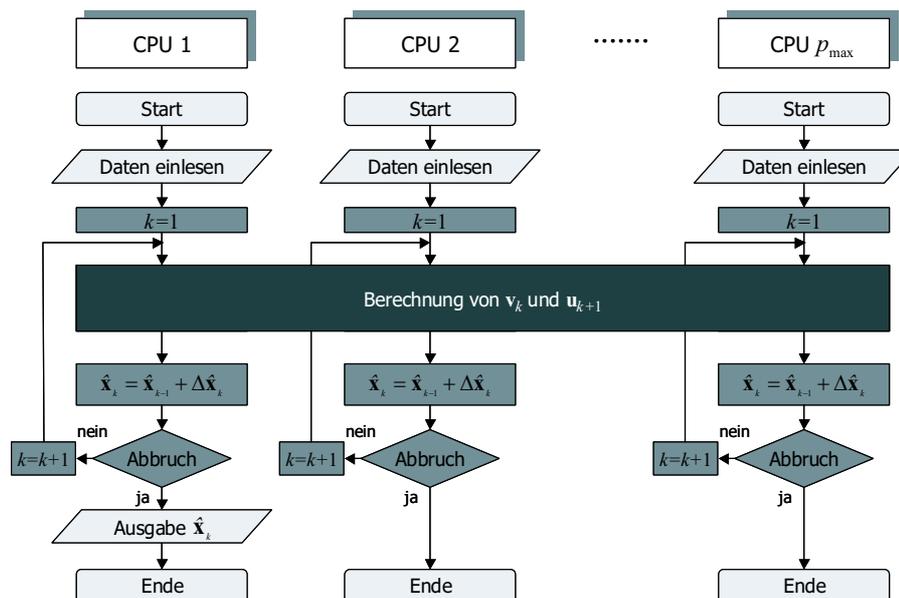


Abbildung 9.7: Parallelisierung der iterativen Lösungsmethode auf einem DMP System

Die p_{\max} CPUs teilen sich sowohl den Aufwand zur Berechnung des Prädiktionierers in der Initialisierungsphase des Algorithmus (hier nicht dargestellt), als auch der Vektoren \mathbf{v}_k und \mathbf{u}_{k+1} innerhalb jeder Iteration k . Die sequentiellen Schritte werden von jeder CPU autonom durchlaufen. Im Parallelisierungsschritt, vgl. Abb. 9.8, berechnet jede CPU individuellen j Zeilen der Designmatrix, wobei jedem Prozessor ein bestimmter Berechnungsbereich zugewiesen wird. Nachdem jede CPU $p = 1, \dots, p_{\max}$ ihren Anteil \mathbf{v}_k^p und \mathbf{u}_{k+1}^p an den Vektoren berechnet hat, werden diese schließlich aufaddiert und das Ergebnis an alle beteiligten CPUs verteilt.

Bemerkt sei an dieser Stelle, dass im Falle der OpenMP Programmierung auf SMP oder ccNUMA Systemen die Prozessierungsschritte außerhalb der parallelen Umgebung nur von einer CPU (Master) ausgeführt werden. Die Parallelisierung greift bei der Verarbeitung der Beobachtungen. Dabei berechnet jede CPU ihre individuellen j_p Zeilen der Designmatrix (j ist dann eine lokale Variable, weshalb diese mit der Nummer p der

CPU indiziert werden muss und es gilt $\sum_{p=1}^{p_{\max}} j_p = n$). Die einzelnen CPUs greifen solange auf die Beobachtungsdaten zu bis sämtliche Zeilen von \mathbf{A} verarbeitet sind. Die parallel Umgebung endet mit der kompletten Aufstellung der Zerlegungsvektoren pro Iteration. Für die Implementierung des Algorithmus auf einem hybriden System sind beide Konzepte zu kombinieren. In diesem Falle besteht das System in Anlehnung an 9.7 nicht aus p_{\max} CPUs, sondern aus p_{\max} SMP Knoten, welche wiederum jeweils c_{\max} CPUs vereinen. Die Evaluierung von \mathbf{v}_k^p und \mathbf{u}_{k+1}^p wird nunmehr pro Knoten auf die c_{\max} Prozessoren aufgeteilt.

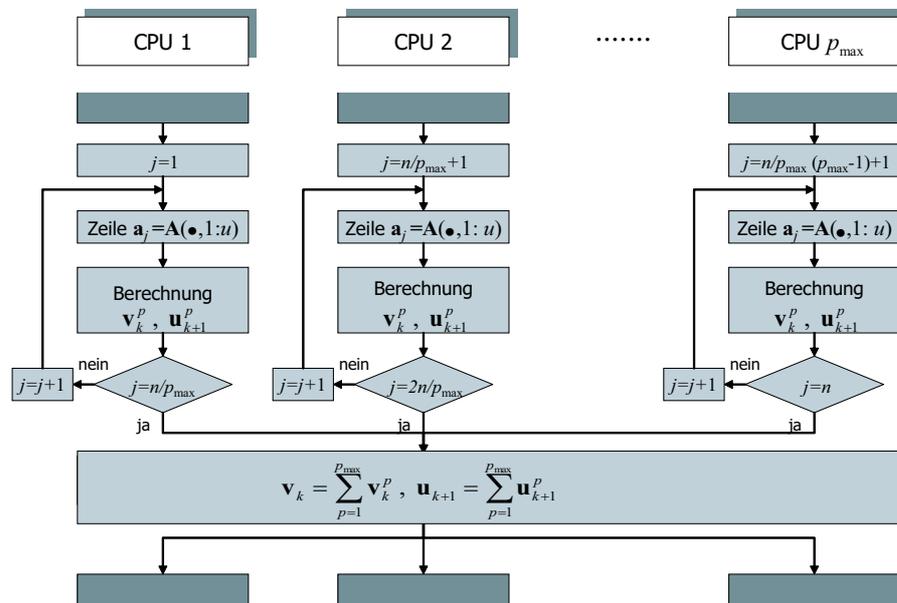


Abbildung 9.8: Parallelisierungsschritt der iterativen Lösungsmethode gemäß Abb. 9.7

Numerische Ergebnisse. Für sämtliche hier aufgeführte Lösungen wurde der Schwellenwert zum Abbruch des iterativen Prozesses zu $\delta = 0.25$ mm gesetzt, vgl. dazu Kapitel 7.1. Die Berechnungen erfolgen auf einem CRAY Opteron Cluster mit bis zu 64 Knoten. Das System wird als massiv parallele Plattform verwendet, das heißt pro Knoten wird nur eine CPU angesprochen. Tabelle 9.4 präsentiert die Laufzeitergebnisse der ursprünglichen LSQR Methode unter Verwendung von acht Prozessoren. Die aufgeführten Ergebnisse beziehen sich auf die Anzahl an Iterationen, die notwendig sind, den Schwellenwert δ zu unterschreiten. Damit werden die zusätzlichen Iterationen aufgrund des nicht-monotonen Konvergenzverhaltens in Tabelle 9.4 nicht berücksichtigt. Für eine maximale spektrale Auflösung von $L = 100$ ist Konvergenz nach 56 Iterationen erreicht, für $L = 200$ kann erst nach 180 Iterationen abgebrochen werden.

Tabelle 9.4: Laufzeitergebnisse LSQR auf dem CRAY Opteron Cluster, $n = 518\,400$ Beobachtungen, 8 CPUs

Auflösung L	Anzahl Iterationen	Wall time (h)
100	56	2,46
200	180	31,08

Im Gegensatz dazu beschleunigt die blockdiagonale Präkonditionierung der Methode das Konvergenzverhalten erheblich, vgl. Tabelle 9.5. Mit PCA-LSQR fällt für $L = 100$ die Anzahl der notwendigen Iterationen auf acht, was in etwa nur einem Viertel der Laufzeit von LSQR resultiert. Für $L = 200$ reduziert sich die Anzahl der Iterationen auf 14 und die Laufzeit auf 12% verglichen zum nicht präkonditionierten Algorithmus. Die rechentechnischen Kosten innerhalb einer Iteration unterscheiden sich für PCA-LSQR nur geringfügig von denjenigen des LSQR Verfahrens. Der zusätzliche Aufwand liegt allein in der Anwendung der Matrizen $\mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1}$ und $(\mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1})^T$ und auf einen Vektor. Dies nimmt keinen signifikanten Einfluss auf die Laufzeit. Die Berechnung des (inversen) Präkonditionierers $\mathbf{L}_{\mathbf{N}}^{-1}$ selbst jedoch entpuppt sich als aufwändig, wie in der vierten Spalte von Tabelle 9.5 zu erkennen ist. Gegenüber der totalen Laufzeit nimmt dessen Berechnung in etwa 23% ein. An

Tabelle 9.5: Laufzeitergebnisse PCA-LSQR auf dem CRAY Opteron Cluster, $n = 518\,400$ Beobachtungen, 8 CPUs

Auflösung L	Anzahl Iterationen	Wall time total (h)	Wall time \mathbf{L}_N^{-1} (h)
100	8	0,61	0,14
200	14	3,70	0,86

dieser Stelle besteht durchaus Verbesserungsbedarf der präkonditionierten Methode. Ein möglicher Ansatz ist hierbei die approximierete Evaluierung von \mathbf{N}_{bd} mittels Interpolationstechniken.

Der Parallelisierung des iterativen Lösers widmet sich Tabelle 9.6. Darin sind die Laufzeiten abhängig von den verwendeten MPI Prozessierungsknoten aufgeführt. Der Speed-up stimmt weitest gehend mit der Anzahl an CPUs überein, entsprechend wird eine gute Effizienz erreicht. Dies bestätigt die effektive parallele Implementierung des Algorithmus.

Tabelle 9.6: Laufzeitergebnisse PCA-LSQR auf dem CRAY Opteron Cluster, $n = 518\,400$ Beobachtungen, $L = 200$

Anzahl CPUs	Anzahl Iterationen	Wall time (h)	Speed-up S_p	Effizienz E_p (%)
1	14	27,65	1	100
8	14	3,70	7,5	93
16	14	2,11	13,1	82
32	14	1,20	23,0	72
64	14	0,78	35,4	55

9.4 Abschließende Bemerkungen

An dieser Stelle soll ein Vergleich zwischen der direkten und der iterativen Lösungsmethode erfolgen. Da die beiden Methoden von ihrer Philosophie her grundverschieden sind, macht es keinen Sinn letztlich sagen zu wollen, welches der beiden Verfahren besser ist. Eine solche Entscheidung hängt von der verwendeten Systemarchitektur sowie von methodischen Gesichtspunkten der Gravitationsfeldanalyse ab. Allgemein können die wichtigsten Vor- und Nachteile der beiden Verfahren wie in Tabelle 9.7 geschehen zusammen gefasst werden.

Tabelle 9.7: Vor- und Nachteile der vorgestellten LS Löser

Iterative Methode	Direkte Methode
Vorteile	Nachteile
<ul style="list-style-type: none"> • Systemunabhängig; vergleichbare Effizienz auf DMP, SMP und hybriden Systemen • Gute Skalierung selbst mit einer großen Anzahl an Prozessoren 	<ul style="list-style-type: none"> • Auf SMP bzw. ccNUMA Systeme beschränkt, ansonsten enormer Kommunikationsaufwand • Gute Skalierung auf wenige Prozessoren beschränkt
Nachteile	Vorteile
<ul style="list-style-type: none"> • Varianz-Kovarianzinformation kann nur approximiert berechnet werden 	<ul style="list-style-type: none"> • Exakte Varianz-Kovarianzinformation wird erhalten

10. Schlussbemerkungen

Die Invariantendarstellung stellt in der Satellitengradiometrie eine alternative Methode zur klassischen Prozessierung dar. Sie wird motiviert durch die Unabhängigkeit der Gravitationstensororientierung bezüglich eines bekannten Referenzsystems. Aufgrund ihrer Komplexität blieben bisher umfangreiche theoretische, vor allem jedoch numerische Studien für den Einsatz in der Satellitengeodäsie aus. Diesem Defizit haben sich die vorangegangenen Kapitel angenommen. Die Invariantendarstellung wurde dabei zunächst von der theoretischen Betrachtungsweise aus untersucht. Die praktische Anwendung der entwickelten Konzepte erfolgte anhand einer (realitätsnahen) Simulation der Satellitenmission GOCE. Im Einzelnen wurden seitens der Modellierung des funktionalen Modells folgende Aspekte behandelt:

- **Linearisierung:**
Hierzu wurden zwei Konzepte erarbeitet: Die strenge Vorgehensweise und die Linearisierung über die Störungsrechnung. Im direkten Vergleich erweist sich letztere als weit mehr effizient. Eine Iteration des Invariantenansatzes konnte letztlich mit ähnlichem Aufwand wie dem der klassischen SGG Analyse-methode realisiert werden.
- **Iterative Parameterschätzung:**
Der Linearisierungsfehler erweist sich als sehr klein. Tatsächlich kann für die Volltensorgradiometrie der iterative Prozess bereits nach der zweiten Iteration abgebrochen werden.
- **Wahl des Linearisierungsfeldes:**
Diese nimmt nur für das erste Iterationsergebnis einen signifikanten Einfluss. Bereits nach der zweiten Iteration werden die Unterschiede basierend auf verschiedenen a priori Feldern vernachlässigbar klein.
- **Synthetische Berechnung von GG:**
Im Falle von GOCE erweist sich die Erweiterung der Beobachtungen hin zur Volltensorgradiometrie als unproblematisch. Dies liegt in dem nur sehr kleinen Einfluss der nicht (bzw. reduziert genau) beobachteten Tensorelemente auf die Invariantenberechnung begründet.

Ergänzend dazu wurden mit Blick auf die rechentechnischen Herausforderungen folgende Aspekte behandelt:

- **Validierung der Invariantenergebnisse durch Vergleich mit der klassischen SGG Analyse-methode.**
- **Implementierung der LSQR Methode als ein den Erfordernissen der Gravitationsfeldbestimmung angepasster Algorithmus. Besonderes Augenmerk wurde hierbei auf die Regularisierung und Präkonditionierung gelegt.**
- **Abgrenzung der Ergebnisse des LSQR Verfahrens gegenüber der direkten Lösungsmethode durch Inversion des Normalgleichungssystems.**
- **Umsetzung der angesprochenen Lösungsstrategien auf Multiprozessor-Systemen unter Verwendung von MPI und OpenMP.**

Beide Betrachtungsweisen zusammen genommen führen letztlich zu der erfolgreichen Anwendung der Invariantendarstellung in der Satellitengradiometrie.

Ausblick. Darüber hinaus haben sich im Laufe der Arbeit weitere Aspekte heraus kristallisiert, welchen es obliegt in fortführenden Untersuchungen behandelt zu werden. Primär ist dabei seitens der Modellierung des Invariantenansatzes das

- **stochastische Modell der Invariantenanalyse**

zu erwähnen. Der grundlegende Gedanke hierzu im Sinne einer Fehlerfortpflanzung der GG wurde bereits angesprochen. Von der rechentechnischen Seite aus betrachtet, stellt die

- **Berechnung der Varianz-Kovarianzinformation**

eine wesentliche Aufgabe dar. Sie kann mit LSQR nur approximativ bestimmt werden. Konzepte hierzu sind zu erarbeiten und anzuwenden.

Liste der Symbole

Gravitationsfeldmodellierung

GM, GM_0	Geozentrische Konstanten
R	Referenzradius
l, l_1, l_2, l_3	Grad der harmonischen Entwicklung
m, m_1, m_2, m_3	Ordnung der harmonischen Entwicklung
$L, L^{\text{ref}}, L^{\text{syn}}$	Maximale Entwicklungsgrade
$v_{lm}, \delta v_{lm}, c_{lm}, s_{lm}$	(normierte) Gravitationsfeldparameter
$P_{lm}(\sin \varphi)$	(normierte) zugeordnete Legendre Funktionen erster Art
$e_{lm}(\lambda, \varphi)$	Skalarwertige sphärische Harmonische
$\underline{R}_{lm}(\lambda, \varphi), \underline{S}_{lm}(\lambda, \varphi)$	Vektorwertige sphärische Harmonische
$\underline{\underline{T}}_{lm}^*(\lambda, \varphi)$	Tensorwertige sphärische Harmonische
U	Normalpotenzial
V	Gravitationspotenzial
W	Schwerepotenzial
Z	Zentrifugalpotenzial
\underline{v}	Gravitationsvektor
$\underline{\omega}$	Rotationsvektor
$\underline{\Gamma}$	Beobachtungstensor
$\underline{\Omega}$	Cartantensor
$\underline{\underline{V}}$	Gravitationstensor

Koordinaten

x, y, z bzw. x_1, x_2, x_3	Kartesische Positionskordinaten
$\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ bzw. $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3$	Kartesische Geschwindigkeitskoordinaten
$\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}$ bzw. $\ddot{x}_1, \ddot{x}_2, \ddot{x}_3$	Kartesische Beschleunigungskoordinaten
λ, φ, r	Sphärische Koordinaten
λ, v, u	Ellipsoidische Koordinaten

Parameter der Differentialgeometrie

κ, τ	Krümmung, Torsion
$\kappa_g, \kappa_n, \tau_g$	Geodätische Krümmung, Normalkrümmung, geodätische Torsion

Invariantensysteme

I_1, I_2, I_3	Invarianten
I_1, I_2, I_3	Invarianten
$\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$	Invarianten (Eigenwerte)

LS Parameter

u	Anzahl der Unbekannten
n	Anzahl der Beobachtungen
κ	Regularisierungsparameter
\mathbf{x}	Unbekanntenvektor
\mathbf{r}	Residualvektor
\mathbf{y}	Beobachtungsvektor
\mathbf{A}	Designmatrix
\mathbf{K}	Regularisierungsmatrix
\mathbf{N}	Normalgleichungsmatrix
\mathbf{P}	Gewichtsmatrix

LSQR Parameter

k	Iterationsparameter
δ	Schwellenwert
\mathbf{a}	Unbekanntenvektor des bidiagonalen Ersatzproblems
\mathbf{u}, \mathbf{v}	Linke bzw. rechte Vektoren der Matrixzerlegung
\mathbf{B}	Bidiagonalmatrix
\mathbf{G}	Givens Rotation
\mathbf{U}, \mathbf{V}	Matrix der linken bzw. rechten Zerlegungsvektoren

HPC Parameter

p_{max}	Anzahl der Prozessoren
E_p	Effizienz
S_p	Speed-up

Liste der Abkürzungen

ARMA	Auto Regressive Moving Average	LAPACK	Linear Algebra PACKage
BFL	Brute-Force Linearisierung	LORF	Local Orbit Reference Frame
BLAS	Basic Linear Algebra Subprograms	LS	Least-Squares
BLUE	Best Linear Unbiased Estimate	LSQR	Least-Squares basierend auf QR Zerlegung
ccNUMA	cache-coherent Non-Uniform Memory Access	MBW	Measurement BandWidth
CFD	Computational Fluid Dynamics	MIMD	Multiple Instruction Multiple Data
CG	Conjugate Gradient(s)	MPI	Message Passing Interface
CGLS	Least-Squares basierend auf der CG Methode	NOW	Network Of Workstations
CHAMP	CHALLENGING Minisatellite Payload	NUMA	Non-Uniform Memory Access
CPU	Central Processing Unit	PC	Personal Computer
COM	Center of Mass	PCA-LSQR	Designmatrix-präkonditioniertes LSQR
CV	Cross Validation	PCN-LSQR	Normalmatrix-präkonditioniertes LSQR
DE-RMS	Degree-Error Root Mean Square	PSD	Power Spectral Density
DM	Differential Mode, Distributed Memory	R-LSQR	Regularisiertes LSQR
DMP	Distributed Memory Parallel	RMS	Root Mean Square
ESA	European Space Agency	RPCA-LSQR	Regularisiertes PCA-LSQR
Flops	Floating point operations per second	SARA	Center for Computing and Networking Services Amsterdam
GFZ	GeoForschungsZentrum (Potsdam)	SGG	Satellite Gravity Gradiometry
GG	GravitationsGradient(en)	SLR	Satellite Laser Ranging
GLONASS	GLObal NAVigation Satellite System	SM	Shared Memory
GOCE	Gravity field and steady-state Ocean Circulation Explorer	SMP	Shared Memory Parallel
GPS	Global Positioning System	SP-LSQR	Subspace-präkonditioniertes LSQR
GRACE	Gravity Recovery And Climate Experiment	SST	Satellite-to-Satellite Tracking
GV	Gradiometrische Vorinformation	STEP	Satellite Test of the Equivalence Principle
HLRS	HöchstLeistungsRechenzentrum Stuttgart	TPP	Theoretical Peak Performance
HL-SST	High-Low Satellite-to-Satellite Tracking	UMA	Uniform Memory Access
HPC	High Performance Computing	WRMS	Weighted Root Mean Square

A. Referenzsysteme und Referenzsystemtransformationen

Zunächst erfolgt in Kapitel A.1 die Definition maßgeblicher Referenzsysteme im Hinblick auf die Satellitengradiometrie im Allgemeinen sowie die GOCE Mission im Speziellen. Deren gegenseitige Rotationsbeziehungen sind in Kapitel A.2 erläutert. Für eine detaillierte Beschreibung von Referenzsystemen hinsichtlich Translation und Maßstab sei auf Grafarend et al. (1979) verwiesen.

A.1 Definition geodätischer Bezugssysteme

Von fundamentaler Bedeutung für extraterrestrische Beobachtungen ist der Übergang von einem raumfesten in ein erdfestes Referenzsystem. Während für extraterrestrische Messungen gewöhnlich lediglich ein Bezug zum raumfesten System aufgestellt werden kann, erfolgt die Modellierung geodätischer Prozesse in einem der Erde fest verbundenen Bezugssystem.

Die Bewegung des Erdkörpers im Raum unterliegt verschiedenen Einflüssen, deren Modellierung schließlich den Systemübergang erlauben. Die Internationale Astronomische Union (IAU, International Astronomical Union) ist damit beauftragt, einheitliche Vorgehensweisen und Richtlinien für diesen Systemübergang festzulegen. Deren Realisierung wird vom Internationalen Erdrotations- und Bezugssystemdienst (IERS, International Earth Rotation and Reference Systems Service) wahrgenommen. Die entsprechenden Konventionen sind in den IERS Standards festgehalten. Vor wenigen Jahren erschien eine Neuauflage der Konventionen (McCarthy & Petit 2004), welche unter anderem eine verbesserte Beschreibung der Erdrotation im Vergleich zur Vorgängerversion (McCarthy 1996) definieren.

Die klassische Prozedur zur Transformation zwischen raumfestem und erdfestem Bezugssystem gründet auf den äquinoktienbasierten zälestischen Äquatorsystemen. In den IERS Standards 2003 erfolgt eine Neudefinition des Systemübergangs. Dabei wird die klassische Präzession-Nutations-Theorie ersetzt durch das Prinzip des „nichtrotierenden Ursprungs“ (NRO, Non-Rotating Origin). Die Beschreibung des zälestischen intermediären Pols (CIP, Celestial Intermediate Pole) — vormals zälestischer Ephemeridenpol (CEP, Celestial Ephemeris Pole) — bezüglich des raumfesten Systems durch die anschauliche Aufteilung in die Präzessions- und Nutationsbewegung ist nicht mehr möglich. Trotz der gefassten Resolutionen wird der IERS vorerst weiterhin die Transformationsparameter gemäß der klassischen (äquinoktienbasierten) Methode bereit stellen. Im Folgenden verdeutlicht der Index „Ä“ die Realisierung dieser Vorgehensweise.

Das (quasi-)inertiale oder raumfeste Bezugssystem. Ein ideales — freilich nicht realisierbares — Inertialsystem ist mit seinem Ursprung im Baryzentrum des Weltalls zu denken. Als Näherung an diesen Idealfall kommt ein System mit Ursprung im Baryzentrum unseres Sonnensystems in Betracht. Letzteres unterscheidet sich von einem im Geozentrum aufgehängten Bezugssystem einzig um die jährliche Paralaxe. Der aus praktischer Sicht einfachen Handhabung wegen stellt die geozentrische Definition die bevorzugte Beschreibung dar. Freilich ist für ein solches System der Begriff „inertial“ irreführend, treffender ist die Bezeichnung quasi-inertial oder auch raumfest.

Bis zum Jahre 1997 bildete das mittlere zälestische Äquatorsystem der Fundamentalepoche $t_0 = J2000.0$ das raumfeste System. Es ist definiert als das System des fünften Fundamentalkatalogs (FK5) und realisiert durch die Positionen der im FK5 enthaltenen Sterne. Der Ursprung des raumfesten Systems $\{\mathbf{e}_1^{\text{FK5}}, \mathbf{e}_2^{\text{FK5}}, \mathbf{e}_3^{\text{FK5}} \mid 0^\bullet\}$ bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{\text{FK5}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_0^{\text{FK5}} \times \boldsymbol{\Psi}}{\|\boldsymbol{\Omega}_0^{\text{FK5}} \times \boldsymbol{\Psi}\|}, \\ \mathbf{e}_2^{\text{FK5}} &= \mathbf{e}_3^{\text{FK5}} \times \mathbf{e}_1^{\text{FK5}}, \\ \mathbf{e}_3^{\text{FK5}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_0^{\text{FK5}}}{\|\boldsymbol{\Omega}_0^{\text{FK5}}\|}. \end{aligned} \tag{A.1}$$

Der dritte Basisvektor bezeichnet die Richtung zum mittleren Rotationspol der Erde zur Fundamentalepoche t_0 . Der erste Basisvektor zeigt zum mittleren Frühlingsäquinoktium dieses Zeitpunktes, wobei Ψ den Normalenvektor der Ekliptik bezeichnet. Seit Beginn des Jahres 1998 greift eine neue Definition des raumfesten Systems, welches in dieser Art als Internationales Zälestisches Referenzsystem (ICRS, International Celestial Reference System) bezeichnet wird. Es ist realisiert durch die Position extragalaktischer Radioquellen und erreicht damit eine wesentlich höhere Genauigkeit als das FK5 System. Das ICRS fällt nicht exakt mit dem mittleren zälestischen Äquatorsystem der Fundamentalepoche t_0 zusammen. Die beiden Systeme unterscheiden sich durch eine konstante Drehung \mathbf{P}_0 . Der Ursprung des raumfesten Systems $\{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_2^I, \mathbf{e}_3^I \mid \mathbf{0}^\bullet\}$ bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^I &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_0 \times \boldsymbol{\Psi}}{\|\boldsymbol{\Omega}_0 \times \boldsymbol{\Psi}\|}, \\ \mathbf{e}_2^I &= \mathbf{e}_3^I \times \mathbf{e}_1^I, \\ \mathbf{e}_3^I &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_0}{\|\boldsymbol{\Omega}_0\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Der dritte Basisvektor bezeichnet die Richtung zum mittleren Rotationspol der Erde entsprechend der Realisierung des ICRS.

Das zälestische intermediäre System. Der Ursprung des zälestischen intermediären Systems, bezeichnet mit $\{\mathbf{e}_1^{ZI}, \mathbf{e}_2^{ZI}, \mathbf{e}_3^{ZI} \mid \mathbf{0}^\bullet\}$, bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{ZI} &= \frac{\boldsymbol{\Phi}_{\text{CEO}}}{\|\boldsymbol{\Phi}_{\text{CEO}}\|}, \\ \mathbf{e}_2^{ZI} &= \mathbf{e}_3^{ZI} \times \mathbf{e}_1^{ZI}, \\ \mathbf{e}_3^{ZI} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\|\boldsymbol{\Omega}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Der dritte Basisvektor zeigt in Richtung des CIP, der erste Basisvektor zum zälestischen Ephemeridenursprung (CEO, Celestial Ephemeris Origin). Die Transformation zwischen ICRS und dem zälestischen intermediären System erfolgt über ein vorläufiges intermediäres System. An letzteres ist allein die Bedingung geknüpft, dass die dritte Achse die Richtung zum CIP aufweist. Die Richtung der ersten Achse liegt beliebig im wahren Äquator. Die Definition des wahren zälestischen Systems, vgl. (A.5), als vorläufiges intermediäres Äquatorsystem führt auf den klassischen äquinoktienbasierten Ansatz. In diesem Falle ist es möglich, die Transformationsmatrix $\mathbf{Q}_{\bar{\Delta}}$ zwischen den beiden Systemen in den Präzessions- und Nutationsanteil aufzuspalten, $\mathbf{Q}_{\bar{\Delta}} = \mathbf{NP}$. Zum zälestischen intermediären System gelangt man schließlich durch eine Drehung um den CIP mit dem Winkel $-s_{\bar{\Delta}}$, $\mathbf{R}_3(-s_{\bar{\Delta}})$, entsprechend des NRO Prinzips. $s_{\bar{\Delta}}$ ist der Winkel zwischen dem CEO und dem wahren Frühlingsäquinoktium. Tatsächlich fällt mit den IERS Standards 2003 das wahre zälestische Äquatorsystem weg. Als vorläufiges zälestisches intermediäres System dient ein System, welches sich nur um einen kleinen Winkel $-s$ (dem Rückstellwinkel zur Eliminierung der Richtungsänderung entlang des Äquators) vom intermediären zälestischen System unterscheidet. Der Winkel $-s$ nimmt im Vergleich zu $-s_{\bar{\Delta}}$ betragsmäßig wesentlich kleinere Werte an. Die Matrizen \mathbf{Q}' bzw. \mathbf{Q} transformieren zwischen dem vorläufigen zälestischen intermediären bzw. dem zälestischen intermediären System und dem ICRS. Dabei ist eine explizite Aufspaltung in die Präzessions- und Nutationsbewegung nicht mehr möglich.

Das terrestrische intermediäre System. Der Ursprung des terrestrischen intermediären Systems, bezeichnet mit $\{\mathbf{e}_1^{\text{TI}}, \mathbf{e}_2^{\text{TI}}, \mathbf{e}_3^{\text{TI}} \mid \mathbf{0}^\bullet\}$, bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{\text{TI}} &= \frac{\boldsymbol{\Phi}_{\text{TEO}}}{\|\boldsymbol{\Phi}_{\text{TEO}}\|}, \\ \mathbf{e}_2^{\text{TI}} &= \mathbf{e}_3^{\text{TI}} \times \mathbf{e}_1^{\text{TI}}, \\ \mathbf{e}_3^{\text{TI}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\|\boldsymbol{\Omega}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Der dritte Basisvektor zeigt wiederum in Richtung des CIP, der erste Basisvektor zum terrestrischen Ephemeridenursprung (TEO, Terrestrial Ephemeris Origin). Die Transformation zwischen dem zälestischen und terrestrischen intermediären System erfolgt um die gemeinsame dritte Achse, $\mathbf{R}_3(\theta)$. Der entsprechende Erdrotationswinkel θ liegt in der Äquatorebene rechtwinklig zum CIP und beschreibt den Winkel zwischen CEO und TEO. Um weiterhin den Zusammenhang zum klassischen Ansatz aufzeigen zu können, wird ein vorläufiges

terrestrisches intermediäres System eingeführt, welches das terrestrische Äquatorsystem, vgl. (A.6), ersetzt. Die Transformation zwischen den beiden Systemen, $\mathbf{R}_3(-s')$, erfolgt durch eine Drehung um den CIP mit dem Winkel $-s'$ (dem Rückstellwinkel zur Eliminierung der Richtungsänderung entlang des Äquators). Gemäß den Konventionen von 1996 transformiert der Erdrotationswinkel $\theta_{\dot{A}}$ (Greenwich Stundenwinkel des wahren Frühlingsäquinoktiums oder Greenwich wahre Sternzeit, GST, Greenwich Siderial Time) mit $\mathbf{R}_3(\theta_{\dot{A}})$ vom wahren zälestischen ins terrestrische Äquatorsystem. Er setzt sich zusammen aus der Greenwich mittleren Sternzeit (GMST, Greenwich Mean Siderial Time) und der Gleichung der Äquinoktien. Die Berechnung des Erdrotationswinkels θ gestaltet sich im Vergleich dazu weit einfacher. Dem gegenüber steht eine kompliziertere Evaluierung von \mathbf{Q} im Gegensatz zum äquinoktienbasierten Ansatz ($\mathbf{Q}_{\dot{A}}$). Letztlich ergibt sich der Aufwand zur Systemtransformation vom raumfesten in das terrestrische Referenzsystem unabhängig von der gewählten Prozedur. Gemäß der neuen Methode erfolgt die Verlagerung eines Teils der Berechnung von $\theta_{\dot{A}}$ (vor allem die Gleichung der Äquinoktien) in die Präzessions-Nutationsmatrix \mathbf{Q} (genauer gesagt in den Winkel s).

Das wahre zälestische Äquatorsystem (vorläufiges zälestisches intermediäres System). Das wahre zälestische Äquatorsystem unterscheidet sich von dem mittleren zälestischen Äquatorsystem zur Fundamentalepoche t_0 durch die Überlagerung von säkularen und periodischen Störungen. Erstere werden als die Präzession, letztere als Nutation bezeichnet. Sie können mittels Modellparameter in Form der Drehmatrizen \mathbf{P} und \mathbf{N} beschrieben werden. Der Ursprung des wahren zälestischen Äquatorsystems $\{\mathbf{e}_{1,\dot{A}}^{\text{VZI}}, \mathbf{e}_{2,\dot{A}}^{\text{VZI}}, \mathbf{e}_{3,\dot{A}}^{\text{VZI}} \mid 0^\bullet\}$ bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{1,\dot{A}}^{\text{VZI}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\Psi}}{\|\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\Psi}\|}, \\ \mathbf{e}_{2,\dot{A}}^{\text{VZI}} &= \mathbf{e}_{3,\dot{A}}^{\text{VZI}} \times \mathbf{e}_{1,\dot{A}}^{\text{VZI}}, \\ \mathbf{e}_{3,\dot{A}}^{\text{VZI}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\|\boldsymbol{\Omega}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Der dritte Basisvektor zeigt in Richtung des CIP (vormals CEP), und der erste Basisvektor zum wahren Frühlingsäquinoktium.

Das terrestrische Äquatorsystem (vorläufiges terrestrisches intermediäres System). Das terrestrische Äquatorsystem unterscheidet sich von dem wahren zälestischen Äquatorsystem durch eine Drehung um die gemeinsame dritte Achse — dem CIP — mit dem Erdrotationswinkel $\theta_{\dot{A}}$. Der Ursprung des terrestrischen Äquatorsystems $\{\mathbf{e}_1^{\text{VTI}}, \mathbf{e}_2^{\text{VTI}}, \mathbf{e}_3^{\text{VTI}} \mid 0^\bullet\}$ bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{\text{VTI}} &= \mathbf{e}_2^{\text{VTI}} \times \mathbf{e}_3^{\text{VTI}}, \\ \mathbf{e}_2^{\text{VTI}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{Gr}})}{\|\boldsymbol{\Omega} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{Gr}})\|}, \\ \mathbf{e}_3^{\text{VTI}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\|\boldsymbol{\Omega}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Die Basisvektoren $\mathbf{e}_1^{\text{VTI}}$ und $\mathbf{e}_2^{\text{VTI}}$ resultieren über die Projektion des (normierten) negativen Schwerevektors $-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{Gr}}$ „in Greenwich“ auf die wahre Äquatorebene.

Das erdfeste Referenzsystem. Das Internationale Terrestrische Referenzsystem (ITRS, International Terrestrial Reference System) unterliegt keiner Änderung durch die Einführung der IERS Standards 2003 im Vergleich zu denjenigen aus dem Jahre 1996. Der Ursprung des ITRS $\{\mathbf{e}_1^{\text{E}}, \mathbf{e}_2^{\text{E}}, \mathbf{e}_3^{\text{E}} \mid 0^\bullet\}$ bildet das Geozentrum und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{\text{E}} &= \mathbf{e}_2^{\text{E}} \times \mathbf{e}_3^{\text{E}}, \\ \mathbf{e}_2^{\text{E}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_{\text{CIO}} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{Gr}})}{\|\boldsymbol{\Omega}_{\text{CIO}} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{Gr}})\|}, \\ \mathbf{e}_3^{\text{E}} &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_{\text{CIO}}}{\|\boldsymbol{\Omega}_{\text{CIO}}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Der dritte Basisvektor bezeichnet die Richtung zum Konventionellen Internationalen Ursprung (CIO, Conventional International Origin) als die mittlere Erdrotationsachse innerhalb der Zeitspanne 1900 – 1905. Die

Polbewegung, parametrisiert mittels des Polbewegungsmatrix \mathbf{W}' , verbindet das vorläufige terrestrische intermediäre System (vormals terrestrisches Äquatorsystem) mit dem erdfesten System. Die bereits erwähnte Drehung $\mathbf{R}_3(-s')$ um die dritte Achse mit dem Rückstellwinkel $-s'$ transformiert schließlich in das terrestrische intermediäre System. Entsprechend verbindet die Polbewegungsmatrix \mathbf{W} das erdfeste mit dem terrestrischen intermediären System.

Das bahnbegleitende Referenzsystem. Das klassische bahnbegleitende Dreibein einer Kurve im Raum bildet im Sinne der Differentialgeometrie das Frenet Dreibein $\{\mathbf{e}_1^F, \mathbf{e}_2^F, \mathbf{e}_3^F \mid 0^*\}$. Der Ursprung des Systems ist der sich im Raum bewegende Kurvenpunkt 0^* und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_1^F &= \frac{\dot{\mathbf{x}}}{\|\dot{\mathbf{x}}\|}, \\ \mathbf{e}_2^F &= \frac{\ddot{\mathbf{x}} - \langle \ddot{\mathbf{x}} \mid \mathbf{e}_1^F \rangle \mathbf{e}_1^F}{\|\ddot{\mathbf{x}} - \langle \ddot{\mathbf{x}} \mid \mathbf{e}_1^F \rangle \mathbf{e}_1^F\|}, \\ \mathbf{e}_3^F &= \mathbf{e}_1^F \times \mathbf{e}_2^F.\end{aligned}\tag{A.8}$$

Im dreidimensionalen Euklidischen Raum wird das Frenet Dreibein wie folgt konstruiert: Der erste Basisvektor ist der normierte Tangentenvektor entlang der Kurve (normierter Geschwindigkeitsvektor, „along-track“). Der zweite Basisvektor wird gebildet über die Orthonormalisierung nach Gram-Schmitt. Dabei wird vom Beschleunigungsvektor dessen Projektion auf den ersten Basisvektor subtrahiert und das Resultat schließlich normiert. Der dritte Basisvektor wird entsprechend über die Gram-Schmitt Orthonormalisierung generiert oder kann alternativ durch das Kreuzprodukt der ersten beiden Basen berechnet werden. Es ist zu bemerken, dass das Frenet Dreibein aus dem Triplett $(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \ddot{\mathbf{x}})$ — Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung — gebildet wird.

Für den speziellen Fall der GOCE Mission wird eine alternative Definition des bahnbegleitenden Referenzsystem eingeführt, gewöhnlich als „along-track“, „cross-track“ und „quasi-radial“ bezeichnet. Ein solches System soll im Weiteren LORF (Local Orbit Reference Frame) $\{\mathbf{e}_1^L, \mathbf{e}_2^L, \mathbf{e}_3^L \mid 0^*\}$ genannt werden. Den Ursprung des LORF bildet wiederum der sich im Raum bewegende Kurvenpunkt und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_1^L &= \frac{\dot{\mathbf{x}}}{\|\dot{\mathbf{x}}\|}, \\ \mathbf{e}_2^L &= \frac{\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}}}{\|\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}}\|}, \\ \mathbf{e}_3^L &= \mathbf{e}_1^L \times \mathbf{e}_2^L.\end{aligned}\tag{A.9}$$

Der erste Basisvektor des LORF stimmt mit dem ersten Basisvektor des Frenet Dreibeins überein. Der zweite Basisvektor bildet sich aus dem Kreuzprodukt zwischen dem Positions- und Geschwindigkeitsvektor mit anschließender Normierung. Der dritte Basisvektor wird schließlich zum Rechtssystem ergänzt. Das orthogonale LORF berechnet sich aus dem Doublet $(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$.

Offensichtlich unterscheiden sich die beiden genannten bahnbegleitenden Systeme allein um eine Drehung um die gemeinsame erste Achse

$$\mathbf{e}^F = \mathbf{R}_1(\xi_1)\mathbf{e}^L.\tag{A.10}$$

Der Drehwinkel würde bei einem symmetrischen Kraftfeld $\xi_1 = \frac{\pi}{2}$ betragen, aufgrund auftretender Asymmetrien gilt hingegen $\xi_1 \approx \frac{\pi}{2}$.

Das Gradiometer-Referenzsystem. Das grundlegende Bezugssystem der Gradiometrie stellt natürlicherweise das Gradiometersystem $\{\mathbf{e}_1^G, \mathbf{e}_2^G, \mathbf{e}_3^G \mid 0^*\}$ dar. Bezüglich dessen Achsen erfolgen die Akzelerometermessungen (das Auftreten von Missalignmentfehlern sei hier nicht angenommen). Genauer gesagt ist das Gradiometersystem gerade gemäß der Anordnung der Beschleunigungsmesser definiert. Die Beobachtungsgröße „Gravitationsensor“ bezieht sich auf dieses System.

Das Referenzsystem der harmonischen Analyse. Das System der harmonischen Analyse — oder Modellsystem — ist das Tangentialsystem bezüglich der Parameterlinien der zugrunde liegenden Referenzfigur.

Der Ursprung des Systems $\{\mathbf{e}_1^M, \mathbf{e}_2^M, \mathbf{e}_3^M \mid 0^*\}$ bildet der aktuelle Kurvenpunkt und die Basisvektoren sind definiert mit

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^M &= \frac{\boldsymbol{\Omega}_{\text{ref}} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{ref}})}{\|\boldsymbol{\Omega}_{\text{ref}} \times (-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{ref}})\|}, \\ \mathbf{e}_2^M &= \mathbf{e}_3^M \times \mathbf{e}_1^M, \\ \mathbf{e}_3^M &= \frac{-\boldsymbol{\Gamma}_{\text{ref}}}{\|\boldsymbol{\Gamma}_{\text{ref}}\|}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Darin bezeichnet $\boldsymbol{\Omega}_{\text{ref}}$ die Richtung der Rotationsachse der Referenzfigur und $\boldsymbol{\Gamma}_{\text{ref}}$ die Richtung des Schwerevektors bzw. Gravitationsvektors bezüglich der Referenzfigur im Beobachtungspunkt. Im Falle einer sphärischen oder ellipsoidischen Parametrisierung dient die Kugel bzw. das Ellipsoid als Referenzfigur. Entsprechend sind die Basisvektoren des Tangentialsystems im Beobachtungspunkt tangential zum zugehörigen Breiten- und Längengrad gerichtet, sowie in radiale Richtung. Aus diesem Grunde sind auch die Bezeichnungen $\{\mathbf{e}_\lambda, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_r \mid 0^*\}$ und $\{\mathbf{e}_\lambda, \mathbf{e}_v, \mathbf{e}_u \mid 0^*\}$ des Modellsystems für die sphärische bzw. ellipsoidische Parametrisierung gebräuchlich.

A.2 Rotationen zwischen den Bezugssystemen

In Abb. A.1 sind die genannten Bezugssysteme samt ihren rotatorischen Zusammenhängen dargestellt. Auf letztere wird im Folgenden näher eingegangen. Aufgrund der Rotation des Satelliten im Raum ist die Orientierung des Gradiometersystems bezüglich eines davon abweichenden Bezugssystems eine Funktion der Zeit (allein für ein inertial stabilisiertes Gradiometer decken sich die Achsen des Gradiometersystems und raumfesten Systems). Um speziell das Gradiometersystem mit dem Modellsystem verknüpfen zu können, müssen die entsprechenden Transformationsparameter bereit gestellt werden. Das Modellsystem ist definiert über das erdfeste Bezugssystem, vgl. (A.11). Für ein massegerichtetes Gradiometer (wie z.B. bei GOCE) wird das Gradiometersystem bestmöglich im Bahnsystem gehalten, um eine weitgehend konstante Orientierung des Gradiometers bezüglich der gravitativen Masse zu gewährleisten (ESA 1999, Müller 2001). Die Orientierung des Gradiometersystems wird vorzugsweise bezüglich des raumfesten Bezugssystems bestimmt. Das Bahnsystem ist gemäß (A.9) ebenfalls über das erdfeste System definiert. Diesen Betrachtungen zufolge wird die Orientierung des Gradiometersystems über das raumfeste und erdfeste System im Bahnsystem bereit gestellt, welches schließlich mit dem Modellsystem in funktionalen Zusammenhang gebracht wird. Damit

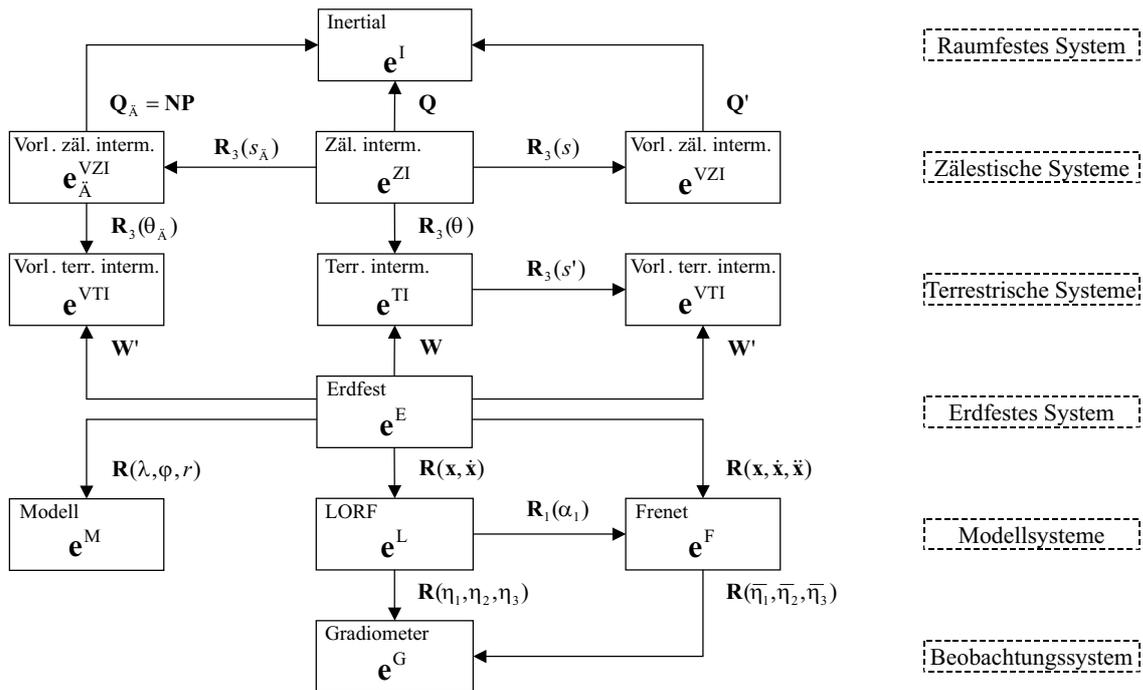


Abbildung A.1: Elementare Bezugssystemrotationen

ergeben sich folgende fundamentale Systemübergänge für die Gradiometrie:

- raumfestes System \leftrightarrow erdfestes System
- erdfestes System \leftrightarrow Bahnsystem
- erdfestes System \leftrightarrow Modellsystem
- Gradiometersystem \leftrightarrow Bahnsystem

Rotation raumfestes System \leftrightarrow erdfestes System. Die Transformation zwischen dem raumfesten und erdfesten Referenzsystem wird hier entsprechend den beiden Ausführungen der IERS Standards 2003 — klassisch und alternativ — beschrieben. Allgemein gilt die Darstellung

$$\mathbf{e}^I = \mathbf{D}(t)\mathbf{R}(t)\mathbf{B}(t)\mathbf{e}^E. \quad (\text{A.12})$$

Auf die Transformationsmatrizen $\mathbf{D}(t)$, $\mathbf{R}(t)$ und $\mathbf{B}(t)$ wird im Folgenden genauer eingegangen. Dabei ist der variable Zeitparameter t , bezogen auf Terrestrial Time (TT), definiert mit

$$t = (\text{TT} - 51544.5 \text{ MJD}) \text{ in Tage}/36525. \quad (\text{A.13})$$

Die klassische Methode beschreibt die Transformation zwischen raumfestem und erdfestem Bezugssystem mit Hilfe der äquinoktienbasierten vorläufigen intermediären Systeme. Die Transformationsmatrix $\mathbf{D}(t)$ stellt das Produkt aus Präzessionsmatrix \mathbf{P} und Nutationsmatrix \mathbf{N} dar,

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{Q}_{\dot{A}}(t) = \mathbf{N}(t)\mathbf{P}(t). \quad (\text{A.14})$$

Beide werden durch jeweils drei Elementarrotationen zusammen gesetzt:

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{R}_3(\zeta_A)\mathbf{R}_2(-\theta_A)\mathbf{R}_3(z_A), \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{R}_1(-\epsilon_A)\mathbf{R}_3(\Delta\psi)\mathbf{R}_1(\epsilon_A + \Delta\epsilon). \quad (\text{A.16})$$

Die drei Präzessionsparameter ζ_A , θ_A , z_A und die beiden Nutationsparameter $\Delta\psi$, $\Delta\epsilon$ sowie die Schiefe der Ekliptik ϵ_A sind direkte Funktionale des Parameters t . $\mathbf{R}(t)$ wird — wie bereits beschrieben — identifiziert mit der Rotation

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_3(-\theta_{\dot{A}}) = \mathbf{R}_3(-\text{GST}). \quad (\text{A.17})$$

Schließlich gilt für die Polbewegungsmatrix

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{W}'(t) = \mathbf{R}_2(x_p)\mathbf{R}_1(y_p) \quad (\text{A.18})$$

mit den Polkoordinaten x_p und y_p . Sämtliche hier erwähnte Transformationsparameter werden vom IERS bereit gestellt.

Mit der Einführung des NRO Prinzips ist die Transformationsmatrix $\mathbf{D}(t)$ nicht mehr strikt in einen Präzessions- und Nutationsanteil zu trennen. Vielmehr gilt

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{Q}(t) = \mathbf{Q}'(t)\mathbf{R}_3(s). \quad (\text{A.19})$$

Die Matrix $\mathbf{Q}'(t)$ enthält die kartesischen Koordinaten X und Y des CIP bezüglich des ICRS

$$\mathbf{Q}'(t) = \begin{pmatrix} 1 - aX^2 & -aXY & X \\ -aXY & 1 - aY^2 & Y \\ -X & -Y & 1 - a(X^2 + Y^2) \end{pmatrix}, \quad a = \frac{1}{2} + \frac{1}{8}(X^2 + Y^2). \quad (\text{A.20})$$

Wie bereits zuvor erwähnt, transformiert $\mathbf{Q}'(t)$ zwischen dem raumfesten und dem vorläufigen zälestischen intermediären System. $\mathbf{R}_3(s)$ beschreibt die Rotation zwischen dessen erster Achse und der Richtung des CEO. Das Argument der Rotationsmatrix $\mathbf{R}(t)$ ist der Erdrotationswinkel θ

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_3(-\theta) \quad (\text{A.21})$$

und die Polbewegungsmatrix setzt sich zusammen aus $\mathbf{W}'(t)$ zuzüglich einer Rotation um den CIP mit dem Rückstellwinkel $-s'$, um die erste Achse des vorläufigen terrestrischen intermediären Systems mit der Richtung des TEO in Deckung zu bringen:

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{R}_3(-s')\mathbf{W}'(t) = \mathbf{R}_3(-s')\mathbf{R}_2(x_p)\mathbf{R}_1(y_p). \quad (\text{A.22})$$

Die entsprechenden Transformationsparameter werden vom IERS bereit gestellt. Tabelle A.1 gibt die Zuordnung der Bezugssysteme entsprechend der beiden Methoden an.

Tabelle A.1: Zuordnung der Referenzsysteme

	äquinoktienbasiert	NRO Prinzip
raumfest	$\{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_2^I, \mathbf{e}_3^I \mid 0^\bullet\}$	$\{\mathbf{e}_1^I, \mathbf{e}_2^I, \mathbf{e}_3^I \mid 0^\bullet\}$
zälestisch	$\{\mathbf{e}_{1,\ddot{A}}^{VZI}, \mathbf{e}_{2,\ddot{A}}^{VZI}, \mathbf{e}_{3,\ddot{A}}^{VZI} \mid 0^\bullet\}$	$\{\mathbf{e}_1^{ZI}, \mathbf{e}_2^{ZI}, \mathbf{e}_3^{ZI} \mid 0^\bullet\}$
terrestrisch	$\{\mathbf{e}_1^{VTI}, \mathbf{e}_2^{VTI}, \mathbf{e}_3^{VTI} \mid 0^\bullet\}$	$\{\mathbf{e}_1^{TI}, \mathbf{e}_2^{TI}, \mathbf{e}_3^{TI} \mid 0^\bullet\}$
erdfest	$\{\mathbf{e}_1^E, \mathbf{e}_2^E, \mathbf{e}_3^E \mid 0^\bullet\}$	$\{\mathbf{e}_1^E, \mathbf{e}_2^E, \mathbf{e}_3^E \mid 0^\bullet\}$

Rotation erdfestes System \leftrightarrow **Bahnsystem.** Die Definition des bahnbegleitenden Systems (LORF) erfolgt über den Orts- und Geschwindigkeitsvektor des Beobachtungspunktes bezüglich des erdfesten Systems (A.9). Damit ist der rotatorische Zusammenhang der beiden Systeme gegeben mit

$$\mathbf{e}^L = \mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\mathbf{e}^E. \quad (\text{A.23})$$

Die Rotationsmatrix lautet

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} \frac{\dot{x}_1}{\sqrt{N_1}} & \frac{\dot{x}_2}{\sqrt{N_1}} & \frac{\dot{x}_3}{\sqrt{N_1}} \\ \frac{x_3\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_3}{\sqrt{N_3}} & \frac{x_1\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_1}{\sqrt{N_3}} & \frac{x_2\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_2}{\sqrt{N_3}} \\ \frac{Z_1}{\sqrt{N_2}} & \frac{Z_2}{\sqrt{N_2}} & \frac{Z_3}{\sqrt{N_2}} \end{bmatrix} \quad (\text{A.24})$$

mit

$$\begin{aligned} N_1 &= (\dot{x}_1)^2 + (\dot{x}_2)^2 + (\dot{x}_3)^2, \\ N_2 &= (x_2\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_2)^2 + (x_3\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_3)^2 + (x_1\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_1)^2, \\ N_3 &= ((x_3\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_3)\dot{x}_3 - (x_1\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_1)\dot{x}_2)^2 \\ &\quad + ((x_1\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_1)\dot{x}_1 - (x_2\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_2)\dot{x}_3)^2 \\ &\quad + ((x_2\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_2)\dot{x}_2 - (x_3\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_3)\dot{x}_1)^2, \\ Z_1 &= (x_2\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_2)\dot{x}_2 - (x_1\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_1)\dot{x}_3, \\ Z_2 &= (x_3\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_3)\dot{x}_3 - (x_2\dot{x}_1 - x_1\dot{x}_2)\dot{x}_1, \\ Z_3 &= (x_1\dot{x}_3 - x_3\dot{x}_1)\dot{x}_1 - (x_3\dot{x}_2 - x_2\dot{x}_3)\dot{x}_2. \end{aligned}$$

Entsprechend steht mit (A.8) das erdfeste System mit dem Frenet Dreibein über

$$\mathbf{e}^F = \mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \ddot{\mathbf{x}})\mathbf{e}^E \quad (\text{A.25})$$

in Verbindung.

Rotation erdfestes System \leftrightarrow **Modellsystem.** Wie bereits erwähnt, basiert die Definition des Tangentialsystems auf der Parametrisierung des Ortsvektors in sphärischen Koordinaten (λ, φ, r)

$$\mathbf{e}_i^E x_i = \mathbf{e}_1^E r \cos \varphi \cos \lambda + \mathbf{e}_2^E r \cos \varphi \sin \lambda + \mathbf{e}_3^E r \sin \varphi. \quad (\text{A.26})$$

Die Jacobi-Matrix der Parametrisierung (normierte Elemente) generiert die orthonormale Rotationsmatrix zwischen dem erdfesten System und dem Modellsystem

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^M = \mathbf{e}_\lambda &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \lambda} \div \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \lambda} \right\|, \\ \mathbf{e}_2^M = \mathbf{e}_\varphi &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi} \div \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi} \right\|, \\ \mathbf{e}_3^M = \mathbf{e}_r &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \div \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \right\|. \end{aligned}$$

Explizit wird

$$\mathbf{e}^M = \mathbf{R}(\lambda, \varphi, r)\mathbf{e}^E \quad (\text{A.27})$$

mit der Rotationsmatrix

$$\mathbf{R}(\lambda, \varphi, r) = \begin{bmatrix} -\sin \lambda & \cos \lambda & 0 \\ -\sin \varphi \cos \lambda & -\sin \varphi \sin \lambda & \cos \varphi \\ \cos \varphi \cos \lambda & \cos \varphi \sin \lambda & \sin \varphi \end{bmatrix}. \quad (\text{A.28})$$

Rotation Gradiometersystem \leftrightarrow **Bahnsystem**. Die Abweichung der beiden Referenzsysteme kann beispielsweise über eine Eulerparametrisierung erfolgen

$$\mathbf{R}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \mathbf{R}_3(\eta_3)\mathbf{R}_2(\eta_2)\mathbf{R}_3(\eta_1), \quad (\text{A.29})$$

welche sich aus drei Elementarrotationen zusammensetzt. Dann gilt für den Übergang der beiden Systeme

$$\mathbf{e}^G = \mathbf{R}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)\mathbf{e}^L. \quad (\text{A.30})$$

Rotation raumfestes System \leftrightarrow **Bahnsystem**. In Kapitel 2.1 wird die Relativkinematik des bewegten Bahnsystems \mathbf{e}^L bezüglich des raumfesten Systems \mathbf{e}^I behandelt. Die Beziehung zwischen den beiden Systemen lautet

$$\mathbf{e}^L = \mathbf{R}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L} \mathbf{e}^I. \quad (\text{A.31})$$

Die Rotationsmatrix $\mathbf{R}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L}$ ergibt sich mit (A.12) und (A.23) zu

$$\mathbf{R}^{\mathbf{e}^I \mathbf{e}^L} = \mathbf{R}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\mathbf{B}^T(t)\mathbf{R}^T(t)\mathbf{D}^T(t). \quad (\text{A.32})$$

Literaturverzeichnis

- Alefeld G., Lenhardt I., Obermaier H. (2002) Parallele numerische Verfahren, Springer Berlin
- Anderson E., Bai Z., Bischof C., Blackford S., Demmel J., Dongarra J., Du Croz J., Greenbaum A., Hammarling S., McKenney A., Sorensen D. (1999) LAPACK Users' Guide (third edition), SIAM Philadelphia
- Austen G., Baur O., Keller W. (2006) Use of High Performance Computing in Gravity Field Research, in: Nagel W.E., Jäger W., Resch M. (eds.) High Performance Computing in Science and Engineering 05, Springer, pp. 305–318
- Balmino G., Barlier F., Bernard A., Bouzat C., Ducasse M., Le Pichon X., Letoquart D., Runavot J.J., Saclux B., Souriau M. (1984) Le projet Gradio et la détermination à haute résolution du géopotentiel, *B. Geod.*, 58, pp. 151–179
- Balmino G., Barriot J., Koop R., Middel B., Thong N.C., Vermeer M. (1991) Simulation of gravity gradients: a comparison study, *B. Geod.*, 65, pp. 218–229
- Baur O., Grafarend E.W. (2005) Orbital rotations of a satellite. Case study: GOCE, *Artif. Satellites*, Vol. 40, No. 2, pp. 87–107
- Baur O., Austen G. (2005) A parallel iterative algorithm for large-scale problems of type potential field recovery from satellite data, Proceedings Joint CHAMP/GRACE Science Meeting, Geoforschungszentrum Potsdam, online publication (www.gfz-potsdam.de/pb1/JCG)
- Baur O., Grafarend E.W. (2006) High-Performance GOCE Gravity Field Recovery from Gravity Gradients Tensor Invariants and Kinematic Orbit Information, in: Flury J., Rummel R., Reigber C., Rothacher M., Boedecker G., Schreiber U. (eds.) Observation of the Earth System from Space, Springer Berlin Heidelberg New York, pp. 239–253
- Baur O., Austen G., Kusche J. (2007a) Efficient GOCE satellite gravity field recovery based on least-squares using QR decomposition, *J. Geod.*, online first
- Baur O., Sneeuw N., Grafarend E.W. (2007b) Methodology and use of tensor invariants for satellite gravity gradiometry, *J. Geod.*, online first
- Belikov M.V., Taybatorov K.A. (1992) An efficient algorithm for computing the Earth's gravitational potential and its derivatives at satellite altitudes, *Manuscr. Geodaet.*, 17, pp. 104–116
- Benbow S.J. (1999) Solving generalized least squares problems with LSQR, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 21, No. 1, pp. 166–177
- Björck A. (1996) Numerical methods for least squares problems, SIAM Philadelphia
- Bölling K., Grafarend E.W. (2005) Ellipsoidal spectral properties of the Earth's gravitational potential and its first and second derivatives, *J. Geod.*, 79, pp. 300–330
- Cai J., Grafarend E.W., Schaffrin B. (2004) The A-optimal regularization parameter in uniform Tykhonov-Phillips regularization — α weighted BLE, in: Sansò, F. (ed.) IAG Symposia, 127, Springer Berlin Heidelberg, pp. 309–324
- Chandra R., Menon R., Dagum L., Kohr D., Maydan D., McDonald J. (2001) Parallel Programming in OpenMP, Academic Press
- Colombo O.L. (1981) Numerical methods for harmonic analysis on the sphere, Department of Geodetic Science, Report No. 310, Ohio State University, Columbus
- Colombo O.L. (1984) The global mapping of gravity with two satellites, Netherlands Geodetic Commission, New Series, Vol. 7, No. 3, Delft, Niederlande
- Colombo O.L. (1989) Mapping the Earth's gravity field with orbiting GPS receivers, IAG General Meeting, Edinburgh
- Dahlen F.A., Tromp J. (1998) Theoretical global seismology, Princeton University Press New Jersey
- Dambeck J.H. (1999) Diagnose und Therapie geodätischer Trägheitsnavigationssysteme: Modellierung, Systemtheorie, Simulation, Realdatenverarbeitung, Schriftenreihe der Institute des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik, No. 1999.3, Universität Stuttgart
- Ditmar P., Klees R., Kostenko F. (2003a) Fast and accurate computation of spherical harmonic coefficients from satellite gravity gradiometry data, *J. Geod.*, 76, pp. 690–705
- Ditmar P., Kusche J., Klees R. (2003b) Computation of spherical harmonic coefficients from gravity gradiometry data to be acquired by the GOCE satellite: regularization issues, *J. Geod.*, 77, pp. 465–477
- Do Carmo M. (1983) Differentialgeometrie von Kurven und Flächen, Vieweg-Studium Braunschweig
- Dowd K., Severance C. (1998) High performance Computing, O'Reilly
- Eringen A.C. (1962) Nonlinear theory of continuous media, McGraw-Hill New York
- ESA (1993) STEP symposium, ESA WPP-115
- ESA (1999) Gravity Field and steady-state ocean circulation mission, ESA Publications Division, Reports for Mission Selection of the four candidate Earth explorer missions, ESA SP-1233(1), ESTEC, Noordwijk

- ESA (2000) From Eötvös to milligal, Final Report ESA/ESTEC, Contract No. 13392/98/NL/GD
- Flynn M.J. (1972) Some Computer Organizations and Their Effectiveness, *IEEE Trans. Comput.*, Vol. C-21, pp. 948–960
- Forward R.L. (1981) Gravity sensors and the principle of equivalence, *IEEE T. Aero. Elec. Sys.*, 17, pp. 511–519
- Gelderen M. van, Koop R. (1997) The use of degree variances in satellite gradiometry, *J. Geod.*, 71, pp. 337–343
- GFZ Potsdam (2000) CHAMP — Der Blick in das Innere der Erde, GFZ, Potsdam
- Golub G.H., Kahan W. (1965) Calculating the singular values and pseudoinverse of a matrix, *SIAM J. Numer. Anal.*, 2, pp. 205–224
- Grafarend E.W. (1970) Die Genauigkeit eines Punktes im mehrdimensionalen Euklidischen Raum, DGK, Reihe C, 153, München
- Grafarend E.W., Mueller I.I., Papo H.B., Richter B. (1979) Investigations on the hierarchy of reference frames in geodesy and geodynamics, Department of Geodetic Science, Report No. 289, Ohio State University, Columbus
- Grafarend E.W., Schaffrin B. (1993) Ausgleichsrechnung in linearen Modellen, BI Wissenschaftsverlag Mannheim
- Grafarend E.W. (2004) Tensor Algebra — Linear Algebra — Multilinear Algebra, Schriftenreihe der Institute des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik, No. 2004.1, Universität Stuttgart
- Grafarend E.W. (2006) Linear and nonlinear models: fixed effects, random effects, and mixed models, de Gruyter Berlin
- Grunsky H., Schur I. (1968) Vorlesungen über Invariantentheorie, Springer Berlin Heidelberg New York
- Gurevic G.B. (1964) Foundations of the theory of algebraic invariants, P. Noordhoff Groningen
- Hanke M., Hansen P.C. (1993) Regularization methods for large-scale problems, *Surv. Math. Ind.*, 3, pp. 253–315
- Hanke M., Vogel C.R. (1999) Two-level preconditioners for regularized inverse problems I: Theory, *Numer. Math.*, 83, pp. 385–402
- Heiskanen W.A., Moritz H. (1967) Physical Geodesy, W.H. Freeman and Company San Francisco
- Hestenes M.R., Stiefel E. (1952) Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 49, pp. 409–436
- Hilbert D. (1890) Über die Theorie der algebraischen Formen, *Math. Ann.*, 36, pp. 473–534
- Hilbert D. (1893) Über die vollen Invariantensysteme, *Math. Ann.*, 42, pp. 313–373
- Hobson E.W. (1931) The theory of spherical and ellipsoidal harmonics, University Press Cambridge
- Holota P. (1988) Boundary value problems and invariants of the gravitational tensor in satellite gradiometry, in: Sansò F., Rummel R. (eds.) Theory of satellite geodesy and gravity field determination, *Lect. Notes Earth Sci.*, 25, Springer Berlin Heidelberg New York, pp. 447–457
- Ilk K.H., Visser P., Kusche J. (2003) Satellite Gravity Field Missions, Final Report Special Commission 7, Vol. 32, General and technical reports 1999–2003
- Jacobsen M., Hansen P.C., Saunders M.A. (2003) Subspace preconditioned LSQR for discrete ill-posed problems, *BIT*, 43, pp. 975–989
- Jekeli C. (1988) The exact transformation between ellipsoidal and spherical harmonic expansions, *Manuscr. Geodaet.*, 13, pp. 106–113
- JPL (1999) GRACE science and mission requirements document, 327-200, Revision B, JPL, Pasadena, CA
- Kaplan M. (1976) Modern spacecraft dynamics & control, John Wiley & Sons
- Kaula W.M. (1966) Theory of satellite geodesy, Blaisdell, Waltham, Mass.
- Keller W. (2001) A Wavelet Approach for the Construction of Multi-Grid Solvers for Large Linear Systems, in: Proc. IAG Scientific Assembly, Budapest, Ungarn
- Keller W., Sharifi M. (2005) Satellite Gradiometry Using a Satellite Pair, *J. Geod.*, 78, pp. 544–557
- Kilmer M.E., O’Leary D.P. (2001) Choosing regularization parameters in iterative methods for ill-posed problems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 22, No. 4, pp. 1204–1221
- Klees R., Koop R., Visser P., van den IJssel J. (2000) Efficient gravity field recovery from GOCE gravity gradient observations, *J. Geod.*, 74, pp. 561–571
- Klees R., Ditmar P., Broersen P. (2003) How to handle coloured observation noise in large-scale least-squares problems, *J. Geod.*, 76, pp. 629–640
- Klingbeil E. (1966) Tensorrechnung für Ingenieure, BI Wissenschaftsverlag Mannheim Wien Zürich
- Knickmeyer E.H. (1984) Eine approximative Lösung der allgemeinen linearen Geodätischen Randwertaufgabe durch Reihenentwicklungen nach Kugelfunktionen, DGK, Reihe C, 304, München
- Koch K.-R. (1999) Parameter estimation and hypothesis testing in linear models, Springer Berlin Heidelberg New York
- Koch K.-R., Kusche J. (2002) Regularization of geopotential determination from satellite data by variance components, *J. Geod.*, 76, pp. 259–268

- Korn G.A., Korn T.M. (2000) *Mathematical handbook for scientists and engineers*, Dover Publications New York
- Kreyszig E. (1991) *Differential Geometry*, Dover Publications New York
- Kusche J. (2001) Implementation of multigrid solvers for satellite gravity anomaly recovery, *J. Geod.*, 74, pp. 773–782
- Kusche J., Mayer-Gürr T. (2001) Iterative Solution of Ill-Conditioned Normal Equations by Lanczos Methods, in: *Proc. IAG Scientific Assembly*, Budapest, Ungarn
- Kusche J. (2002) On fast multigrid iteration techniques for the solution of normal equations in satellite gravity recovery, *J. Geodyn.*, 33, pp. 173–186
- Kusche J., Klees R. (2002) Regularization of gravity field estimation from satellite gravity gradients, *J. Geod.*, 76, pp. 359–368
- Lemoine F.G., Kenyon S.C., Factor J.K., Trimmer R.G., Pavlis N.K., Chinn D.S., Cox C.M., Klosko S.M., Luthcke S.B., Torrence M.H., Wang Y.M., Williamson R.G., Pavlis E.C., Rapp R.H., Olson T.R. (1998) *The Development of the Joint NASA GSFC and NIMA Geopotential Model EGM96*, NASA Goddard Space Flight Center, Greenbelt, Maryland, USA
- Lohse P. (1994) *Ausgleichsrechnung in nichtlinearen Modellen*, DGK, Reihe C, 429, München
- Menke W. (1984) *Geophysical data analysis: Discrete inverse theory*, Academic Press San Diego
- Meusnier J. (1785) *Mémoire sur la courbure des surfaces*, *Mém. des Savantes étr.*, 10, 504
- McCarthy D.D. (1996) *IERS Conventions*, IERS Technical Note, No. 21
- McCarthy D.D., Petit G. (2004) *IERS Conventions*, IERS Technical Note, No. 32, Verlag des Bundesamts für Kartographie und Geodäsie, Frankfurt am Main
- Moritz H. (1968) *Kinematical Geodesy*, DGK, Reihe A, 59, München
- Moritz H. (1985) Inertia and Gravitation in Geodesy, in: Schwarz K.P. (ed.) *Inertial Technology for Surveying and Geodesy*
- Müller J. (2001) *Die Satellitengradiometermission GOCE*, DGK, Reihe C, 541, München
- Neutsch W. (1995) *Koordinaten: Theorie und Anwendungen*, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg Berlin Oxford
- O’Leary D.P., Simmons J.A. (1981) A bidiagonalization regularization procedure for large scale discretizations of ill-posed problems, *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 2, pp. 474–489
- Paige C.C., Saunders M.A. (1982a) LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, *ACM T. Math. Software*, 8, pp. 43–71
- Paige C.C., Saunders M.A. (1982b) LSQR: Sparse linear equations and least squares problems, *ACM T. Math. Software*, 8, pp. 195–209
- Pail R., Plank G. (2002) Assessment of three numerical solution strategies for gravity field recovery from GOCE satellite gravity gradiometry implemented on a parallel platform, *J. Geod.*, 76, pp. 462–474
- Pail R. (2004) *GOCE Quick-Look Gravity Field Analysis: Treatment of gravity gradients defined in the gradiometer reference frame*, *Proceedings of the 2nd Internat. GOCE User Workshop*, Frascati, Italien
- Petrovskaya M.S., Vershkov A.N. (2006) Non-singular expressions for the gravity gradients in the local north-oriented and orbital reference frames, *J. Geod.*, 80, pp. 117–127
- Phillips D.L. (1962) A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind, *J. ACM*, 9, pp. 54–97
- Rapp R.H., Cruz J.Y. (1986) *Spherical harmonic expansions of the Earth’s gravitational potential to degree 360 using 30’ mean anomalies*, Department of Geodetic Science, Report No. 376, Ohio State University, Columbus
- Reigber C., Jochmann H., Wunsch J., Petrovic S., Schwintzer P., Barthelmes F., Neumayer K.H., König R., Förste C., Balmino G., Biancale R., Lemoine J.M., Loyer S., Perosanz F. (2005a) *Earth Gravity Field and Seasonal Variability from CHAMP*, in: Reigber C., Lühr H., Schwintzer P., Wickert J. (eds.) *Earth Observation with CHAMP — Results from Three Years in Orbit*, Springer Berlin, pp. 25–30
- Reigber C., Schmidt R., Flechtner F., König R., Meyer U., Neumayer K.H., Schwintzer P., Zhu S.Y. (2005b) *An Earth gravity field model complete to degree and order 150 from GRACE: EIGEN-GRACE02S*, *J. Geodyn.*, 39(1), pp. 1–10
- Reubelt T., Austen G., Grafarend E.W. (2003) Harmonic analysis of the Earth’s gravitational field by means of semi-continuous ephemerides of a low Earth orbiting GPS-tracked satellite. Case study: CHAMP, *J. Geod.*, 77, pp. 257–278
- Reubelt T., Götzelmann M., Grafarend E.W. (2006) *Harmonic Analysis of the Earth Gravitational Field from Kinematic CHAMP Orbits based on Numerically Derived Satellite Accelerations*, in: Flury J., Rummel R., Reigber C., Rothacher M., Boedecker G., Schreiber U. (eds.) *Observation of the Earth System from Space*, Springer Berlin Heidelberg New York, pp. 27–42
- Rummel R. (1986) *Satellite Gradiometry*, in: Sünkel, H. (ed.) *Mathematical and Numerical Techniques in Physical Geodesy*, *Lect. Notes Earth Sci.*, 7, Springer Berlin, pp. 317–363
- Rummel R., Schrama E.J.O. (1991) *Two complementary systems on-board ‘Aristoteles’: Gradio and GPS*, *ESA Journal*, Vol. 15

- Rummel R., Sansò F., van Gelderen M., Brovelli M., Koop R., Migliaccio F., Schrama E., Sacerdote F. (1993) Spherical harmonic analysis of satellite gradiometry, Netherlands Geodetic Commission, New Series, 39, Delft, Niederlande
- Sacerdote F., Sansò F. (1989) Some problems related to satellite gradiometry, *B. Geod.*, 63, pp. 405–415
- Schäfer C. (2001) Space Gravity Spectroscopy: The sensitivity analysis of GPS-tracked satellite missions (case study CHAMP), DGK, Reihe C, 534
- Schmidt M., Fengler M., Mayer-Gürr T., Eicker A., Kusche J., Sánchez L., Han S.-C. (2007) Regional gravity modeling in terms of spherical base functions, *J. Geod.*, 81, pp. 17–38
- Schneider M. (1992) *Himmelsmechanik*, Bd. I, BI Wissenschaftsverlag
- Schreiner M. (1994) Tensor spherical harmonics and their application in satellite gradiometry, Dissertation, 386, Universität Kaiserslautern
- Schuh W.D. (1996) Tailored numerical solution strategies for the global determination of the Earth's gravity field, *Mitteilungen der Universität Graz*, 81
- Sneeuw N. (1994) Global Gravity Field Error Simulations for STEP-Geodesy, in: Rummel R., Schwintzer P. (eds.) *A Major STEP For Geodesy*, Report of the STEP Geodesy Working Group, München, Potsdam
- Sneeuw N., van Gelderen M. (1997) The polar gap, in: Sansò F., Rummel R. (eds.) *Geodetic Boundary Value Problems in View of the One Centimeter Geoid*, *Lect. Notes Earth Sci.*, 65, pp. 559–568, Springer Berlin
- Sneeuw N. (2000) A semi-analytical approach to gravity field analysis from satellite observations, DGK, Reihe C, 527, München
- Snir M., Otto S.W., Huss-Lederman S., Walker D.W., Dongarra J. (1995) *MPI: The Complete Reference*, MIT Press Cambridge
- Tapley B.D., Bettadpur S., Ries J.C., Thompson P.F., Watkins M. (2004) GRACE Measurements of Mass Variability in the Earth System, *Science*, Vol. 305, Issue 5683, pp. 503–505
- Tikhonov A.N. (1963) Regularization of incorrectly posed problems, *Sov. Mat. Dokl.*, 4, pp. 1035–1038
- Thong N.C. (1989) Simulation of gradiometry using the spheroidal harmonic model of the gravitational field, *Manusc. Geodaet.*, 14, pp. 404–417
- Thong N.C., Grafarend E.W. (1989) A spheroidal harmonic model of the terrestrial gravitational field, *Manusc. Geodaet.*, 14, pp. 285–304
- Vermeer M. (1990) Observable quantities in satellite gradiometry, *B. Geod.*, 64, pp. 347–361
- Weitzenböck R. (1923) *Invariantentheorie*, P. Noordhoff Groningen
- Xu J. (1997) An Introduction to Multilevel Methods, *Numer. Math. Sci. Comput.*, pp. 213–302
- Xu P.L. (1992) The value of minimum norm estimation of geopotential fields, *Geophys. J. Int.*, 111, pp. 170–178
- Yao Z.S., Roberts R.G., Tryggvason A. (1999) Calculating resolution and covariance matrices for seismic tomography with the LSQR method, *Geophys. J. Int.*, 138, pp. 886–894
- Zhang J., McMechan G.A. (1995) Estimation of resolution and covariance for large matrix inversion, *Geophys. J. Int.*, 121, pp. 409–426

Danksagung

Herzlich bedanken möchte ich mich bei all denen, die mich bei der Umsetzung der vorliegenden Arbeit unterstützt haben. Namentlich gilt Prof. Nico Sneeuw besonderer Dank für seine gewinnbringenden fachlichen Anregungen und das mir gegenüber erbrachte Vertrauen. Ebenso möchte ich mich bei Prof. Erik W. Grafarend bedanken, welcher mich bis zu seiner Emeritierung auf dem Weg zur Promotion begleitet hat. Weiterer Dank geht an Prof. Reiner Rummel der TU München. Aufgrund seiner langjährigen Tätigkeit im Bereich der Satellitengradiometrie, freut es mich besonders, dass er die Aufgabe des Korreferates mit übernommen hat.

Ohne die Bereitstellung der rechentechnischen Ressourcen des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) und des Center for Computing and Networking Services in Amsterdam (SARA) wäre die Umsetzung des numerischen Teils dieser Arbeit in dieser Art und Weise nicht möglich gewesen. Beide Rechenzentren waren ein permanenter Ansprechpartner und um schnelle Problembehebung stets bemüht. Ferner möchte ich mich bei Prof. Wolf-Dieter Schuh der Universität Bonn bedanken für die Bereitstellung simulierter GOCE Fehlermodelle.

Das größte Dankeschön gebührt meinen Eltern, welche mir stets ein Gefühl von Geborgenheit und Sicherheit vermitteln konnten und dies hoffentlich noch lange zu tun vermögen.

„Jeder sucht den Versuch, sich auf der Suche nach Besserem zu versuchen. Meist wird die Suche zur Sucht und der Versuch zur Suche aus der Sucht eine Suche nach Flucht.“

Lebenslauf

Name	Baur
Vorname	Oliver
Geburtsdatum	19.02.1977
Geburtsort	Tübingen
seit 10/2007	Wissenschaftlicher Mitarbeiter der Universität Stuttgart am Geodätischen Institut der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie.
04/2007–09/2007	Wissenschaftlicher Mitarbeiter der Curtin University of Technology, Perth, Australien am Department of Spatial Sciences. Beschäftigt im Rahmen des australischen „Sea Level Project“.
05/2002–03/2007	Wissenschaftlicher Mitarbeiter der Universität Stuttgart am Geodätischen Institut der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie. Beschäftigt im Rahmen des BMBF Förderprogramms „Beobachtung des Systems Erde aus dem Weltraum“.
03/2005–05/2005	Forschungsaufenthalt an der TU Delft (Niederlande) im Rahmen des EU Förderprogramms HPC-Europa.
10/1997–04/2002	Studium an der Universität Stuttgart Fachrichtung Geodäsie und Geoinformatik mit den Schwerpunkten Physikalische Geodäsie und Satellitengeodäsie. Abschluss: Dipl.-Ing. Geodäsie und Geoinformatik Karl-Ramsayer-Preisträger 2003 des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik in Würdigung herausragender Studienleistungen. Geoforschungszentrum Potsdam Diplomarbeit mit dem Thema „Ozeangezeitenlösungen aus Bahnstörungen erdnaher Satelliten“.
1987–1996	Schulbildung Naturwissenschaftliches Gymnasium Hechingen Abschluss: Allgemeine Hochschulreife