



Erweiterung des Konvergenzbereichs bei nichtlinearen Ausgleichungsaufgaben

Jochen Hettwer und
Wilhelm Benning, Aachen

Das klassische GAUSS-NEWTON-Verfahren hat bei nichtlinearen Aufgabenstellungen mit guten Startwerten und kleinen Residuen seine Berechtigung. Sind diese Bedingungen jedoch nicht erfüllt, sollte in Erwägung gezogen werden, den Konvergenzbereich der Ausgleichung durch ein modifiziertes GAUSS-NEWTON-Verfahren zu vergrößern. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Verfahren zur Ausweitung des Konvergenzbereiches einen erhöhten Rechenaufwand erfordern. Es sollte daher eine Variante gewählt werden, die einerseits die nötigen Konvergenzeigenschaften besitzt, andererseits aber auch den Rechenaufwand in Grenzen hält.

1 Lineare und nichtlineare Ausgleichsaufgaben

In der Ausgleichsrechnung lassen sich lineare und nichtlineare Probleme voneinander unterscheiden. Das Modell der vermittelnden Beobachtungen, auf das die folgenden Ausführungen beschränkt werden sollen, lässt sich in der linearen Form folgendermaßen darstellen (KOCH 1997):

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{y} + \mathbf{e} \quad \text{mit } E(\mathbf{e}) = \mathbf{0} \\ \text{und } D(\mathbf{e}) = D(\mathbf{y}) = \sigma^2 \mathbf{P}^{-1} \quad (1)$$

Hierbei bezeichnet \mathbf{X} die Designmatrix, $\boldsymbol{\beta}$ den Vektor der unbekannt (festen) Parameter, \mathbf{y} den Beobachtungsvektor, \mathbf{e} den Residuenvektor, \mathbf{P} die Gewichtsmatrix und σ die Standardabweichung der Gewichtseinheit. E ist der Erwartungswertoperator, D der Dispersionsoperator, der die Varianz-Kovarianzmatrix liefert. Diese lineare Form, die auch als GAUSS-MARKOFF-Modell bezeichnet wird, ist i. a. direkt lösbar. Dazu wird das zugehörige Normalgleichungssystem aufgestellt:

$$\mathbf{X}^T \mathbf{P} \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^T \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (2)$$

Falls \mathbf{X} vollen Spaltenrang besitzt und \mathbf{P} positiv definit ist (zumindest die letztgenannte Forderung sollte in geodätischen Anwendungen immer erfüllt sein), lässt sich ein Schätzwertvektor $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ für die unbekannt Parameter mit minimaler Varianz als Lösung des Gleichungssystems (2) berechnen.

Es lässt sich darüber hinaus zeigen, dass die gewichtete Quadratsumme der Residuen

$$\Omega(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{e}^T \mathbf{P} \mathbf{e} \quad (3)$$

mit dem so bestimmten Schätzwertvektor $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ minimal wird (KOCH 1997). Ω ist dabei eine Funktion der Parameter $\boldsymbol{\beta}$, weil die Residuen \mathbf{e} über die Modellgleichung (1) funktional mit den Parametern verknüpft sind:

$$\mathbf{e}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y} \quad (4)$$

In der nichtlinearen Form stellt sich das Modell der vermittelnden Beobachtungen so dar:

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y} + \mathbf{e} \quad \text{mit } E(\mathbf{e}) = \mathbf{0} \\ \text{und } D(\mathbf{e}) = D(\mathbf{y}) = \sigma^2 \mathbf{P}^{-1} \quad (5)$$

Der einzige Unterschied zur linearen Form (1) besteht darin, dass die lineare Beziehung $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ durch eine beliebige vektorwertige Funktion $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})$ ersetzt worden ist. Die Residuen ergeben sich damit zu

$$\mathbf{e}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{y} \quad (6)$$

Für den Spezialfall $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ geht die nichtlineare Form (5) in die lineare Form (1) über.

Im Gegensatz zur linearen Form ist die nichtlineare Form nicht direkt lösbar. Man erhält Schätzwerte für die Parameter durch ein Iterationsverfahren, bei dem man, ausgehend von einer Näherungslösung $\boldsymbol{\beta}_0$, eine Folge weiterer Näherungslösungen $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \dots$ erzeugt, die nach Möglichkeit gegen eine Lösung des nichtlinearen Problems konvergieren soll. Dazu linearisiert man in jedem Iterationsschritt $k = 0, 1, \dots$ zunächst die nichtlineare Funktion $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})$ an der Stelle $\boldsymbol{\beta}_k$ durch eine TAYLOR-Reihe unter Verzicht auf die Terme höherer Ordnung:

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) \approx \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_k) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \right|_{\boldsymbol{\beta}_k} (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_k) \quad (7)$$

Setzt man die Beziehungen (7) und (5) gleich und führt die Bezeichnungen

$$\Delta \boldsymbol{\beta}_k := \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_k \quad (8)$$

$$\Delta \mathbf{y}_k := \mathbf{y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_k) = -\mathbf{e}(\boldsymbol{\beta}_k) \quad (9)$$

$$\mathbf{X}_k := \left. \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \right|_{\boldsymbol{\beta}_k} \quad (10)$$

ein, so erhält man mit dem Ausdruck

$$\mathbf{X}_k \Delta \boldsymbol{\beta}_k = \Delta \mathbf{y}_k + \mathbf{e}'_k \quad (11)$$

ein lineares Ausgleichungsproblem, wobei

$$\mathbf{e}'_k = \mathbf{X}_k \Delta \boldsymbol{\beta}_k - \Delta \mathbf{y}_k \quad (12)$$

der Residuenvektor im linearisierten Modell der Iteration k ist. Der Parametervektor $\Delta \boldsymbol{\beta}_k$ im linearisierten Modell (11) kann dann als Lösung des zugehörigen Normalgleichungssystems

$$\mathbf{X}_k^T \mathbf{P} \mathbf{X}_k \Delta \boldsymbol{\beta}_k = \mathbf{X}_k^T \mathbf{P} \Delta \mathbf{y}_k \quad (13)$$

berechnet werden. Mit diesem Parametervektor kann die nächste Näherungslösung des nichtlinearen Problems gebildet werden (vgl. (8)):

$$\beta_{k+1} = \beta_k + \Delta\beta_k \quad (14)$$

Falls die Folge der Näherungslösungen konvergiert und nach l Iterationen eine genügende Annäherung an den Konvergenzpunkt erfolgt ist, erhält man mit

$$\hat{\beta} = \beta_l \quad (15)$$

die Schätzwerte für die unbekannt Parameter des nichtlinearen Problems. Das beschriebene Verfahren wird in der Literatur häufig als GAUSS-NEWTON-Verfahren bezeichnet (vgl. SCHWETLICK 1979, SCHWETLICK und KRETZSCHMAR 1991, DEUFLHARD und HOHMANN 1993, BRONSTEIN et al. 1999).

Das GAUSS-NEWTON-Verfahren kann als Minimierungsverfahren betrachtet werden, weil die gewichtete Residuenquadratsumme (3) mit den Residuen aus (6) minimiert werden soll. In diesem Zusammenhang wird der Vektor $\Delta\beta_k$ auch als *Suchrichtung* bezeichnet, weil man sich im Parameterraum innerhalb einer Iteration von der Stelle β_k aus in der Richtung $\Delta\beta_k$ weiterbewegt, um durch diese Änderung die Residuenquadratsumme nach Möglichkeit zu reduzieren.

Ob eine Verringerung der Residuenquadratsumme durch die Verschiebung des Parametervektors an die Stelle $\beta_{k+1} = \beta_k + \Delta\beta_k$ erreicht wird, ist jedoch keinesfalls sicher: Die Suchrichtung wurde im linearisierten Modell (11) berechnet, das nur eine Annäherung an das nichtlineare Problem (5) an der Stelle β_k darstellt. Je weiter man sich von β_k entfernt, desto schlechter ist die Übereinstimmung des linearisierten Modells mit dem nichtlinearen Problem. Daraus folgt, dass es – gerade bei betragsmäßig großen Suchrichtungen $\Delta\beta_k$ – nicht zwangsläufig zu einer Verringerung der Residuenquadratsumme kommt. Es ist auch nicht garantiert, dass die Suchrichtung $\Delta\beta_k$ in jedem Fall berechnet werden kann. Möglicherweise kommt man in der Folge der Iterationen zu einer Näherungslösung β_k , mit der die Normalgleichungsmatrix $X_k^T P X_k$ aus Gl. (13) singulär wird oder zumindest eine sehr schlechte Kondition aufweist, sodass keine bzw. keine brauchbare Suchrichtung ermittelbar ist. Es stellt sich daher die Frage, unter welchen Bedingungen das GAUSS-NEWTON-Verfahren in der beschriebenen Form konvergent ist und was ggf. unternommen werden kann, um die Konvergenz des Verfahrens zu verbessern.

2 Konvergenzvoraussetzungen des GAUSS-NEWTON-Verfahrens

Bei DEUFLHARD und HOHMANN (1993) und SCHWETLICK (1979) finden sich Beweise für eine lokale Konvergenz des GAUSS-NEWTON-Verfahrens für den Fall gleich gewichteter und nicht korrelierter Beobachtungen (d. h. $P = I$). Die Konvergenzeigenschaft ist jedoch an bestimmte Voraussetzungen geknüpft, die hier kurz zusammengestellt werden sollen. Die Darstellung folgt da-

bei DEUFLHARD und HOHMANN (1993), weil dieser Beweis sehr einfach auf den allgemeinen Fall einer symmetrischen und positiv definiten Gewichtsmatrix P erweitert werden kann.

1. Betrachtet wird ein Gebiet $D \subset \mathbf{R}^u$, das konvex und offen sei. Die Funktion $f(\beta)$ aus (5) mit $f: D \rightarrow \mathbf{R}^n$, $n \geq u$, sei eine stetig differenzierbare Abbildung, deren Jacobimatrix $f'(\beta) = X(\beta)$ für alle $\beta \in D$ Vollrang u habe. Die Existenz einer Lösung β wird ebenfalls vorausgesetzt (sie kann gesondert bewiesen werden).

2. Es existiere eine Konstante $\omega > 0$, sodass

$$\|X(\beta)^+(X(\beta + s\mathbf{v}) - X(\beta))\mathbf{v}\| \leq s\omega\|\mathbf{v}\|^2 \quad (16)$$

gelte für alle $s \in [0, 1]$, $\beta \in D$ und $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^u$ mit $\beta + \mathbf{v} \in D$. X^+ sei dabei die gewichtete Pseudoinverse $X^+ := (X^T P X)^{-1} X^T P$. Die Forderung (16) kann als affin-invariante Lipschitz-Bedingung interpretiert werden.

3. Es existiere ein κ mit $0 \leq \kappa < 1$, sodass

$$\|X(\beta)^+e(\hat{\beta})\| \leq \kappa\|\beta - \hat{\beta}\| \quad (17)$$

für alle $\beta \in D$ erfüllt sei. Die linke Seite von (17) kann auch gemäß

$$\|X(\beta)^+e(\hat{\beta})\| \leq \|X(\beta)^+\| \|e(\hat{\beta})\| \quad (18)$$

nach oben abgeschätzt werden. Daraus wird sofort ersichtlich, dass (17) im Fall $e(\hat{\beta}) = \mathbf{0}$ immer erfüllt ist. Falls $|e(\hat{\beta})|$ (oder auch $|X(\hat{\beta})^+|$) dagegen sehr groß wird, besteht die Gefahr, dass (17) nicht mehr erfüllt werden kann. Insofern lässt sich aus (17) die Forderung nach einer möglichst kleinen Norm des Residuenvektors im Konvergenzpunkt ableiten.

4. Für die Wahl des Startwertes β_0 gelte die Einschränkung

$$\rho := \|\beta_0 - \hat{\beta}\| < \frac{2(1 - \kappa)}{\omega} \quad (19)$$

mit den oben eingeführten Konstanten κ und ω . Der Startwert β_0 darf also nicht beliebig weit vom Konvergenzpunkt $\hat{\beta}$ entfernt sein, sondern sollte möglichst nahe an $\hat{\beta}$ liegen.

Sind diese Voraussetzungen erfüllt, dann lässt sich zeigen, dass die vom GAUSS-NEWTON-Verfahren erzeugte Folge von Näherungslösungen in einer offenen Kugel um den Konvergenzpunkt $\hat{\beta}$ mit dem Radius ρ bleibt (d. h. $\|\beta_k - \hat{\beta}\| < \rho$ für $k > 0$) und gegen $\hat{\beta}$ konvergiert:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \beta_k = \hat{\beta} \quad (20)$$

3 Bewertung der Konvergenzvoraussetzungen

Probleme bei der Anwendung des GAUSS-NEWTON-Verfahrens treten dann auf, wenn die im vorigen Abschnitt genannten Voraussetzungen nicht erfüllt sind. Daher soll nun erörtert werden, welche der genannten Voraussetzungen leicht eingehalten werden können und bei welchen es – speziell in geodätischen Anwendungen der Ausgleichsrechnung – zu Schwierigkeiten kommen kann.

Die Forderung nach stetiger Differenzierbarkeit der Funktion $f(\beta)$ kann i. a. durch eine geeignete Parametrisierung des zu lösenden Problems sichergestellt werden. Die Vollrangforderung an X ist in den meisten Fällen unkritisch, weil Rangdefekte von X i. d. R. eine bereits vor der Ausgleichung erkennbare, direkte Entsprechung in der korrespondierenden Problemstellung besitzen (z. B. einen Datumsdefekt in einer Netzausgleichung). In diesem Fall kann der Vollrang von X durch eine geeignete Modifikation der Ausgleichungsaufgabe (z. B. durch eine ausreichende Datumsfestlegung) sichergestellt werden, oder es können alternativ auf der Nutzung von generalisierten Inversen basierende Verfahren angewendet werden (KOCH 1997). In einzelnen Fällen, in denen Rangdefekte nicht in der Problemstellung erkennbar sind oder nur bei bestimmten Parametervektoren β vorliegen, kann es jedoch in der Folge der Iterationen zu einer singulären Normalgleichungsmatrix kommen, sodass das Verfahren abgebrochen werden muss.

Die Lipschitz-Bedingung aus (16) sollte i. d. R. keine Probleme bereiten. Die Pseudoinverse X^+ auf der linken Seite kann durch den garantierten Vollrang von X immer gebildet werden, und die Konstante ω ist frei wählbar und kann an das spezielle Problem angepasst werden.

Kritisch ist die Forderung nach einer möglichst kleinen Norm des Residuenvektors zu bewerten. Ist (17) nicht erfüllt, kann keine Konvergenz erwartet werden. Mögliche Ursachen für das Nichterfüllen von (17) können unpräzise bzw. fehlerhafte Daten oder eine unzureichende mathematische Modellierung des funktionalen Zusammenhangs zwischen Beobachtungen und Parametern sein.

Die Forderung der Nähe des gewählten Startwerts β_0 vom Konvergenzpunkt $\hat{\beta}$ ist dann problematisch, wenn keine guten Näherungswerte berechenbar sind. Dies kann z. B. auftreten, wenn die Beobachtungsdaten so ungenau bzw. fehlerhaft sind, dass näherungsweise Berechnungen der Parameter aus verschiedenen Kombinationen von Beobachtungen zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen führen. Falls die Näherungswerte so schlecht sind, dass (19) nicht erfüllt ist, gibt es keine Garantie mehr für eine Konvergenz des Verfahrens. Passen die Beobachtungsdaten dagegen gut zum funktionalen Modell der Ausgleichung und werden die Näherungswerte aus dem modellierten funktionalen Zusammenhang abgeleitet, sollte die Einhaltung dieser Forderung kein Problem sein.

Zusammenfassend betrachtet liegen die Ursachen für Konvergenzprobleme bei nichtlinearen Ausgleichsaufgaben in der Verwendung schlechter Näherungswerte, der unzureichenden Modellierung des funktionalen Zusammenhangs zwischen Beobachtungen und Parametern und der Ungenauigkeit bzw. Fehlerhaftigkeit der Beobachtungen.

4 Verfahren zur Erweiterung des Konvergenzbereichs

Die numerische Mathematik stellt verschiedene Modifikationen des GAUSS-NEWTON-Verfahrens bereit, mit denen der Konvergenzbereich des Verfahrens erweitert werden kann (DEUFLHARD und HOHMANN 1993, SCHWETLICK 1979, SCHWETLICK und KRETZSCHMAR 1991). Zwei der grundlegenden Techniken werden im Folgenden vorgestellt.

Bei der *Dämpfung* (DEUFLHARD und HOHMANN 1993, SCHWETLICK 1979, SCHWETLICK und KRETZSCHMAR 1991) wird (14) durch die Iterationsvorschrift

$$\beta_{k+1} = \beta_k + \lambda_k \Delta\beta_k \quad \text{mit } 0 < \lambda_k \leq 1 \quad (21)$$

ersetzt. Es wird also ggf. nicht die komplette Suchrichtung $\Delta\beta_k$ zur Berechnung der nächsten Näherungslösung β_{k+1} verwendet, sondern nur ein bestimmter Anteil, der durch den Dämpfungsfaktor λ_k festgelegt wird. Der Dämpfungsfaktor sollte für jede Iteration nach einer speziellen Dämpfungsstrategie neu bestimmt werden. Eine einfache Strategie wäre z. B., in jeder Iteration mit $\lambda_k = 1$ zu beginnen und den Dämpfungsfaktor solange zu halbieren, bis mit dem Parametervektor β_{k+1} aus (21) eine Verringerung der Residuenquadratsumme gegenüber dem letzten Iterationsschritt erzielt wird. Auf diese Weise werden Konvergenzprobleme, die auf dem Unterschied zwischen dem nichtlinearen und dem im Punkt β_k linearisierten Problem beruhen, wirksam unterdrückt. Da die Übereinstimmung zwischen beiden Modellen umso besser ist, je weniger man sich vom Punkt β_k entfernt, sollte es möglich sein, mit einer geeignet verkürzten Suchrichtung zu einer Verringerung der Residuenquadratsumme zu kommen. Dies setzt voraus, dass die Suchrichtung $\Delta\beta_k$ numerisch stabil berechenbar ist und im Punkt β_k eine Abstiegsrichtung darstellt, d. h. dass sich die Residuenquadratsumme zunächst einmal verringert, wenn die Parameter von β_k aus in Suchrichtung verschoben werden. Ist die Normalgleichungsmatrix jedoch singulär oder wird aufgrund einer sehr schlechten Kondition der Normalgleichungsmatrix eine Suchrichtung bestimmt, die keine Abstiegsrichtung ist, hilft dieses Verfahren nicht weiter.

Einen Ausweg bietet in dieser Situation das LEVENBERG-MARQUARDT-Verfahren (DEUFLHARD und HOHMANN 1993), das auch als *Trust-Region-Verfahren* bezeichnet wird (SCHWETLICK und KRETZSCHMAR 1991). Beim klassischen GAUSS-NEWTON-Verfahren wird im linearisierten Modell einer Iteration die gewichtete Quadratsumme der linearisierten Residuen minimiert (mit e'_k aus (12)):

$$\Omega'_k(\Delta\beta_k) = e_k'^T P e'_k \quad (22)$$

Beim LEVENBERG-MARQUARDT-Verfahren wird zusätzlich in jeder Iteration eine Obergrenze für die euklidische Norm der Suchrichtung – ein „Trust-Region“-Radius – vorgegeben: $\|\Delta\beta_k\| \leq \delta_k$. Fasst man beide Bedingungen mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikators $\alpha_k \leq 0$ in einem Ausdruck zusammen, ergibt sich

$$e_k'^T P e_k' + \alpha_k \|\Delta\beta_k\|^2 \rightarrow \min \quad (23)$$

Das zugehörige $\Delta\beta_k$ kann aus folgendem Gleichungssystem ermittelt werden:

$$(X_k^T P X_k + \alpha_k I) \Delta\beta_k = X_k^T P \Delta y_k \quad (24)$$

Der Lagrange-Multiplikator α_k regularisiert im Fall $\alpha_k > 0$ die Normalgleichungsmatrix. Im Fall $\alpha_k = 0$ ergeben sich aus (24) die Normalgleichungen des klassischen GAUSS-NEWTON-Verfahrens (13).

Die Einführung einer Trust-Region ermöglicht auch dann eine sinnvolle Ermittlung der Suchrichtung, wenn Spalten der Designmatrix linear abhängig oder fast linear abhängig sind. Im Fall der linearen Abhängigkeit ermöglicht die Regularisierung mit dem Parameter α_k überhaupt erst die Berechnung einer Suchrichtung, wobei durch die Bedingung $\|\Delta\beta_k\| \leq \delta_k$ die Norm der Suchrichtung nach oben begrenzt wird. Im Fall fast linear abhängiger Spalten der Designmatrix kann zwar noch eine klassische GAUSS-NEWTON-Suchrichtung ermittelt werden, die Berechnung ist jedoch instabil und liefert eine Suchrichtung mit sehr großer Norm, die zur Verringerung der Residuenquadratsumme nicht mehr geeignet ist (SCHWETLICK und KRETZSCHMAR 1991). Auch in diesem Fall erscheint daher eine Regularisierung zur Begrenzung der Suchrichtung angebracht.

Zur praktischen Durchführung des Verfahrens kann in einem Iterationsschritt k zunächst versucht werden, die klassische GAUSS-NEWTON-Suchrichtung zu bestimmen (d.h. $\alpha_k = 0$). Falls sie berechenbar ist und die Nebenbedingung $\|\Delta\beta_k\| \leq \delta_k$ erfüllt ist, wird sie als potenzielle Suchrichtung für den Schritt k verwendet.

Andernfalls wird die Normalgleichungsmatrix mit einem $\alpha_k > 0$ regularisiert, wobei das α_k aus der Bedingung $\|\Delta\beta_k\| = \delta_k$ bestimmt wird. SCHWETLICK und KRETZSCHMAR (1991) schlagen dazu die Anwendung des NEWTON-Verfahrens zur Nullstellenbestimmung auf die Gleichung

$$\frac{1}{\|\Delta\beta_k(\alpha)\|} - \frac{1}{\delta_k} = 0 \quad (25)$$

vor. Dies ist ein sehr aufwändiger Prozess, weil für jeden Iterationsschritt des NEWTON-Verfahrens eine neue Suchrichtung $\Delta\beta_k(\alpha)$ bestimmt werden muss.

Aus diesen Alternativen ergibt sich eine potenzielle Suchrichtung, für die entweder $\alpha_k = 0$ und $\|\Delta\beta_k\| \leq \delta_k$ oder $\alpha_k > 0$ und $\|\Delta\beta_k\| = \delta_k$ gilt. Führt diese Suchrichtung zu einer ausreichenden Verringerung der Residuenquadratsumme, wird sie gemäß (14) zur Berechnung der nächsten Näherungslösung verwendet. Andernfalls wird der Trust-Region-Radius δ_k verkleinert und die Berechnung der Suchrichtung damit wiederholt.

Das LEVENBERG-MARQUARDT-Verfahren führt auch bei Rangdefekten oder sehr schlecht konditionierten Problemen zur Konvergenz. Es erfordert jedoch einen hohen Rechenaufwand. Zusätzliche Nachteile des Verfahrens sind darin zu sehen, dass es häufig nur gegen Sattelpunkte und nicht gegen Minima der Residuenquadratsumme konvergiert und außerdem die Ergebnisse fehl-

interpretiert werden können, weil die Eindeutigkeit einer gefundenen Lösung durch die vorgenommenen Regularisierungen nicht geklärt ist (DEUFLHARD und HOHMANN 1993). Daher sollte das LEVENBERG-MARQUARDT-Verfahren schlecht konditionierten Problemen vorbehalten bleiben.

5 Praktische Resultate

Am Beispiel der Homogenisierung digitaler Massendaten mit dem Programm KATHOM (HETTWER und BENNING 2000) soll der sinnvolle Einsatz von Maßnahmen zur Erweiterung des Konvergenzbereichs des GAUSS-NEWTON-Verfahrens dargestellt werden. Das am Geodätischen Institut der RWTH Aachen entwickelte System fasst die bei der Homogenisierung anfallenden Arbeitsschritte Transformation, Restklaffenverteilung und Realisierung von Bedingungen in einer Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen zusammen. Aus numerischer Sicht besteht das Problem bei der Homogenisierung darin, dass zum Teil sehr unpräzise Daten verarbeitet werden müssen – Testdatensätze weisen z. B. Restklaffen in den Sollpunkten von 20 m und mehr auf. Somit ergeben sich verhältnismäßig große Residuen, was nach den Abschnitten 2 und 3 zu Konvergenzproblemen beim klassischen GAUSS-NEWTON-Verfahren führen kann. Ein Beispiel für Nichtkonvergenz zeigen die Abb. 1 und 2. Hier mündet die Schätzung für die betrachtete Koordinate in einen Zweierzyklus: Der Schätzwert konvergiert nicht gegen einen festen Wert, sondern oszilliert zwischen zwei gut 10 m voneinander entfernten Positionen (Abb. 1). Berechnet man über die in der Abbildung aufgeführten 120 Iterationen hinaus weitere Iterationen, ändert sich die Situation nur wenig: Auch nach 1000 Iterationen dauert die Oszillation noch an. Abb. 2 zeigt die Entwicklung der Residuenquadratsumme, welche ebenfalls oszilliert (auch wenn sie im betrachteten Bereich einen Abwärtstrend aufweist).

Vom praktischen Standpunkt aus sind die Ergebnisse dieses Schätzungsprozesses unbrauchbar: Da sich die Koordinate in jeder Iteration um 10 m ändert, kann der bei einem Abbruch des Verfahrens nach einer beliebigen Iteration erhaltene Wert schwerlich als Endergebnis betrachtet werden. Es stellt sich auch die Frage, ob die Residuenquadratsumme bereits in der Nähe des Minimums liegt oder ob noch weitere Verbesserungen möglich sind.

Die Neigung des klassischen GAUSS-NEWTON-Verfahrens zu Oszillationen wird bereits bei BRAESS (1997) erwähnt. In der dort beschriebenen photogrammetrischen Anwendung konnte das gedämpfte GAUSS-NEWTON-Verfahren zur Unterdrückung von Oszillationen mit Erfolg angewendet werden. Die von BRAESS eingesetzte Dämpfungsstrategie wird auch im Programm KATHOM verwendet. Sie entspricht im Wesentlichen dem in Abschnitt 4 skizzierten Verfahren: In jedem Iterationsschritt k wird die Residuenquadratsumme unter Berücksichtigung der ermittelten Suchrichtung neu berechnet. Falls sie größer ausfällt als diejenige des Schritt-

tes $k - 1$, wird die Suchrichtung halbiert, und die Residuenquadratsumme wird erneut berechnet. Die Halbierungen werden so lange fortgesetzt, bis entweder eine Suchrichtung zu einer Verringerung der Residuenquadratsumme führt oder eine maximal zulässige Anzahl von Halbierungen überschritten wird (KATHOM arbeitet mit maximal 8 Halbierungen). Im Fall einer Überschreitung wird der Algorithmus unter der Annahme beendet, dass die Residuenquadratsumme nicht weiter verringert werden kann.

Die Resultate der Anwendung der Dämpfung auf das gegebene Beispiel finden sich ebenfalls in den Abb. 1 und 2: Der Schätzwert für die betrachtete Koordinate oszilliert nicht mehr, sondern konvergiert gegen einen festen Wert. Auch die Oszillationen der Residuenquadratsumme werden wirksam unterdrückt. Aus Abb. 2 ist darüber hinaus ersichtlich, dass durch die Dämpfung im Vergleich zur ungedämpften Variante die Residuenquadratsumme verringert werden konnte. Dies zeigt, dass das ungedämpfte Verfahren in diesem Fall nicht zur minimalen Residuenquadratsumme führt. Es sei noch hinzugefügt, dass auch die gedämpfte Variante 122 Iterationen benötigt, um eine Konvergenz mit maximaler Koordinatenänderung kleiner 1 cm zu erreichen.

Versuche mit der ungedämpften und der gedämpften Variante des GAUSS-NEWTON-Verfahrens zeigten außerdem, dass sich der numerische Mehraufwand der Dämpfung, der in der wiederholten Berechnung der Residuenquadratsumme für unterschiedliche Suchrichtungen innerhalb einer Iteration liegt, in vertretbaren Grenzen hält. Es liegen auch Datenbeispiele aus der Praxis vor, in denen die Dämpfung zu einer Verringerung der Zahl der nötigen Iterationen führt, sodass der Rechenzeit-Mehraufwand für die Dämpfung bei gleichzeitigem Wegfall einiger Ausgleichs-Iterationen völlig unerheblich ist.

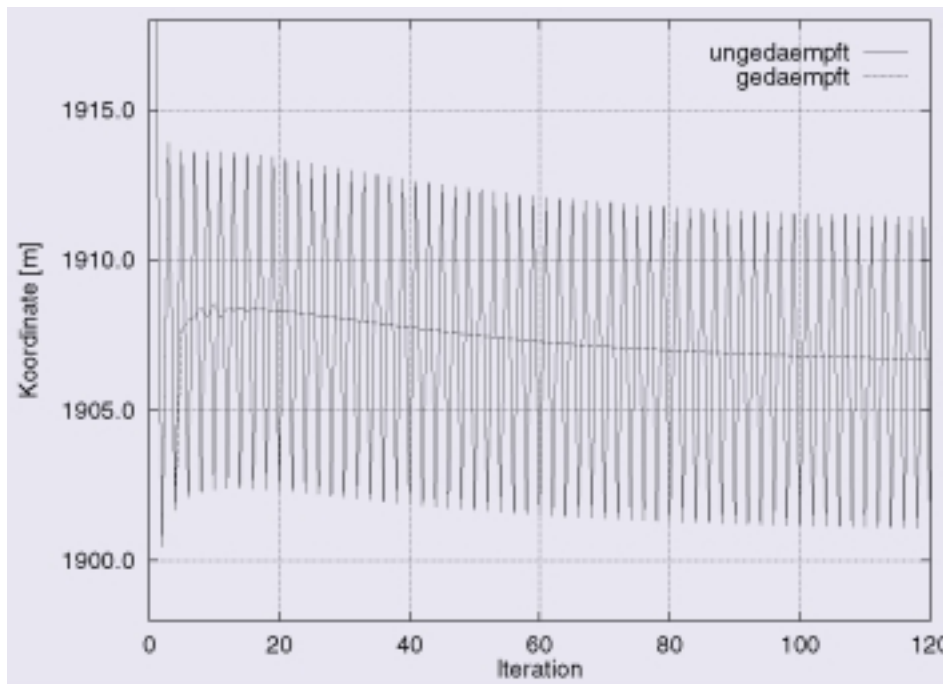


Abb. 1: Veränderung einer ausgewählten Koordinate im Verlauf der Iterationen beim ungedämpften und gedämpften GAUSS-NEWTON-Verfahren.

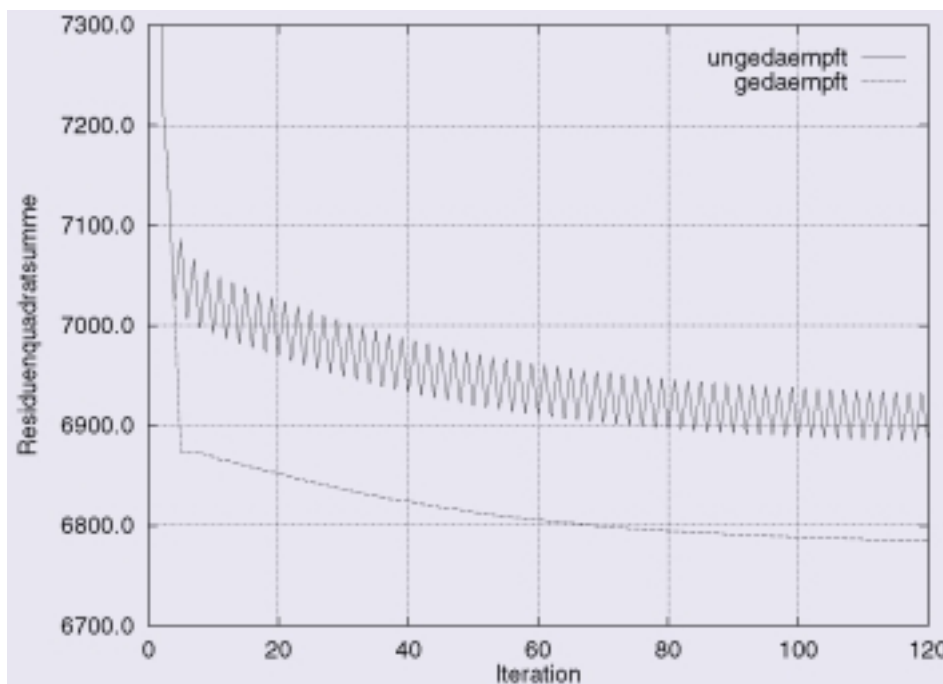


Abb. 2: Veränderung der Residuenquadratsumme im Verlauf der Iterationen beim ungedämpften und gedämpften GAUSS-NEWTON-Verfahren.

6 Schlussbetrachtung

Das klassische GAUSS-NEWTON-Verfahren hat bei nichtlinearen Aufgabenstellungen mit guten Startwerten und kleinen Residuen seine Berechtigung. Sind diese Bedingungen jedoch nicht erfüllt, sollte in Erwägung gezogen werden, den Konvergenzbereich der Ausgleichung durch ein modifiziertes GAUSS-NEWTON-Verfahren zu vergrößern. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Verfahren zur Ausweitung des Konvergenzbereiches einen erhöhten

Rechenaufwand erfordern. Es sollte daher eine Variante gewählt werden, die einerseits die nötigen Konvergenzeigenschaften besitzt, andererseits aber auch den Rechenaufwand in Grenzen hält. Am Beispiel des Homogenisierungsprogramms KATHOM lässt sich zeigen, dass bereits mit einem relativ einfachen Dämpfungsansatz der Konvergenzbereich der Ausgleichung erheblich vergrößert werden kann.

Literatur

- BRAESS, M.: Strukturbasierte Merkmalszuordnung in kurzen stereoskopischen Videosequenzen. Veröffentlichung des Geodätischen Instituts der RWTH Aachen Nr. 54, 1997.
- BRONSTEIN, I. N., SEMENDJAJEW, K. A., MUSIOL, G. und H. MÜHLIG: Taschenbuch der Mathematik. 4. Aufl., Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main – Thun, 1999.
- DEUFLHARD, P. und A. HOHMANN: Numerische Mathematik. Eine algorithmisch orientierte Einführung. Bd. 1, 2. Aufl., Walter de Gruyter, Berlin – New York, 1993.
- HETTWER, J. und W. BENNING: Nachbarschaftstreue Koordinatenberechnung in der Kartenhomogenisierung. Allgemeine Vermessungs-Nachrichten 107: 194–197, 2000.
- KOCH, K. R.: Parameterschätzung und Hypothesentests in linearen Modellen. 3. Aufl., Ferd. Dümmlers Verlag, Bonn, 1997.
- SCHWETLICK, H.: Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen. R. Oldenbourg Verlag, München – Wien, 1979.
- SCHWETLICK, H. und H. KRETZSCHMAR: Numerische Verfahren für Naturwissenschaftler und Ingenieure. Fachbuchverlag Leipzig, 1991.

Anschrift der Verfasser:

Dipl.-Ing. JOCHEN HETTWER und Univ.-Prof. Dr.-Ing. WILHELM BENNING, Geodätisches Institut der RWTH Aachen, Templergraben 55, 52056 Aachen.

Zusammenfassung

Bei der Lösung nichtlinearer Ausgleichsaufgaben mit dem klassischen GAUSS-NEWTON-Verfahren treten Fälle auf, in denen das Verfahren nicht konvergiert. Die Konvergenzvoraussetzungen werden zusammengestellt, und es werden global konvergente Modifikationen des Verfahrens angegeben. Besonderes Augenmerk gilt dabei der Dämpfung, deren Wirksamkeit anhand eines Beispiels demonstriert wird.

Summary

If the classical GAUSS-NEWTON method is used in non-linear least-squares estimation, it does not converge in every case. The pre-conditions of convergence are put together, and globally convergent modifications of the method are presented. Special attention is given to the damping. The effectiveness of this modification is demonstrated in an example.

Immobilienmarkt im Rückwärtsgang

Präsentation auf Karten, in Berichten, auf CD-ROM und im Internet

Der Umsatz auf dem Immobilienmarkt in Niedersachsen hat im vergangenen Jahr mit -17% einen deutlichen Rückgang erfahren, die Preise für Baugrundstücke sind leicht gestiegen und die für Gebäude sogar gefallen. Das weist der Landesgrundstücksmarktbericht 2000 für das Land Niedersachsen aus, der vom Oberen Gutachterausschuss für Grundstücksmarktberichten in Niedersachsen zum zweiten Male herausgegeben worden ist. Er basiert auf der Auswertung sämtlicher in Niedersachsen im Jahre 2000 getätigten Grundstückskaufverträge. Insgesamt sind es rund 100 000; im Jahre 1999 waren es noch 120 000. Der Geldumsatz sank in der gleichen Zeit von 28 auf 22 Milliarden DM, der Flächenumsatz von 460 auf 400 km².

Die Preise für **Wohnbauland** sind in Regionen, in denen genügend Bauland zur Verfügung steht, gesunken oder konstant geblieben. In Gemeinden mit großer Nachfrage und knappem Angebot sind diese gestiegen, im Landesdurchschnitt ist ein Anstieg von 2 % zu verzeichnen.

Bei **Wohnhäusern** sind die Preise im Jahre 2000 – nach deutlichen Preissteigerungen in den Vorjahren – merklich gefallen, erklärbar mit einem ausreichenden Angebot.

So kosteten zum Beispiel **Einfamilienhäuser** im Landkreis Lüchow-Dannenberg im Durchschnitt 210 000 DM, in der Landeshauptstadt Hannover 505 000 DM, im Landesdurchschnitt 293 000 DM. Bei Reihenhäusern und Doppelhaushälften liegt der Durchschnittswert im Lande bei 280 000 DM, bei Zweifamilienhäusern bei 325 000 DM.

Ähnlich verhält es sich mit den Preisen für **Eigentumswohnungen**, die Durchschnittswerte sind allgemein gefallen und schwanken bei Neubauten zwischen 2600 DM/m² Wohnfläche im Landkreis Cloppenburg und 4400 DM/m² Wohnfläche in der Landeshauptstadt Hannover. Auch hier zeigt sich eine Sättigung des Marktes.

Werte und Umsätze für Niedersachsen sind in dem Landesgrundstücksmarktbericht 2000 auf 77 Seiten im Überblick anschaulich in Farbe dargestellt; er ist für 40 DM bei der Geschäftsstelle des Oberen Gutachterausschusses und bei jedem Katasteramt im Lande erhältlich. Einsehbar ist er auch im Internet unter

<http://www.gutachterausschuesse-ni.de>.

Wer an detaillierteren Immobilienwerten auf lokaler Ebene interessiert ist, dem seien die Grundstücksmarktberichte für den Landkreis bzw. die kreisfreie Stadt, die von den örtlichen Gutachterausschüssen für Grundstückswerte jährlich herausgegeben werden, empfohlen.

Bei der Frage nach durchschnittlichen Bodenwerten helfen darüber hinaus die ebenfalls jährlich ermittelten Bodenrichtwerte, die bei den Katasterämtern einsehbar und seit März dieses Jahres elegant im Internet (Adresse wie oben) abrufbar sind. Außerdem stehen sie auf CD-ROM für die Regierungsbezirke Braunschweig, Hannover, Lüneburg und Weser-Ems zur Verfügung.

Niedersachsen steht mit diesem kundenorientierten Digitalservice in der Bundesrepublik ganz vorn. Banken, Immobilienmakler und Kommunen wissen dies zu schätzen.