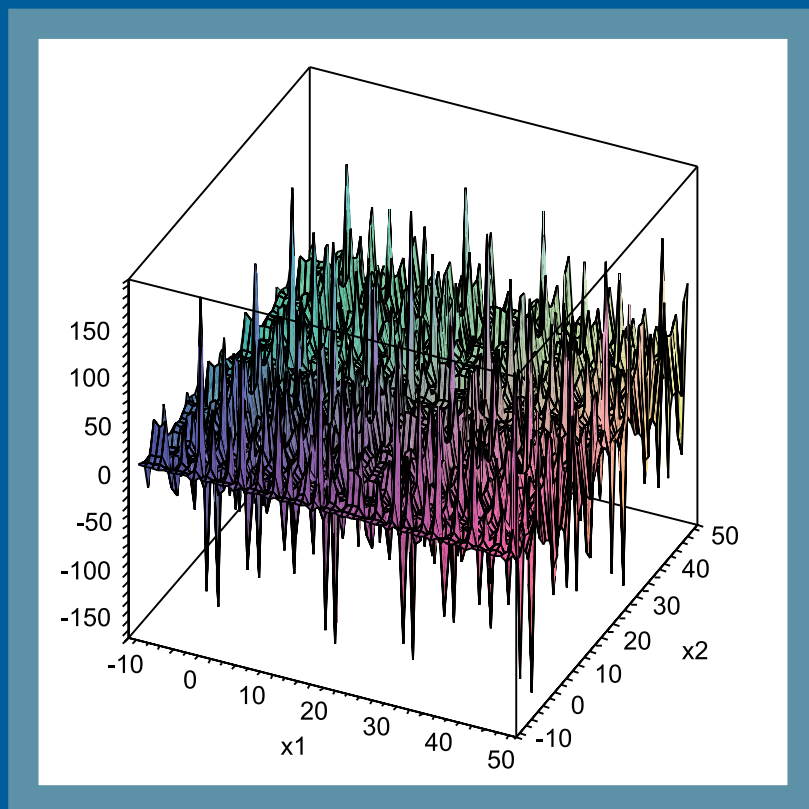


Marco Schnurr

Steigungen höherer Ordnung zur verifizierten globalen Optimierung

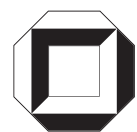


Marco Schnurr

Steigungen höherer Ordnung zur verifizierten globalen Optimierung

Steigungen höherer Ordnung zur verifizierten globalen Optimierung

von
Marco Schnurr



universitätsverlag karlsruhe

Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)

Fakultät für Mathematik, Tag der mündlichen Prüfung: 16.05.2007

Referenten: Prof. Dr. Götz Alefeld, Prof. Dr. Dietmar Ratz

Impressum

Universitätsverlag Karlsruhe
c/o Universitätsbibliothek
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe
www.uvka.de



Dieses Werk ist unter folgender Creative Commons-Lizenz
lizenziiert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.0/de/>

Universitätsverlag Karlsruhe 2007
Print on Demand

ISBN: 978-3-86644-192-7

Steigungen höherer Ordnung zur verifizierten globalen Optimierung

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN

von der Fakultät für Mathematik der
Universität Karlsruhe (TH) genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Math. Marco Schnurr
aus Oberkirch

Tag der mündlichen Prüfung:

16. Mai 2007

Referent:

Prof. Dr. Götz Alefeld

Korreferent:

Prof. Dr. Dietmar Ratz

Vorwort

Diese Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, Lehrstuhl I, der Universität Karlsruhe (TH). Ich möchte mich an dieser Stelle bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Götz Alefeld für die Betreuung der Arbeit und seine wertvollen Ratschläge und Anregungen. Seine immerwährende Unterstützung bildete die Grundlage für die Entstehung dieser Arbeit. Für die freundliche Übernahme des Korreferats danke ich Prof. Dr. Dietmar Ratz, dessen Hinweise zu wichtigen Ergänzungen von Inhalt und Darstellung der Arbeit geführt haben.

Die Herren Dr. Markus Neher, Dr. Uwe Schäfer und Dipl.-Ing. (BA) Roland Schnurr haben Teile des Manuskripts Korrektur gelesen, wofür ich mich herzlich bedanke.

Meinen Kollegen am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik danke ich für ihre ständige Hilfsbereitschaft und die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Schließlich bedanke ich mich bei meinen Eltern und meinen Freunden für ihre Unterstützung auf meinem Lebensweg.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Grundlagen	5
1.1 Mittelwertsätze	5
1.2 Intervallrechnung	6
1.2.1 Reelle Intervallrechnung	6
1.2.2 Abstand und Metrik	8
1.2.3 Intervallvektoren und Intervallmatrizen	8
1.2.4 Wertebereich und intervallmäßige Auswertung reeller Funktionen	9
1.3 Steigungen	10
1.3.1 Interpolation und Steigungen	11
1.3.2 Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen für stetige Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$	13
1.3.3 Steigungen von Funktionen mehrerer Variablen	22
1.3.4 Anwendungen	28
2 Automatische Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung für differenzierbare Funktionen einer Variablen	31
2.1 Automatische Differentiation und automatische Berechnung von Intervallsteigungen	32
2.2 Automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung	36
2.2.1 Steigungstupel zweiter Ordnung	36
2.2.2 Operationen für Steigungstupel zweiter Ordnung	37
2.2.3 Steigungen für Standardfunktionen	44
2.3 Automatische Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung	48

3	Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für nichtdifferenzierbare Funktionen einer Variablen	51
3.1	Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung . . .	52
3.1.1	Steigungstupel zweiter Ordnung	52
3.1.2	Operationen für Steigungstupel zweiter Ordnung	54
3.1.3	Zweimal stetig differenzierbare Standardfunktionen	61
3.1.4	Nichtdifferenzierbare stetige Standardfunktionen	77
3.1.5	Die If-Then-Else-Funktion	84
3.2	Implementierung und Beispiele	97
3.2.1	Implementierung	97
3.2.2	Wertebereichseinschließung mit Hilfe von Steigungstupeln zweiter Ordnung	97
3.2.3	Beispiele	101
4	Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für Funktionen mehrerer Variablen	105
4.1	Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung . . .	105
4.2	Komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung	109
4.3	Beispiele	111
5	Anwendung in der globalen Optimierung	115
5.1	Grundlagen der globalen Optimierung	115
5.1.1	Grundlegender Algorithmus	116
5.1.2	Listenverwaltung	117
5.1.3	Tests zur Beschleunigung	117
5.2	”Pruning”-Schritte für Funktionen einer Variablen	118
5.2.1	Auf der Mittelwertform basierender ”Pruning”-Schritt	118
5.2.2	”Pruning”-Schritt für stetig differenzierbare Funktionen	120
5.2.3	”Pruning”-Schritt für nichtdifferenzierbare Funktionen	120
5.2.4	Ein ”Pruning”-Schritt zweiter Ordnung	128
5.2.5	Algorithmus	141
5.2.6	Beispiele	144
5.3	Anwendung auf Funktionen mehrerer Variablen	145

5.3.1	Zurückführung auf Funktionen einer Variablen	146
5.3.2	Algorithmus	146
5.3.3	Beispiele	148
	Zusammenfassung und Ausblick	167
	Literaturverzeichnis	169

Einleitung

Viele technische, naturwissenschaftliche und mathematische Fragestellungen führen auf das Problem, das Minimum bzw. das Maximum sowie die zugehörigen Extremalstellen einer Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ zu bestimmen. Man spricht in diesem Fall von einem globalen Optimierungsproblem. Im Folgenden seien jeweils ohne Beschränkung der Allgemeinheit das Minimum und die Minimalstellen gesucht; die Maximierung von f ist äquivalent zur Minimierung von $-f$.

Viele klassische Algorithmen liefern lokale Minimalstellen von f . Um damit das globale Minimum zu bestimmen, müssen alle lokalen Minimalstellen bestimmt und deren Funktionswerte verglichen werden. Da es sehr viele lokale Minimalstellen geben kann, ist dies im Allgemeinen aufwändig bzw. kaum möglich. Ferner kann es bei der Nutzung eines Rechners mit Gleitkomma-Arithmetik passieren, dass infolge von Rundungsfehlern eine lokale Minimalstelle fälschlicherweise als globale Minimalstelle ausgewiesen wird, insbesondere wenn es viele lokale Minimalstellen gibt, deren Funktionswerte wenig vom globalen Minimum abweichen. Insofern ist ein globales Optimierungsproblem deutlich schwieriger zu lösen als ein lokales Optimierungsproblem.

Zur verifizierten globalen Optimierung werden häufig Methoden auf Grundlage der Intervallrechnung verwendet. Die Intervallrechnung ist ein Hilfsmittel, um Berechnungen für alle Elemente eines Intervalls gleichzeitig durchzuführen. Ferner ermöglicht es die Intervallrechnung, Rundungsfehler, die durch die Gleitkomma-Arithmetik auf einem Rechner entstehen, zu berücksichtigen. Üblicherweise handelt es sich bei den in der globalen Optimierung eingesetzten Intervallmethoden um sogenannte "Branch-and-Bound"-Verfahren, die auf Arbeiten von Hansen [14, 15], Ichida/Fujii [18] und Skelboe [47] zurückgehen und nach folgendem Prinzip aufgebaut sind:

Betrachtet wird eine Liste von Intervallen, die möglicherweise Minimalstellen von f enthalten. Aus der Liste wird ein bestimmtes Intervall entnommen. Auf dieses Intervall werden verschiedene Tests angewendet. Ergibt einer der Tests, dass das ausgewählte Intervall keine Minimalstelle enthält, so wird es gelöscht. Andernfalls wird das Intervall, z. B. durch Bisektion, in Teilintervalle zerlegt, die wieder in die Liste eingefügt werden. Der Algorithmus endet, wenn die Liste nur noch aus einem Intervall (oder mehreren) besteht, das die globale Minimalstelle hinreichend genau einschließt. Durch intervallarithmetische Methoden wird gewährleistet, dass im Al-

gorithmus keine Minimalstellen "verloren" gehen, d. h. dass alle Minimalstellen von f in einem Intervall aus der Liste enthalten sind.

Die Laufzeit eines solchen Branch-and-Bound-Algorithmus hängt wesentlich davon ab, welche der oben erwähnten Tests zur Beschleunigung durchgeführt werden. Für differenzierbare Funktionen werden häufig Tests genutzt, die Informationen über die erste oder zweite Ableitung von f verwenden, beispielsweise der "Monotonietest" (siehe [16]). Ein wesentlicher Aspekt ist dabei die Art und Weise, wie die benötigten Einschließungen der Ableitung auf einem Intervall bzw. Intervallvektor gewonnen werden. Diese werden üblicherweise mit automatischer Differentiation [11, 35] bestimmt. Diese Technik erlaubt es, Ableitungswerte bzw. deren Einschließungen simultan zur Auswertung der Funktion f zu berechnen, ohne dass eine explizite Formel für die Ableitung f' benötigt wird.

Für nichtdifferenzierbare Funktionen sind solche Aussagen, die mit Hilfe von Ableitungen getroffen werden, nicht mehr möglich. Umso wichtiger ist es daher, auch für nichtdifferenzierbare Funktionen Tests zur Beschleunigung des Algorithmus zur Verfügung zu haben. Ratz [38] benutzt zur verifizierten globalen Optimierung Steigungstupel erster Ordnung (siehe Definition 2.1.3). Diese werden, zurückgehend auf Krawczyk und Neumaier [22], durch automatische Berechnung mit einer der automatischen Differentiation ähnlichen Technik gewonnen. Insbesondere wird dazu keine explizite Formel einer Steigungsfunktion benötigt. Mit Hilfe der Steigungstupel erster Ordnung führt Ratz einen "Pruning"-Schritt (engl.: to prune - abschneiden) durch. In diesem "Pruning"-Schritt wird vom betrachteten Intervall bzw. Intervallvektor ein Stück abgeschnitten, für das nachgewiesen wurde, dass es keine globale Minimalstelle enthalten kann. Ferner liefern die Steigungstupel erster Ordnung im Allgemeinen genauere Wertebereichseinschließungen der Funktion f als die sogenannte "Mittelwertform" (siehe [1]), die eine Einschließung der Ableitung verwendet.

In dieser Arbeit verallgemeinern wir das Vorgehen aus [38]. Dazu zeigen wir, wie für nichtdifferenzierbare Funktionen unter gewissen Voraussetzungen eine automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung durchführbar ist. Mit diesen Steigungstupeln erhalten wir eine Wertebereichseinschließung von f auf einem Intervall $[x]$, die wir zur Durchführung eines "Pruning"-Schritts zweiter Ordnung in einem Algorithmus zur verifizierten globalen Optimierung verwenden. Die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung wurde bereits von Shen/Wolfe [46] und Kolev [21] behandelt. Die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden verallgemeinern und erweitern das Vorgehen dieser Arbeiten. Im Folgenden sind diese Verallgemeinerungen sowie der Aufbau dieser Arbeit kurz beschrieben.

Im ersten Kapitel gehen wir auf die benötigten Grundlagen aus der Analysis, der Numerik und der Intervallrechnung ein. Wir definieren Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen erster und höherer Ordnung und untersuchen deren Eigenschaften.

Das zweite Kapitel beschreibt, wie für eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung auf einem Intervall $[x]$ bezüglich der Punkte $x_1 \in [x]$ und $x_0 \in [x]$ durchgeführt

werden kann. Dabei dürfen x_1 und x_0 sowohl gleich als auch verschieden sein. In den Arbeiten von Shen/Wolfe und Kolev wurde hingegen nur der Fall $x_1 = x_0$ behandelt. Ferner gehen wir darauf ein, wie für genügend oft differenzierbare Funktionen Intervallsteigungen höherer Ordnung berechnet werden können.

Im dritten Kapitel betrachten wir die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für den Fall $x_1 = x_0$. Während in [21] und [46] die Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ als zweimal stetig differenzierbar vorausgesetzt wurde, zeigen wir in diesem Kapitel, wie die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung unter gewissen Voraussetzungen auch für nichtdifferenzierbare Funktionen durchgeführt werden kann. Ein Steigungstupel zweiter Ordnung liefert uns eine Einschließung des Wertebereichs von f auf dem Intervall $[x]$. In Abschnitt 3.2.3 vergleichen wir diese Einschließung mit Wertebereichseinschließungen, die mit Hilfe eines Steigungstupels erster Ordnung oder mit Hilfe von Einschließungen der ersten und zweiten Ableitung von f gewonnen werden. Neben dieser Verallgemeinerung von [21] und [46] wird in Abschnitt 3.1.3 gezeigt, wie sich die Eigenschaften einiger abschnittsweise konvexer bzw. konkaver Funktionen wie z. B. $\sinh(x)$ ausnutzen lassen. Diese Formeln verbessern die in [21] und [46] erhaltenen Einschließungen und verallgemeinern im Fall von automatischer Berechnung von Steigungstupeln erster Ordnung Formeln aus [38]. Ferner zeigen wir, wie die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für stetige Funktionen, die mit Hilfe einer if-then-else-Vorschrift gegeben sind, durchgeführt werden kann, und korrigieren dabei eine bisher in der Literatur angegebene Formel.

Im vierten Kapitel zeigen wir, wie die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung auf Funktionen mehrerer Variablen übertragen werden kann.

In Kapitel 5 gehen wir zunächst auf die Grundlagen von Branch-and-Bound-Verfahren in der verifizierten globalen Optimierung ein. Wir betrachten einen Algorithmus zur verifizierten globalen Optimierung einer nichtdifferenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und verwenden dabei Steigungstupel zweiter Ordnung, um einen "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung durchzuführen. Anschließend übertragen wir den Algorithmus auf Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Mit einer Reihe von Beispielen vergleichen wir den neuen Algorithmus unter Verwendung von Steigungstupeln zweiter Ordnung mit dem Algorithmus aus [38], und zwar sowohl hinsichtlich der Anzahl der Steigungstupel-Berechnungen als auch hinsichtlich der Laufzeit auf dem Rechner.

Die Pascal-XSC-Quellcodes sämtlicher Programme, mit denen die Beispiele aus dieser Arbeit gerechnet wurden, liegen der Arbeit bei bzw. sind im Internet unter <http://iamlasun8.mathematik.uni-karlsruhe.de/~ae26/software/> erhältlich. Einen aktuellen Pascal-XSC-Compiler stellt die Arbeitsgruppe "Wissenschaftliches Rechnen / Softwaretechnologie" der Universität Wuppertal unter <http://www.xsc.de> bereit.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Mittelwertsätze

Lemma 1.1.1 (Mittelwertsatz für reellwertige Funktionen, [17])

Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ auf D differenzierbar und $x_0, x_0 + h \in D$ mit der Eigenschaft, dass ihre Verbindungsstrecke ganz in D liegt. Dann gibt es eine reelle Zahl $t \in [0, 1]$ mit

$$f(x_0 + h) - f(x_0) = f'(x_0 + th)h.$$

Für Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ lässt sich im Allgemeinen kein $t \in [0, 1]$ finden, das

$$f(x_0 + h) - f(x_0) = f'(x_0 + th)h$$

erfüllt. Es gilt jedoch folgende Version des Mittelwertsatzes:

Lemma 1.1.2 (Mittelwertsatz für vektorwertige Funktionen, [17])

Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ auf D stetig differenzierbar. Die Verbindungsstrecke von $x_0 \in D$ und $x_0 + h \in D$ liege ganz in D . Dann gilt:

$$\begin{aligned} f(x_0 + h) - f(x_0) &= \begin{pmatrix} \int_0^1 \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_0 + th) dt & \cdots & \int_0^1 \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x_0 + th) dt \\ \vdots & & \vdots \\ \int_0^1 \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x_0 + th) dt & \cdots & \int_0^1 \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x_0 + th) dt \end{pmatrix} h \\ &=: \left(\int_0^1 f'(x_0 + th) dt \right) h. \end{aligned}$$

Bemerkung 1.1.3 Die Voraussetzung in den beiden Mittelwertsätzen, dass die Verbindungsstrecke von x_0 und $x_0 + h$ ganz in D liegen soll, ist für konvexe Mengen D offensichtlich erfüllt.

1.2 Intervallrechnung

Die Intervallrechnung ist ein Hilfsmittel, um auf einfache Weise eine Berechnung für alle Elemente eines gegebenen Intervalls gleichzeitig auszuführen. Dies werden wir beispielsweise zur Berechnung von Intervallsteigungen nutzen.

Eine wichtige Anwendung findet die Intervallrechnung bei Berechnungen auf einem Computer. Bedingt durch die Gleitkomma-Arithmetik liefert ein Computer im Allgemeinen nicht das exakte Ergebnis einer Rechenoperation. Durch Fehlerfortpflanzung können so auf einem Rechner letztendlich Ergebnisse entstehen, die beliebig weit vom exakten Wert entfernt sein können. Die Idee der Intervallrechnung liegt nun darin, das exakte (Zwischen-) Ergebnis einer Rechenoperation in einem Intervall einzuschließen und mit diesem Intervall so weiterzurechnen, dass letztlich auch das exakte Endergebnis durch ein Intervall eingeschlossen wird. Auf dem Computer muss dabei Maschinenintervallarithmetik verwendet werden, da für die Intervallgrenzen jeweils nur eine endliche Anzahl von Gleitkommazahlen zur Verfügung steht.

Einführungen in die Intervallrechnung findet man in [1] und [30]. Wir geben im Folgenden einige wichtige Definitionen und Sätze an.

1.2.1 Reelle Intervallrechnung

Die Menge aller abgeschlossenen reellen Intervalle $[x] = [\underline{x}, \bar{x}]$ mit $\underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}$ wird mit \mathbb{IR} bezeichnet. Für die Grenzen \underline{x} und \bar{x} eines Intervalls $[x]$ schreiben wir gelegentlich auch $\inf [x]$ bzw. $\sup [x]$. Auf \mathbb{IR} wird nun eine Arithmetik eingeführt.

Definition 1.2.1 Für $[a] := [a, \bar{a}]$, $[b] := [b, \bar{b}] \in \mathbb{IR}$ sei

$$\begin{aligned} [a] + [b] &:= \{a + b \mid a \in [a], b \in [b]\}, \\ [a] - [b] &:= \{a - b \mid a \in [a], b \in [b]\}, \\ [a] \cdot [b] &:= \{a \cdot b \mid a \in [a], b \in [b]\}, \\ [a] / [b] &:= \{a / b \mid a \in [a], b \in [b]\}, \text{ falls } 0 \notin [b]. \end{aligned}$$

Man sieht leicht, dass das Ergebnis dieser Verknüpfungen jeweils wieder ein Intervall ist.

Elementare Eigenschaften der Intervallrechnung geben die folgenden beiden Sätze an.

Satz 1.2.2 Es seien $[a], [b], [c] \in \mathbb{IR}$. Dann gilt:

$$1. \quad [a] + [b] = [b] + [a], \quad [a] \cdot [b] = [b] \cdot [a]. \quad (\text{Kommutativität})$$

2. $([a] + [b]) + [c] = [a] + ([b] + [c]),$ (Assoziativität)
 $([a] \cdot [b]) \cdot [c] = [a] \cdot ([b] \cdot [c]).$
3. Neutrales Element der Addition ist das Punktintervall $[0, 0]$, neutrales Element der Multiplikation ist das Punktintervall $[1, 1]$.
4. Ein $[a] \in \mathbb{IR}$ mit $\underline{a} \neq \bar{a}$ besitzt keine inversen Elemente bezüglich der Addition und der Multiplikation.
5. $[a] \cdot ([b] + [c]) \subseteq [a] \cdot [b] + [a] \cdot [c],$ (Subdistributivität)
 $a \cdot ([b] + [c]) = a \cdot [b] + a \cdot [c]$ für $a \in \mathbb{R}.$

Satz 1.2.3 Es seien $[a]_1, [a]_2, [b]_1, [b]_2 \in \mathbb{IR}$ mit $[a]_1 \subseteq [b]_1$ und $[a]_2 \subseteq [b]_2$. Dann gilt für die Verknüpfungen $* \in \{+, -, \cdot, /\}$

$$[a]_1 * [a]_2 \subseteq [b]_1 * [b]_2,$$

insbesondere also für reelle Zahlen $a_1 \in [b]_1$ und $a_2 \in [b]_2$

$$a_1 * a_2 \subseteq [b]_1 * [b]_2.$$

Bei der Division ist dabei vorausgesetzt, dass $0 \notin [b]_2$.

Definition 1.2.4 Es sei $[a] \in \mathbb{IR}$. Dann bezeichnet

$$\text{mid } [a] := \frac{\bar{a} + \underline{a}}{2}$$

den *Mittelpunkt* von $[a]$,

$$\text{diam } [a] := \bar{a} - \underline{a} \geq 0$$

den *Durchmesser* von $[a]$ und

$$\text{diam}_{\text{rel}} [a] := \begin{cases} (\text{diam } [a]) / \left(\min_{a \in [a]} |a| \right), & \text{falls } 0 \notin [a], \\ \text{diam } [a], & \text{falls } 0 \in [a], \end{cases}$$

den *relativen Durchmesser* von $[a]$.

Definition 1.2.5 Es seien $[a], [b] \in \mathbb{IR}$. Als *Intervallhülle* $[a] \sqcup [b]$ von $[a]$ und $[b]$ wird das kleinste Intervall aus \mathbb{IR} bezeichnet, das $[a]$ und $[b]$ enthält, d. h.

$$[a] \sqcup [b] := [\min \{\underline{a}, \underline{b}\}, \max \{\bar{a}, \bar{b}\}].$$

Definition 1.2.6 Für eine stetige einstellige Operation $r(x)$ in \mathbb{R} wird durch

$$r([x]) := \left[\min_{x \in [x]} r(x), \max_{x \in [x]} r(x) \right]$$

die zugehörige Operation in \mathbb{IR} definiert. Dadurch sind für $[x] \in \mathbb{IR}$ Ausdrücke wie zum Beispiel $[x]^n$, $n \in \mathbb{N}$, oder $\sin([x])$ erklärt.

Definition 1.2.7 Für eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $[x] \in \mathbb{IR}$ sei

$$\int_0^1 f(t[x]) dt := \left[\min_{x \in [x]} \int_0^1 f(tx) dt, \max_{x \in [x]} \int_0^1 f(tx) dt \right].$$

1.2.2 Abstand und Metrik

Definition 1.2.8 Für $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ wird der *Abstand* $q([a], [b])$ durch

$$q([a], [b]) := \max \{ |\underline{a} - \underline{b}|, |\bar{a} - \bar{b}| \}$$

definiert. Ferner heißt

$$|[a]| := q([a], [0, 0]) = \max \{ |\underline{a}|, |\bar{a}| \} = \max_{a \in [a]} |a|$$

Betrag von $[a]$.

Der Abstand q besitzt die Eigenschaften einer Metrik. Folglich kann nun die Konvergenz auf \mathbb{IR} erklärt werden:

$$\begin{aligned} [a]_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} [a] &\Leftrightarrow q([a]_k, [a]) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \\ &\Leftrightarrow \underline{a}_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \underline{a} \quad \text{und} \quad \bar{a}_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \bar{a}. \end{aligned}$$

Damit ist auch klar, wie der Begriff der Stetigkeit auf \mathbb{IR} definiert ist. Man erhält die folgenden Eigenschaften.

Satz 1.2.9 Die Intervalloperationen $+$, $-$, \cdot und $/$ sind stetig.

Satz 1.2.10 Für eine stetige einstellige Operation $r(x)$ in \mathbb{R} ist die zugehörige Intervalloperation $r([x])$ eine stetige einstellige Operation in \mathbb{IR} .

1.2.3 Intervallvektoren und Intervallmatrizen

Die Menge aller $(m \times n)$ -*Intervallmatrizen*, d. h. die Menge aller $(m \times n)$ -Matrizen, deren Einträge Elemente aus \mathbb{IR} sind, wird mit $\mathbb{IR}^{m \times n}$ bezeichnet.

Definition 1.2.11 a) Es seien $[A] = ([a]_{ij})$, $[B] = ([b]_{ij}) \in \mathbb{IR}^{m \times n}$. Dann ist

$$[A] \pm [B] := ([a]_{ij} \pm [b]_{ij}) \in \mathbb{IR}^{m \times n}.$$

b) Es sei $[A] = ([a]_{ij}) \in \mathbb{IR}^{m \times r}$ und $[B] = ([b]_{ij}) \in \mathbb{IR}^{r \times n}$. Dann ist

$$([A] \cdot [B]) := \left(\sum_{v=1}^r [a]_{iv} [b]_{vj} \right) \in \mathbb{IR}^{m \times n}.$$

Als Spezialfall von Definition 1.2.11 erhält man für $[A] = \left([a]_{ij} \right) \in \mathbb{IR}^{m \times n}$ und $[x] \in \mathbb{IR}$

$$[x] \cdot [A] = [A] \cdot [x] = \left([x] [a]_{ij} \right) \in \mathbb{IR}^{m \times n}.$$

Außerdem sind mit Definition 1.2.11 auch die entsprechenden Rechenoperationen für den Spezialfall einer $(m \times 1)$ -Intervallmatrix, das heißt für einen m -dimensionalen Intervallvektor $([x]_1, \dots, [x]_m)^T$, erklärt. Die Menge der m -dimensionalen Intervallvektoren wird mit \mathbb{IR}^m bezeichnet.

Bemerkung 1.2.12 Für Intervallmatrizen $[A]$ und $[B]$, für die $[A] \cdot [B]$ definiert ist, gilt im Allgemeinen im Unterschied zur Arithmetik auf \mathbb{IR} nur noch die Mengeneinklusion

$$\{A \cdot B \mid A \in [A], B \in [B]\} \subseteq \{C \mid C \in [A] \cdot [B]\}.$$

Definition 1.2.13 Für eine Intervallmatrix $[A] = \left([a]_{ij} \right) \in \mathbb{IR}^{m \times n}$ sei

$$|[A]| := \left(|[a]_{ij}| \right) \in \mathbb{IR}^{m \times n}.$$

1.2.4 Wertebereich und intervallmäßige Auswertung reeller Funktionen

Definition 1.2.14 Es sei $f: D \subseteq \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$, $f = (f_1(x_1, \dots, x_p), \dots, f_q(x_1, \dots, x_p))$ und $[x] = \left([x]_1, \dots, [x]_p \right)^T \subseteq D$ ein Intervallvektor. Dann ist

$$W\left(f, [x]_1, \dots, [x]_p\right) := \left\{ f(x_1, \dots, x_p) \mid x_1 \in [x]_1, \dots, x_p \in [x]_p \right\}$$

die Menge aller Funktionswerte $f(x_1, \dots, x_p)$ mit $x_i \in [x]_i$ und heißt *Wertebereich von f auf $[x]$* .

Oft ist eine Menge wie zum Beispiel der Wertebereich $W\left(f, [x]_1, \dots, [x]_p\right)$ kein Intervallvektor. Um dann einen Intervallvektor zu erhalten, der alle Elemente dieser Menge enthält, betrachtet man die sogenannte (*Intervall-*)*Hülle*, das heißt den kleinsten Intervallvektor, der alle Elemente der (beschränkten) Menge enthält. Entsprechend lässt sich auch bei Matrizen eine (*Intervall-*)*Hülle* bilden.

Im Folgenden wird nun der Begriff der *intervallmäßigen Auswertung* eingeführt.

Definition 1.2.15 Es sei f wie in Definition 1.2.14. Sind alle $f_j(x_1, \dots, x_p)$ so aus Operationen aufgebaut, dass das Einsetzen der Intervalle $[x]_i$ für die Variable x_i ($i = 1, \dots, p$) und die Auswertung des entstandenen Terms mit Intervallrechnung möglich ist, dann heißt das Ergebnis

$$f\left([x]_1, \dots, [x]_p\right) \in \mathbb{IR}$$

eine *intervallmäßige Auswertung von f auf $[x] = ([x]_1, \dots, [x]_p)^T$* .

Eine intervallmäßige Auswertung existiert nicht immer, selbst wenn im Funktionsausdruck von f nur die Standardoperationen $+$, $-$, \cdot , $/$ auftauchen und f auf ganz \mathbb{R} definiert ist. Dies ist zum Beispiel für $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$f(x) = \frac{1}{x - x + 1} \quad \text{und} \quad [x] = [0, 1]$$

der Fall, weil beim Einsetzen von $[x]$ in den Funktionsausdruck von f im Nenner ein Intervall entsteht, das die 0 enthält.

Das Ergebnis einer intervallmäßigen Auswertung hängt vom konkreten Funktionsausdruck ab. So ergeben beispielsweise die intervallmäßigen Auswertungen von $f_1(x) = 1 + \frac{1}{x}$ und $f_2(x) = \frac{x+1}{x}$ auf $[x] = [1, 2]$ unterschiedliche Ergebnisse, obwohl die Funktionswerte von f_1 und f_2 für alle $x \in \mathbb{R}$ gleich sind. Daher kann man durch eine geschicktere Wahl des Funktionsausdrucks möglicherweise das Ergebnisintervall der intervallmäßigen Auswertung verkleinern (siehe dazu [1]).

Insbesondere ist eine intervallmäßige Auswertung einer Funktion im Allgemeinen nicht gleich deren Wertebereich auf dem betrachteten Intervall. Es gilt jedoch die folgende wichtige *Einschließungseigenschaft*.

Satz 1.2.16 Es sei $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$ stetig und es existiere eine intervallmäßige Auswertung $f([x]_1, \dots, [x]_p)$. Dann gilt

$$W(f, [x]_1, \dots, [x]_p) \subseteq f([x]_1, \dots, [x]_p).$$

Nach Satz 1.2.16 ist offenbar auch die Intervallhülle des Wertebereichs immer in der intervallmäßigen Auswertung $f([x]_1, \dots, [x]_p)$ enthalten.

1.3 Steigungen

Es sei $f = (f_i) : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar, $[x] \subseteq D$ und $x_0 \in [x]$ fest. Auf Grund des Mittelwertsatzes 1.1.1 gilt für alle $x \in [x]$

$$f(x) - f(x_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_0 + t_1(x - x_0)) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x_0 + t_1(x - x_0)) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x_0 + t_m(x - x_0)) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x_0 + t_m(x - x_0)) \end{pmatrix} (x - x_0) \quad (1.1)$$

mit $t_i \in [0, 1]$.

Da f' stetig ist, gibt es eine Intervallmatrix $f'([x]) \in \mathbb{IR}^{m \times n}$ mit $f'(x) \in f'([x])$ für alle $x \in [x]$. Damit folgt aus (1.1)

$$f(x) \in f(x_0) + f'([x]) \cdot ([x] - x_0) =: D_1, \quad (1.2)$$

d. h. D_1 ist eine Einschließung des Wertebereichs von f auf dem Intervall $[x]$.

Oft können genauere Einschließungen des Wertebereichs mit Hilfe von Steigungen berechnet werden. Im Folgenden sei dazu f , sofern nicht anders deklariert, eine stetige Funktion.

1.3.1 Interpolation und Steigungen

Um Steigungen für eine Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zu definieren, gehen wir zunächst auf die Polynominterpolation ein. Die Beweise der folgenden Aussagen findet man in [7].

Satz 1.3.1 Gegeben seien $n + 1$ paarweise verschiedene Knoten $x_0, x_1, \dots, x_n \in D$ sowie die zugehörigen Werte $f_0, f_1, \dots, f_n \in \mathbb{R}$. Dann gibt es genau ein Polynom p mit $\text{Grad}(p) \leq n$ und $p(x_i) = f_i$.

Zur Verallgemeinerung seien nun die Punkte $x_i \in D$ der Menge $M = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ nicht mehr notwendigerweise verschieden. Tritt ein Punkt x_i in der Menge M k_i -fach auf, so seien neben dem Funktionswert $f(x_i)$ auch die Ableitungen

$$f'(x_i), \dots, f^{(k_i-1)}(x_i)$$

bis zur Ordnung $k_i - 1$ vorgegeben.

Den Knoten x_0, \dots, x_n werden nun Zahlen $d_i \in \mathbb{N}$ in folgender Weise zugeordnet: Tritt ein Knoten ξ in der Menge M genau l -mal auf, so wird jedem Knoten x_i mit $x_i = \xi$ ein unterschiedliches $d_i \in \{0, \dots, l - 1\}$ zugeordnet, z. B.

	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
x_i	1.5	-3	7	1.5	1.5	1	-3	1.5	0
d_i	3	0	0	1	0	0	1	2	0

Satz 1.3.2 Es sei $f \in C^n(D)$ und $M = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ mit $x_i \in D$ eine Menge von (nicht notwendigerweise verschiedenen) Knoten. Dann gibt es genau ein Polynom p mit $\text{Grad}(p) \leq n$ und

$$p^{(d_i)}(x_i) = f^{(d_i)}(x_i).$$

p heißt *Hermite-Interpolationspolynom* von f zu den Knoten x_0, \dots, x_n .

Bemerkung 1.3.3 Gilt in Satz 1.3.2 $x_0 = x_1 = \dots = x_n$, so ist

$$p(x) = \sum_{j=0}^n \frac{(x - x_0)^j}{j!} f^{(j)}(x_0)$$

das Taylor-Polynom n -ten Grades von f zur Entwicklungsstelle x_0 .

Definition 1.3.4 Der führende Koeffizient a_n des Hermite-Interpolationspolynoms von f zu den Knoten x_0, \dots, x_n heißt *Steigung n -ter Ordnung von f bezüglich x_0, \dots, x_n* . Schreibweise:

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) := a_n.$$

Satz 1.3.5 Es sei $f \in C^n(D)$. Die Problemstellung von Satz 1.3.2 ist unabhängig von der Reihenfolge der Knoten x_0, \dots, x_n . Folglich ist die Steigung n -ter Ordnung bezüglich x_0, \dots, x_n symmetrisch in ihren Argumenten, d. h. es gilt

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = \delta_n f(x_{\pi(0)}, \dots, x_{\pi(n)})$$

für jede Permutation π von $\{0, \dots, n\}$.

Satz 1.3.6 Für die Steigung n -ter Ordnung einer Funktion $f \in C^n(D)$ bezüglich x_0, \dots, x_n gilt:

- a) $\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = 0$, falls f ein Polynom mit $\text{Grad}(f) \leq n - 1$ ist.
- b) Falls $x_0 = x_1 = \dots = x_n$, so ist

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}.$$

- c) Für $x_i \neq x_j$ gilt die Rekursionsformel

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = \frac{\delta_{n-1} f(x_0, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n) - \delta_{n-1} f(x_0, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n)}{x_j - x_i}.$$

Satz 1.3.7 Es sei $f \in C^{n+1}(D)$. Dann gilt mit $\omega_k(x) := \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j)$

$$f(x) = \sum_{i=0}^n \delta_i f(x_0, \dots, x_i) \cdot \omega_i(x) + \delta_{n+1} f(x_0, \dots, x_n, x) \cdot \omega_{n+1}(x). \quad (1.3)$$

Satz 1.3.8 (Hermite-Genocchi-Formel)

Es sei $f \in C^n(D)$, $n \geq 1$ und D zusammenhängend. Ferner seien $x_0, \dots, x_n \in D$. Dann gilt mit

$$\Sigma^n := \left\{ s = (s_0, \dots, s_n) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid s_i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^n s_i = 1 \right\}$$

die Darstellung

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = \int_{\Sigma^n} f^{(n)} \left(\sum_{i=0}^n s_i x_i \right) ds.$$

Aus der Hermite-Genocchi-Formel erhält man das folgende Korollar.

Korollar 1.3.9 Es sei $f \in C^n(D)$. Dann gilt:

a) Die durch die Steigung n -ter Ordnung bezüglich x_0, \dots, x_n definierte Funktion $g : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$g(x_0, \dots, x_n) := \delta_n f(x_0, \dots, x_n)$$

ist stetig in ihren Argumenten x_i .

b) Zu den Knoten $x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n$ gibt es ein $\xi \in [x_0, x_n]$ mit

$$\delta_n f(x_0, \dots, x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}.$$

Insbesondere folgt daraus durch Grenzübergang Satz 1.3.6 b).

1.3.2 Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen für stetige Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen erster Ordnung

In Abschnitt 1.3.1 haben wir in der Definition der Steigungen über die Hermite-Interpolation jeweils vorausgesetzt, dass die Funktion f genügend oft differenzierbar ist. So gilt für eine stetig differenzierbare Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ nach (1.3) sowie Satz 1.3.5

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + \delta f(x_0, x) \cdot (x - x_0) \\ &= f(x_0) + \delta f(x, x_0) \cdot (x - x_0), \quad x \in D. \end{aligned}$$

Für festes x_0 ist somit $g(x) := \delta f(x; x_0)$ eine reellwertige Funktion einer Variablen, die wir als *Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0* bezeichnen. Wir verallgemeinern nun die Definition der Steigungsfunktion für stetige, nicht notwendig differenzierbare Funktionen.

Definition 1.3.10 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $x_0 \in D$ beliebig, aber fest. Eine Funktion $\delta f : D \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = f(x_0) + \delta f(x; x_0) \cdot (x - x_0), \quad x \in D, \quad (1.4)$$

heißt *Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0* .

Ein Intervall $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{IR}$, das alle Funktionswerte von $\delta f(x; x_0)$ auf $[x] \subseteq D$ enthält, d. h. ein $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{IR}$ mit

$$\delta f([x]; x_0) \supseteq \{\delta f(x; x_0) \mid x \in [x]\},$$

nennen wir *Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0* .

Bemerkung 1.3.11 Für $x = x_0$ ist (1.4) für jeden beliebigen Wert $\delta f(x_0; x_0)$ erfüllt. Für eine in x_0 differenzierbare Funktion f setzen wir immer $\delta f(x_0; x_0) := f'(x_0)$.

Bemerkung 1.3.12 a) Es sei $\delta f([x]; x_0) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$. Dann schließen nach (1.4) die beiden Geraden

$$g(x) := f(x_0) + \underline{\delta f} \cdot (x - x_0)$$

und

$$h(x) := f(x_0) + \overline{\delta f} \cdot (x - x_0)$$

für jedes $x \in [x]$ den Funktionswert $f(x)$ ein (siehe Abbildung 1.1). Insbesondere gilt mit (1.4) und Satz 1.2.3

$$f(x) \in f(x_0) + \delta f([x]; x_0) \cdot ([x] - x_0) \quad (1.5)$$

für alle $x \in [x]$.

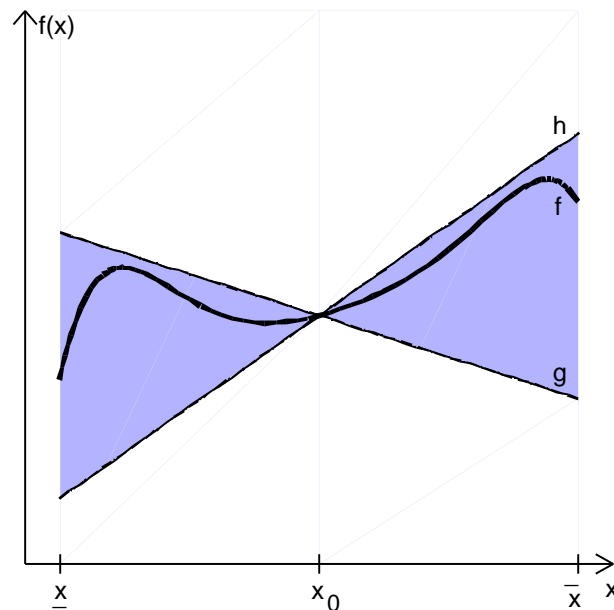


Abbildung 1.1: Einschließung des Wertebereichs mit Hilfe einer Intervallsteigung erster Ordnung

b) Für x_0 wählt man oft den Mittelpunkt $\text{mid}([x])$ des Intervalls $[x]$.

c) Für differenzierbare Funktionen f und $x_0 \in [x]$ gilt

$$\{\delta f(x; x_0) \mid x \in [x], x \neq x_0\} \subseteq \{f'(x) \mid x \in [x]\},$$

d. h. mit der rechten Seite von (1.5) ist es möglich, genauere Einschließungen des Wertebereichs von f auf $[x]$ zu erzielen als mit der Mittelwertform (1.2).

Bemerkung 1.3.12 a) zeigt, dass man mit Hilfe von Intervallsteigungen den Wertebereich einer Funktion f auf $[x]$ einschließen kann. Wir untersuchen nun für den Fall einer stetigen Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, unter welchen Voraussetzungen eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich des Punktes $x_0 \in [x]$ existiert.

Nach Gleichung (1.4) gilt für eine Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0

$$\delta f(x; x_0) = \begin{cases} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} & \text{für } x \neq x_0 \\ c & \text{für } x = x_0, \end{cases} \quad (1.6)$$

wobei $c \in \mathbb{R}$ beliebig gewählt werden kann.

Es gibt stetige Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $x_0 \in [x] \subseteq \mathbb{R}$, für die keine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ erster Ordnung existiert. Dies sehen wir durch das folgende Beispiel.

Beispiel 1.3.13 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = \begin{cases} \sqrt{x} & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}$$

und $x_0 = 0$, $[x] = [-1, 1]$.

f ist offensichtlich stetig. Für die Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich $x_0 = 0$ erhalten wir

$$\delta f(x; 0) = \frac{\sqrt{x} - 0}{x - 0} = \frac{1}{\sqrt{x}}, \quad x > 0.$$

Wegen

$$\frac{1}{\sqrt{x}} \rightarrow \infty \quad \text{für } x \rightarrow +0$$

gibt es keine Intervallsteigung $\delta f([x]; 0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich $x_0 = 0$.

Lemma 1.3.14 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und an der Stelle $x_0 \in [x]$ differenzierbar. Dann existiert eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Beweis:

Auf Grund der Differenzierbarkeit von f in x_0 ist die Funktion $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$g(x) = \begin{cases} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} & \text{für } x \neq x_0 \\ f'(x_0) & \text{für } x = x_0 \end{cases}$$

stetig auf $[x]$ und besitzt folglich auf dem Kompaktum $[x]$ ein Minimum und ein Maximum. □

Unter gewissen Voraussetzungen kann eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{R}$ auch dann existieren, wenn f in x_0 nicht differenzierbar ist. Bevor wir näher darauf eingehen, benötigen wir die folgende Definition (vgl. [29]).

Definition 1.3.15 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und es sei $x_0 \in [x]$. Gilt

$$\liminf_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \in \mathbb{R}$$

und

$$\limsup_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \in \mathbb{R},$$

so definieren wir die "Grenz-Intervallsteigung" $\delta f_{\text{lim}}([x_0]) \in \mathbb{R}$ durch

$$\delta f_{\text{lim}}([x_0]) := \left[\liminf_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}, \limsup_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \right].$$

Bemerkung 1.3.16 a) Ist f Lipschitz-stetig in einer Umgebung von x_0 , so existiert die "Grenz-Intervallsteigung" $\delta f_{\text{lim}}([x_0])$.

b) Ist f differenzierbar in x_0 , so gilt offenbar

$$\delta f_{\text{lim}}([x_0]) = [f'(x_0), f'(x_0)].$$

Beispiel 1.3.17 Für $f(x) = |x|$, $x_0 = 0$ ist $\delta f_{\text{lim}}([x_0]) = [-1, 1]$.

Lemma 1.3.18 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und es sei $x_0 \in [x]$. Existiert $\delta f_{\text{lim}}([x_0]) \in \mathbb{R}$, so existiert auch eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{R}$ von f auf $[x]$ bezüglich x_0 , und es ist

$$\delta f([x]; x_0) = \left[\inf_{\substack{x \in [x] \\ x \neq x_0}} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}, \sup_{\substack{x \in [x] \\ x \neq x_0}} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \right].$$

Beweis:

Aus den Voraussetzungen folgt, dass die Funktion $g : [x] \setminus \{x_0\} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$g(x) := \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

beschränkt ist. Daraus folgt mit

$$\liminf_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \geq \inf_{\substack{x \in [x] \\ x \neq x_0}} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} > -\infty$$

und

$$\limsup_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \leq \sup_{\substack{x \in [x] \\ x \neq x_0}} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} < \infty$$

die Behauptung. \square

Bemerkung 1.3.19 Clarke [6] definiert für eine in einer Umgebung von $x_0 \in \mathbb{R}^n$ Lipschitz-stetige Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ den verallgemeinerten Gradienten in x_0 durch

$$\partial f(x_0) := \{\zeta \in \mathbb{R}^n : f^\circ(x_0; \nu) \geq \langle \zeta, \nu \rangle \text{ für alle } \nu \in \mathbb{R}^n\} \subseteq \mathbb{R}^n,$$

wobei

$$f^\circ(x_0; \nu) := \limsup_{\substack{y \rightarrow x_0 \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + t\nu) - f(y)}{t}$$

mit $t \in \mathbb{R}$ und $y \in \mathbb{R}^n$ die verallgemeinerte Richtungsableitung ist.

In [29] zeigen Muñoz und Kearfott, dass für eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die in einer Umgebung von $x_0 \in \mathbb{R}$ Lipschitz-stetig ist, die Inklusion

$$\delta f_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \partial f(x_0) \tag{1.7}$$

gilt. Außerdem geben Muñoz und Kearfott eine Funktion an, die in einer Umgebung von x_0 Lipschitz-stetig ist und für die in (1.7) die echte Inklusion

$$\delta f_{\text{lim}}([x_0]) \subset \partial f(x_0)$$

vorliegt.

Ist $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig in x_0 , differenzierbar in einer punktierten Umgebung $U(x_0)$ und existieren die Grenzwerte

$$\lim_{x \downarrow x_0} f'(x) =: f'_+(x_0) \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad \lim_{x \uparrow x_0} f'(x) =: f'_-(x_0) \in \mathbb{R},$$

so gilt in (1.7) Gleichheit, d. h.

$$\delta f_{\text{lim}}([x_0]) = \partial f(x_0).$$

Denn aus der für $\nu \in \mathbb{R}$, $\nu \neq 0$, geltenden Eigenschaft

$$\begin{aligned}
 f^\circ(x_0; \nu) &= \limsup_{\substack{y \rightarrow x_0 \\ t \downarrow 0}} \nu \frac{f(y + t\nu) - f(y)}{t\nu} \\
 &= \begin{cases} \nu \limsup_{\substack{y \rightarrow x_0 \\ t \downarrow 0}} f'(\xi), & \xi \in [y, y + t\nu] \quad \text{für } \nu > 0 \\ \nu \liminf_{\substack{y \rightarrow x_0 \\ t \downarrow 0}} f'(\xi), & \xi \in [y + t\nu, y] \quad \text{für } \nu < 0 \end{cases} \\
 &= \begin{cases} \nu \max \{f'_+(x_0), f'_-(x_0)\} & \text{für } \nu > 0 \\ \nu \min \{f'_+(x_0), f'_-(x_0)\} & \text{für } \nu < 0 \end{cases}
 \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned}
 \partial f(x_0) &= \{\zeta \in \mathbb{R} : f^\circ(x_0; \nu) \geq \zeta\nu \quad \text{für alle } \nu \in \mathbb{R}\} \\
 &= \left[\min \{f'_+(x_0), f'_-(x_0)\}, \max \{f'_+(x_0), f'_-(x_0)\} \right] \\
 &= \left[\liminf_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}, \limsup_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \right] \\
 &= \delta f_{\text{lim}}([x_0]).
 \end{aligned}$$

Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen zweiter und höherer Ordnung

Für $f \in C^2(D)$ gilt nach (1.3) sowie Satz 1.3.5

$$\begin{aligned}
 f(x) &= f(x_0) + \delta f(x_0, x_1) \cdot (x - x_0) + \delta_2 f(x_0, x_1, x) \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \\
 &= f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 f(x, x_1, x_0) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0)
 \end{aligned}$$

für alle $x \in D$. Hält man x_0 und x_1 fest, so ist $g(x) := \delta_2 f(x; x_1, x_0)$ eine reellwertige Funktion einer Variablen.

Ausgehend davon definieren wir nun Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen zweiter Ordnung.

Definition 1.3.20 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $x_0, x_1 \in D$ beliebig, aber fest, mit $x_0 \neq x_1$. Eine Funktion $\delta_2 f : D \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 f(x; x_1, x_0) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0), \quad x \in D, \quad (1.8)$$

heißt *Steigungsfunktion zweiter Ordnung von f bezüglich x_1 und x_0* .

Ein Intervall $\delta_2 f([x]; x_1, x_0) \in \mathbb{IR}$, das alle Funktionswerte von $\delta_2 f(x; x_1, x_0)$ auf $[x] \subseteq D$ enthält, d. h. ein $\delta_2 f([x]; x_1, x_0) \in \mathbb{IR}$ mit

$$\delta_2 f([x]; x_1, x_0) \supseteq \{ \delta_2 f(x; x_1, x_0) \mid x \in [x] \},$$

nennen wir *Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0* .

Analog dazu definieren wir Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen höherer Ordnung.

Definition 1.3.21 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, und $x_0, \dots, x_{n-1} \in D$ seien paarweise verschiedene, feste Punkte. Eine Funktion $\delta_n f : D \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \delta_i f(x_i, \dots, x_0) \cdot \omega_i(x) + \delta_n f(x; x_{n-1}, \dots, x_0) \cdot \omega_n(x),$$

wobei $\omega_k(x) := \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j)$, heißt *Steigungsfunktion n -ter Ordnung von f bezüglich x_{n-1}, \dots, x_0* .

Ein Intervall $\delta_n f([x]; x_{n-1}, \dots, x_0) \in \mathbb{IR}$ mit

$$\delta_n f([x]; x_{n-1}, \dots, x_0) \supseteq \{ \delta_n f(x; x_{n-1}, \dots, x_0) \mid x \in [x] \},$$

nennen wir *Intervallsteigung n -ter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_{n-1}, \dots, x_0* .

Bemerkung 1.3.22 Ist $\delta_2 f([x]; x_1, x_0) = [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$ eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$, so gilt mit der Einschließungseigenschaft 1.2.3 sowie der Subdistributivität der Intervallrechnung

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + \left(\delta f(x_1, x_0) + \delta_2 f(x; x_1, x_0) \cdot (x - x_1) \right) \cdot (x - x_0) \\ &\in f(x_0) + \left(\delta f(x_1, x_0) + \delta_2 f([x]; x_1, x_0) \cdot ([x] - x_1) \right) \cdot ([x] - x_0) \\ &\subseteq f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 f([x]; x_1, x_0) \cdot ([x] - x_1) \cdot ([x] - x_0) \end{aligned}$$

für alle $x \in [x]$.

Ferner schließen die beiden Parabeln

$$g(x) := f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot (x - x_0) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0)$$

und

$$h(x) := f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot (x - x_0) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0)$$

für jedes $x \in [x]$ den Funktionswert $f(x)$ ein (siehe Abbildung 1.2).

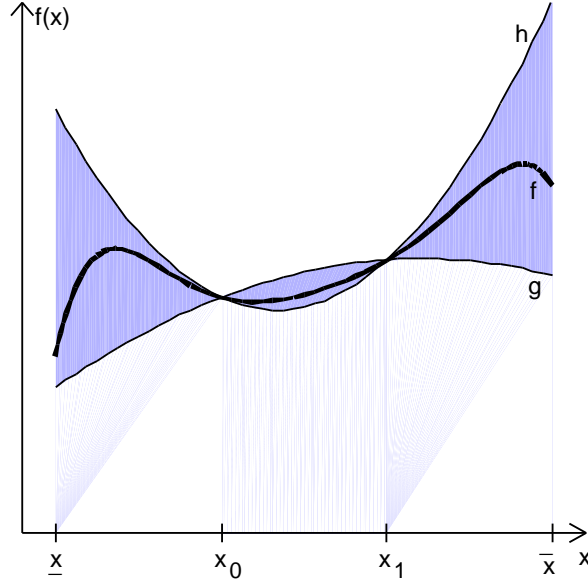


Abbildung 1.2: Einschließung des Wertebereichs von f mit Hilfe einer Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0

$\delta_2 f(x; x_1, x_0)$ hängt von der Wahl der beiden Punkte x_1 und x_0 ab. Im Folgenden betrachten wir den Fall $x_1 = x_0$.

Definition 1.3.23 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $[x] \subseteq D$ und $x_0 \in [x]$ fest.

a) Es existiere $f'(x_0)$. Eine Funktion $\delta_2 f : D \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 f(x; x_0, x_0) \cdot (x - x_0)^2, \quad x \in D,$$

heißt *Steigungsfunktion zweiter Ordnung von f bezüglich x_0* .

b) Die "Grenz-Intervallsteigung" $\delta f_{\lim}([x_0])$ existiere. Ein $\delta_2 f([x]; x_0, x_0) \in \mathbb{R}$ mit

$$f(x) \in f(x_0) + \delta f_{\lim}([x_0]) \cdot (x - x_0) + \delta_2 f([x]; x_0, x_0) \cdot (x - x_0)^2, \quad x \in [x], \quad (1.9)$$

heißt *Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0* .

Zur Abkürzung sei $\delta_2 f(x; x_0) := \delta_2 f(x; x_0, x_0)$ sowie $\delta_2 f([x]; x_0) := \delta_2 f([x]; x_0, x_0)$ gesetzt.

Bemerkung 1.3.24 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $[x] \subseteq D$ und f zweimal stetig differenzierbar in einer Umgebung von $x_0 \in [x]$. Dann ist die Funktion $\delta_2 f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\delta_2 f(x; x_0) = \begin{cases} \frac{f(x) - f(x_0) - f'(x_0)(x - x_0)}{(x - x_0)^2} & \text{für } x \neq x_0 \\ \frac{1}{2} f''(x_0) & \text{für } x = x_0 \end{cases} \quad (1.10)$$

nach dem Satz von Taylor stetig in x_0 und folglich auch stetig auf ganz D . Damit existiert eine Intervallsteigung zweiter Ordnung $\delta_2 f([x]; x_0)$ von f auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Bemerkung 1.3.25 Es gelte (1.9) mit $\delta f_{\text{lim}}([x_0]) = [\underline{\delta f x_0}, \overline{\delta f x_0}]$ und $\delta_2 f([x]; x_0) = [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$. Dann ist

$$f(x) \in f(x_0) + \delta f_{\text{lim}}([x_0]) \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 f([x]; x_0) \cdot ([x] - x_0)^2 \quad (1.11)$$

eine Einschließung des Wertebereichs von f auf $[x]$. Ferner folgt aus (1.9), dass die Parabelstücke

$$g_l(x) := f(x_0) + \overline{\delta f x_0} \cdot (x - x_0) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - x_0)^2 \quad \text{für } \underline{x} \leq x \leq x_0,$$

$$h_l(x) := f(x_0) + \underline{\delta f x_0} \cdot (x - x_0) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - x_0)^2 \quad \text{für } \underline{x} \leq x \leq x_0,$$

$$g_r(x) := f(x_0) + \underline{\delta f x_0} \cdot (x - x_0) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - x_0)^2 \quad \text{für } x_0 \leq x \leq \bar{x}$$

und

$$h_r(x) := f(x_0) + \overline{\delta f x_0} \cdot (x - x_0) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - x_0)^2 \quad \text{für } x_0 \leq x \leq \bar{x}$$

für jedes $x \in [x]$ den Funktionswert $f(x)$ einschließen (siehe Abbildung 1.3).

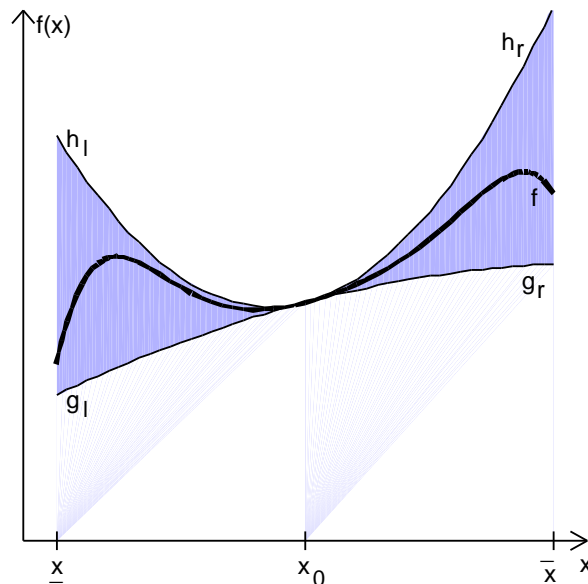


Abbildung 1.3: Einschließung des Wertebereichs von f mit Hilfe einer Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0

1.3.3 Steigungen von Funktionen mehrerer Variablen

Definition 1.3.26 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig und $x_0 \in D$ beliebig, aber fest. Eine Funktion $\delta f : D \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$f(x) = f(x_0) + \delta f(x; x_0) \cdot (x - x_0), \quad x \in D, \quad (1.12)$$

heißt *Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0* .

Eine Intervallmatrix $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$\delta f([x]; x_0) \supseteq \{\delta f(x; x_0) \mid x \in [x]\}$$

nennen wir *Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0* .

Die Aussagen aus Bemerkung 1.3.12 gelten somit entsprechend für die Steigungen von Funktionen mehrerer Variablen.

Berechnung von Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen erster Ordnung

Für die Berechnung von Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen erster Ordnung gibt es verschiedene Möglichkeiten:

a) Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f = (f_i) : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar und $[x] \subseteq D$. Auf Grund des Mittelwertsatzes 1.1.1 gilt für alle $x \in [x]$

$$f(x) - f(x_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_0 + t_1(x - x_0)) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x_0 + t_1(x - x_0)) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x_0 + t_m(x - x_0)) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x_0 + t_m(x - x_0)) \end{pmatrix} (x - x_0)$$

mit $t_i \in [0, 1]$. Wegen der Stetigkeit von f' existiert eine Intervallmatrix $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^{m \times n}$ mit

$$\delta f([x]; x_0) \supseteq \left\{ f'(x) \mid x \in [x] \right\}.$$

Folglich ist $\delta f([x]; x_0)$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 .

b) Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f = (f_i) : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar und $[x] \subseteq D$. Wegen des Mittelwertsatzes 1.1.2 ist für alle $x \in [x]$

$$f(x) - f(x_0) = \left(\int_0^1 f'(x_0 + t(x - x_0)) dt \right) (x - x_0), \quad (1.13)$$

wobei das Integral elementweise definiert ist.

Eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ von f auf $[x]$ bezüglich x_0 erhält man folglich, indem man für $\delta f([x]; x_0)_{ij}$ jeweils eine Einschließung des Elements

$$\left(\int_0^1 f'(x_0 + t(x - x_0)) dt \right)_{ij}$$

auf $[x]$ wählt.

c) Eine weitere Möglichkeit zur Berechnung von Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen wurde von Hansen angegeben ([13], [16]), wobei die Stetigkeit der Funktion $f = (f_i) : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ genügt. Dabei seien im Folgenden die Komponenten von $x \in D$ mit x_j und die Komponenten von $x_0 \in [x] \subseteq D$ mit $(x_0)_j$ bezeichnet.

Wegen

$$\begin{aligned} & f_i(x_1, \dots, x_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_n) \\ &= f_i(x_1, \dots, x_n) - f_i((x_0)_1, x_2, \dots, x_n) + f_i((x_0)_1, x_2, \dots, x_n) \\ & \quad - f_i((x_0)_1, (x_0)_2, x_3, \dots, x_n) + f_i((x_0)_1, (x_0)_2, x_3, \dots, x_n) \\ & \quad - + \dots + f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_{n-1}, x_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_n) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_{j-1}, x_j, \dots, x_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_j, x_{j+1}, \dots, x_n)}{x_j - (x_0)_j} \\ & \quad \cdot (x_j - (x_0)_j) \end{aligned}$$

ist $\delta f(x; x_0)$ mit

$$\delta f(x; x_0)_{ij} := \begin{cases} \frac{f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_{j-1}, x_j, \dots, x_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_j, x_{j+1}, \dots, x_n)}{x_j - (x_0)_j} & \text{für } x_j \neq (x_0)_j \\ c_{ij} & \text{für } x_j = (x_0)_j \end{cases}$$

für beliebiges $c_{ij} \in \mathbb{R}$ eine Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0 . Falls $f'(x_0)$ existiert, so setzen wir

$$c_{ij} := \lim_{x_j \rightarrow (x_0)_j} \delta f(x; x_0)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}((x_0)_1, \dots, (x_0)_j, x_{j+1}, \dots, x_n).$$

Indem wir für $\delta f([x]; x_0)_{ij}$ jeweils ein Intervall wählen, das die Menge

$$\left\{ \delta f(x; x_0)_{ij} \mid x \in [x] \right\}$$

einschließt, erhalten wir eine Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0)$ erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Eigenschaften

Für die Berechnung einer Intervallsteigung $\delta f([x]; x_0)$ erster Ordnung haben wir zuvor verschiedene Möglichkeiten kennengelernt, nämlich die Auswertung der Jacobi-Matrix, die Einschließung von

$$\left(\int_0^1 f'(x_0 + t(x - x_0)) dt \right)$$

und die Methode nach Hansen. Anhand des folgenden Beispiels wollen wir die letzteren beiden Methoden vergleichen.

Beispiel 1.3.27 Wir betrachten die Funktion

$$f : [x] \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad f = (f_1, f_2),$$

mit

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= (x_1^2 + 1)x_2^2, \\ f_2(x_1, x_2) &= x_1. \end{aligned}$$

und

$$[x] = \left(\begin{array}{c} [-1, 1] \\ [-1, 1] \end{array} \right).$$

Ferner sei $x_0 = (0, 0)$.

Wir erhalten

$$f'(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1x_2^2 & 2(x_1^2 + 1)x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit

$$\int_0^1 \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \left(t \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) dt = \frac{1}{2} x_1 x_2^2,$$

$$\int_0^1 \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \left(t \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) dt = \left(\frac{1}{2} x_1^2 + 1 \right) x_2,$$

$$\int_0^1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \left(t \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) dt = 1,$$

$$\int_0^1 \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \left(t \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) dt = 0.$$

Also erhalten wir nach obiger Methode b) für die Steigungsfunktion erster Ordnung

$$\delta f(x; x_0) = \left(\int_0^1 f'(x_0 + t(x - x_0)) dt \right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}x_1x_2^2 & (\frac{1}{2}x_1^2 + 1)x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit die Intervallsteigung erster Ordnung

$$\delta f([x]; x_0) = \begin{pmatrix} [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] & [-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}] \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nun berechnen wir eine Steigungsfunktion sowie eine Intervallsteigung erster Ordnung nach Hansens Methode:

$$\begin{aligned} \frac{f_1(x_1, x_2) - f_1(0, x_2)}{x_1 - 0} &= x_1x_2^2, & \frac{f_1(0, x_2) - f_1(0, 0)}{x_2 - 0} &= x_2, \\ \frac{f_2(x_1, x_2) - f_2(0, x_2)}{x_1 - 0} &= 1, & \frac{f_2(0, x_2) - f_2(0, 0)}{x_2 - 0} &= 0. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\delta f(x; x_0) = \begin{pmatrix} x_1x_2^2 & x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\delta f([x]; x_0) = \begin{pmatrix} [-1, 1] & [-1, 1] \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Bemerkung 1.3.28 Ändert man in Hansens Methode die eingefügten Summanden z. B. zu

$$\begin{aligned} & f_i(x_1, \dots, x_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_n) \\ &= f_i(x_1, \dots, x_n) - f_i(x_1, \dots, x_{n-1}, (x_0)_n) + f_i(x_1, \dots, x_{n-1}, (x_0)_n) \\ &\quad - f_i(x_1, \dots, x_{n-2}, (x_0)_{n-1}, (x_0)_n) + f_i(x_1, \dots, x_{n-2}, (x_0)_{n-1}, (x_0)_n) \\ &\quad - + \dots + f_i(x_1, (x_0)_2, \dots, (x_0)_n) - f_i((x_0)_1, \dots, (x_0)_n), \end{aligned}$$

so erhält man eine andere Steigungsfunktion $\delta f(x; x_0)$ erster Ordnung von f bezüglich x_0 , nämlich

$$\begin{aligned} & \delta f(x; x_0)_{ij} \\ &= \frac{f_i(x_1, \dots, x_{j-1}, x_j, (x_0)_{j+1}, \dots, (x_0)_n) - f_i(x_1, \dots, x_{j-1}, (x_0)_j, (x_0)_{j+1}, \dots, (x_0)_n)}{x_j - (x_0)_j}. \end{aligned}$$

Durch Permutation ergeben sich entsprechend für eine Funktion $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ in jeder Komponente f_i genau $n!$ Möglichkeiten zur Bildung einer Hansen-Steigungsfunktion, insgesamt also $n \cdot n!$ Möglichkeiten.

Beispiel 1.3.27 (*Fortsetzung*):

Wir betrachten die Funktion f aus obigem Beispiel und berechnen eine Hansen-Steigungsfunktion von f bezüglich $x_0 = (0, 0)$ mit Hilfe anderer eingefügter Summanden (siehe Bemerkung 1.3.28), und zwar

$$\delta f(x, x_0)_{ij} = \frac{f_i(x_1, \dots, x_{j-1}, x_j, 0, \dots, 0) - f_i(x_1, \dots, x_{j-1}, 0, \dots, 0)}{x_j - 0}.$$

Wir erhalten

$$\frac{f_1(x_1, 0) - f_1(0, 0)}{x_1 - 0} = 0,$$

$$\frac{f_1(x_1, x_2) - f_1(x_1, 0)}{x_2 - 0} = (x_1^2 + 1)x_2,$$

$$\frac{f_2(x_1, 0) - f_2(0, 0)}{x_1 - 0} = 1$$

sowie

$$\frac{f_2(x_1, x_2) - f_2(x_1, 0)}{x_2 - 0} = 0.$$

Damit ergibt sich als Steigungsfunktion erster Ordnung nach Hansens Methode

$$\delta f(x; x_0) = \begin{pmatrix} 0 & (x_1^2 + 1)x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit als Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x] = ([-1, 1], [-1, 1])^T$ bezüglich x_0

$$\delta f([x]; x_0) = \begin{pmatrix} 0 & [-2, 2] \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

□

Aus Beispiel 1.3.27 erkennen wir:

Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen von Funktionen mehrerer Veränderlicher sind nicht eindeutig. Je nach Methode der Berechnung erhält man im Allgemeinen unterschiedliche Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen.

Außerdem gilt eine Symmetrieeigenschaft wie in Satz 1.3.5 nicht für eine Steigungsfunktion einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ mehrerer Veränderlicher. Ist $\delta f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \mapsto \delta f(x; x_0)$, für jedes $x_0 \in [x]$ eine Steigungsfunktion erster Ordnung von f und $\tilde{\delta} f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $x \mapsto \tilde{\delta} f(x; x_0) := \delta f(x_0; x)$ die Funktion, die durch Vertauschen von x und x_0 entsteht, dann gilt im Allgemeinen $\delta f(x; x_0) \neq \tilde{\delta} f(x; x_0)$. Dies zeigt das folgende Beispiel.

Beispiel 1.3.29 Es sei

$$f : [x] \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad f = (f_1, f_2),$$

wie in Beispiel 1.3.27 und $x_0 = ((x_0)_1, (x_0)_2)$.

Für die Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich x_0 erhalten wir nach Hansens Methode

$$\frac{f_1(x_1, x_2) - f_1((x_0)_1, x_2)}{x_1 - (x_0)_1} = (x_1 + (x_0)_1) \cdot x_2^2,$$

$$\frac{f_1((x_0)_1, x_2) - f_1((x_0)_1, (x_0)_2)}{x_2 - (x_0)_2} = ((x_0)_1^2 + 1) \cdot (x_2 + (x_0)_2),$$

$$\frac{f_2(x_1, x_2) - f_2((x_0)_1, x_2)}{x_1 - (x_0)_1} = 1,$$

$$\frac{f_2((x_0)_1, x_2) - f_2((x_0)_1, (x_0)_2)}{x_2 - (x_0)_2} = 0.$$

Folglich ist

$$\delta f(x; x_0) = \begin{pmatrix} (x_1 + (x_0)_1) \cdot x_2^2 & ((x_0)_1^2 + 1) \cdot (x_2 + (x_0)_2) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \neq \tilde{\delta} f(x; x_0).$$

□

Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen zweiter Ordnung

Definition 1.3.30 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $x_0, x_1 \in D$ beliebig, aber fest, mit $x_0 \neq x_1$. Eine Funktion $\delta_2 f : D \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$f(x) = f(x_0) + \delta f(x_1; x_0)(x - x_0) + (x - x_1)^T \delta_2 f(x; x_1, x_0)(x - x_0), \quad x \in D, \quad (1.14)$$

heißt *Steigungsfunktion zweiter Ordnung von f bezüglich x_1 und x_0* .

Dabei ist $\delta f(x_1; x_0) \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ der Wert einer Steigungsfunktion $\delta f(x; x_0)$ erster Ordnung von f an der Stelle $x = x_1$.

Eine Einschließung $\delta_2 f([x]; x_1, x_0)$ von $\delta f(x; x_1, x_0)$ auf dem Intervall $[x]$, d. h. ein $\delta_2 f([x]; x_1, x_0) \in \mathbb{IR}^{n \times n}$ mit

$$\delta_2 f([x]; x_1, x_0) \supseteq \{\delta_2 f(x; x_1, x_0) \mid x \in [x]\},$$

nennen wir *Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0* .

Für Funktionen $f = (f_i) : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ wird eine Steigungsfunktion zweiter Ordnung definiert, indem die Gleichung (1.14) komponentenweise angewendet wird.

Bemerkung 1.3.31 Ist $\delta_2 f([x]; x_1, x_0)$ eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$, so gilt wie in Bemerkung 1.3.22 mit Hilfe der Einschließungseigenschaft 1.2.3 sowie der Subdistributivität der Intervallrechnung

$$\begin{aligned} f(x) &\in f(x_0) + \left(\delta f(x_1; x_0) + ([x] - x_1)^T \delta_2 f([x]; x_1, x_0) \right) ([x] - x_0) \\ &\subseteq f(x_0) + \delta f(x_1; x_0) ([x] - x_0) + ([x] - x_1)^T \delta_2 f([x]; x_1, x_0) ([x] - x_0) \end{aligned}$$

für alle $x \in [x]$.

1.3.4 Anwendungen

Neben der Bestimmung bzw. Einschließung des Wertebereichs einer Funktion und neben Anwendungen in der globalen Optimierung (siehe Kapitel 5) können Steigungsfunktionen und Intervallsteigungen auch zum Existenznachweis von Nullstellen einer Funktion verwendet werden. Wir geben im Folgenden einige Existenzsätze an, in denen Steigungsfunktionen bzw. Intervallsteigungen verwendet werden.

Basierend auf dem Fixpunktsatz von Brouwer gilt der folgende Satz von Moore.

Satz 1.3.32 (Satz von Moore, [26])

Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig auf der offenen, konvexen Menge D und $[x] \subseteq D$. Für festes $x_0 \in [x]$ sei $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Gibt es eine nichtsinguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass der *Krawczyk-Operator*

$$K([x], x_0, A) := x_0 - A f(x_0) + \left(I - A \delta f([x]; x_0) \right) ([x] - x_0)$$

die Inklusion

$$K([x], x_0, A) \subseteq [x], \quad (1.15)$$

erfüllt, dann enthält $[x]$ eine Nullstelle von f .

Ein weiterer Satz, der die Existenz einer Nullstelle von $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ garantiert, ist der Satz von Miranda.

Satz 1.3.33 (Miranda, [25])

Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig, $x_0 \in D$ und $[x] = [x_0 - s, x_0 + t] \subseteq D$ mit $s, t \in \mathbb{R}^n$, $s_i \geq 0, t_i \geq 0$. Die sich gegenüberliegenden, parallelen Seiten von $[x]$ seien mit

$$[x]^{i,+} := \{x \in [x], x_i = (x_0)_i + t_i\} \quad (1.16)$$

und

$$[x]^{i,-} := \{x \in [x], x_i = (x_0)_i - s_i\} \quad (1.17)$$

bezeichnet. Falls für alle $i = 1, \dots, n$

$$f_i(x) \cdot f_i(y) \leq 0 \quad \forall x \in [x]^{i,+}, \forall y \in [x]^{i,-}, \quad (1.18)$$

gilt, dann besitzt f (mindestens) eine Nullstelle $x^* \in [x]$.

Im Satz von Miranda tauchen keine Steigungen auf. Zur Überprüfung von (1.18) ist es jedoch unpraktikabel, im Funktionsausdruck von f die Variable x durch das Intervall $[x]^{i,+}$ bzw. $[x]^{i,-}$ zu ersetzen und dadurch eine intervallmäßige Auswertung zu gewinnen (siehe [27]). Daher werden hinreichende Bedingungen benötigt, unter denen die Voraussetzungen des Satzes von Miranda erfüllt sind. Dazu können Steigungsfunktionen bzw. Intervallsteigungen verwendet werden, worauf wir im Folgenden kurz eingehen.

Zunächst geben wir eine leichte Verallgemeinerung des Satzes von Moore/Kioustelidis aus [27] an.

Satz 1.3.34 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig, $x_0 \in D$ und $[x] = [x_0 - s, x_0 + t] \subseteq D$ mit $s, t \in \mathbb{R}^n$, $s_i \geq 0$, $t_i \geq 0$. Ferner seien die Intervallvektoren $[x]^{i,+}$ und $[x]^{i,-}$ wie in (1.16) bzw. (1.17) definiert sowie $e^i := (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^t \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \dots, n$. Die Intervallsteigungen erster Ordnung $\delta f([x]^{i,-}; x_0 - s_i e^i) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^{n \times n}$ von f auf $[x]^{i,-}$ bezüglich $x_0 - s_i e^i$ und $\delta f([x]^{i,+}; x_0 + t_i e^i) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^{n \times n}$ von f auf $[x]^{i,+}$ bezüglich $x_0 + t_i e^i$ seien gegeben, und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine nichtsinguläre Matrix.

Wir setzen

$$[l]^{i,+} := \left(A f(x_0 + t_i e^i) \right)_i + \sum_{j \neq i} \left(A \delta f([x]^{i,+}; x_0 + t_i e^i) \right)_{ij} \cdot [-s_j, t_j]$$

und

$$[l]^{i,-} := \left(A f(x_0 - s_i e^i) \right)_i + \sum_{j \neq i} \left(A \delta f([x]^{i,-}; x_0 - s_i e^i) \right)_{ij} \cdot [-s_j, t_j].$$

Gilt für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$

$$\sup [l]^{i,-} \leq 0 \leq \inf [l]^{i,+} \quad (1.19)$$

oder

$$\sup [l]^{i,+} \leq 0 \leq \inf [l]^{i,-}, \quad (1.20)$$

so erfüllt die Funktion $g(x) := A \cdot f(x)$ auf $[x]$ die Voraussetzungen des Satzes von Miranda.

Eine weitere hinreichende Bedingung für die Voraussetzungen des Satzes von Miranda liefert der folgende, in [9] untersuchte Test.

Satz 1.3.35 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig, $x_0 \in D$ und $[x] = [x_0 - s, x_0 + t] \subseteq D$ mit $s, t \in \mathbb{R}^n$, $s_i \geq 0$, $t_i \geq 0$. Ferner seien $\delta f([x]; x_0) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 sowie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine nichtsinguläre Matrix.

Wir setzen

$$[m]^{i,\pm} := \left(A f(x_0) \right)_i + \left(A \delta f([x]; x_0) \right)_i \cdot \left([x]^{i,\pm} - x_0 \right),$$

wobei $(\dots)_i$ die i -te Zeile einer Matrix bzw. eines Vektors bezeichne und $[x]^{i,\pm}$ wie in (1.16) bzw. (1.17) definiert sei.

Gilt für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$

$$\sup [m]^{i,-} \leq 0 \leq \inf [m]^{i,+} \quad (1.21)$$

oder

$$\sup [m]^{i,+} \leq 0 \leq \inf [m]^{i,-}, \quad (1.22)$$

so erfüllt die Funktion $g(x) := A \cdot f(x)$ auf $[x]$ die Voraussetzungen des Satzes von Miranda.

Zusammenhänge

Zwischen den Sätzen von Moore und Miranda sowie den Tests von Moore/Kioustelidis (Satz 1.3.34) und Frommer/Lang/Schnurr (Satz 1.3.35) können Zusammenhänge gefunden werden, so dass eine Art "Hierarchie" zwischen den Sätzen formuliert werden kann.

In [43] wird gezeigt, dass wenn die Voraussetzungen des Satzes von Moore erfüllt sind, dann auch die Voraussetzungen des Satzes von Miranda für die Funktion

$$g(x) := f'(x_0)^{-1} f(x)$$

erfüllt sind.

Zusammenhänge zwischen dem Satz von Moore und den Tests von Moore/Kioustelidis und Frommer/Lang/Schnurr findet man in [9], [10] und [41]. Eine Anwendung dieser Aussagen bei linearen Komplementaritätsproblemen liefert [40].

Bemerkung 1.3.36 Es bestehen ebenfalls Zusammenhänge zwischen dem Satz von Kantorovich und den Sätzen von Moore und Miranda (siehe [2], [31], [34], [42], [45]), auf die wir hier allerdings nicht näher eingehen. Eine Verallgemeinerung des Satzes von Miranda sowie einiger Zusammenhänge findet man in [3] und [24].

Kapitel 2

Automatische Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung für differenzierbare Funktionen einer Variablen

In diesem und den folgenden Kapiteln gehen wir stets davon aus, dass eine Funktion durch einen Funktionsausdruck im Sinne von [1] gegeben ist, d. h. im Funktionsausdruck treten nur endlich viele Operanden, Operationen und Standardfunktionen auf und die entsprechenden intervallmäßigen Operationen seien definiert. Ferner existiere für $[x] \subseteq D$ jeweils die intervallmäßige Auswertung $f([x])$. Zunächst betrachten wir differenzierbare Funktionen einer Variablen.

Unser Ziel ist es, für eine Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x] \subseteq D$ bezüglich x_1 und x_0 zu berechnen, so dass wir nach Bemerkung 1.3.22 eine Wertebereichseinschließung der Form

$$f(x) \in f(x_0) + \delta f(x_1, x_0) \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 f([x]; x_1, x_0) \cdot ([x] - x_1) \cdot ([x] - x_0)$$

für alle $x \in [x]$ erhalten. Die Berechnung der Intervallsteigung soll simultan zur Auswertung der Funktion f durchgeführt werden, ohne dass eine explizite Formel für eine Steigungsfunktion zweiter Ordnung von f bezüglich x_1 und x_0 benötigt wird.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels gehen wir auf die Grundlagen der automatischen Differentiation sowie der automatischen Berechnung von Intervallsteigungen erster Ordnung ein. Ferner beschreiben wir, was bereits in der Literatur über die Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung angegeben wurde. Der zweite Abschnitt behandelt die automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung, bevor wir schließlich auf die Berechnung von Intervallsteigungen höherer als zweiter Ordnung eingehen.

2.1 Automatische Differentiation und automatische Berechnung von Intervallsteigungen

Wir betrachten die stetig differenzierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x) = \frac{x}{x^2 + 1}, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.1)$$

f ist durch einen Funktionsausdruck gegeben, der z. B. auf die Weise

$$\begin{aligned} f_1(x) &= x, \\ f_2(x) &= \text{sqr}(f_1(x)), \\ f_3(x) &= 1, \\ f_4(x) &= f_2(x) + f_3(x), \\ f(x) &= \frac{f_1(x)}{f_4(x)}, \end{aligned}$$

zusammengesetzt werden kann, wobei $\text{sqr}(f_1(x)) := (f_1(x))^2$ sei.

Automatische Differentiation

Mit Hilfe von automatischer Differentiation [35] können Werte der Ableitung u' einer Funktion $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ simultan zur Auswertung von u berechnet werden, ohne dass eine explizite Formel für u' benötigt wird. Dazu werden Paare der Form $\mathcal{U} = (u, u')$ mit $u, u' \in \mathbb{R}$ betrachtet, wobei u den Funktionswert $u(x)$ und u' den Wert $u'(x)$ der Ableitung an der Stelle $x \in \mathbb{R}$ repräsentiert. Mit Hilfe von Differentiationsregeln wird für diese Paare eine Arithmetik definiert, und zwar sei für $\mathcal{U} = (u, u')$ und $\mathcal{V} = (v, v')$

$$\begin{aligned} \mathcal{U} + \mathcal{V} &:= (u + v, u' + v'), \\ \mathcal{U} - \mathcal{V} &:= (u - v, u' - v'), \\ \mathcal{U} \cdot \mathcal{V} &:= (u \cdot v, u'v + uv'), \\ \mathcal{U} / \mathcal{V} &:= \left(u/v, (u' - u/v \cdot v')/v \right) \quad \text{für } v \neq 0. \end{aligned}$$

Für eine stetig differenzierbare Funktion $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist nach der Kettenregel

$$\varphi(\mathcal{U}) := (\varphi(u), u' \cdot \varphi'(u)).$$

Der Variablen x , genauer der Funktion $f(x) = x$, entspricht wegen $\frac{dx}{dx} = 1$ das Paar $\mathcal{X} = (x, 1)$. Einer Konstanten $c \in \mathbb{R}$ bzw. einer konstanten Funktion $f(x) = c$ entspricht wegen $\frac{dc}{dx} = 0$ das Paar $\mathcal{C} = (c, 0)$.

Beispiel 2.1.1 Die Auswertung der Funktion f aus (2.1) an der Stelle $x = 2$ mit Hilfe der obigen Operationen ergibt

$$\begin{aligned} f(\mathcal{X}) = (f, f') &= (x, 1) / (\text{sqr}((x, 1)) + (1, 0)) \\ &= (2, 1) / (\text{sqr}((2, 1)) + (1, 0)) \\ &= (2, 1) / ((4, 4) + (1, 0)) \\ &= (2, 1) / (5, 4) \\ &= \left(\frac{2}{5}, -\frac{3}{25}\right), \end{aligned}$$

d. h. $f(2) = \frac{2}{5}$ und $f'(2) = -\frac{3}{25}$.

Mit einer Erweiterung der automatischen Differentiation können wir Einschließungen des Wertebereichs der Funktion f sowie des Wertebereichs der Ableitung f' auf einem Intervall $[x]$ berechnen. Dazu werden als Komponenten der Paare Intervalle verwendet, und die auftretenden Operationen und Funktionsauswertungen werden durch die entsprechenden Intervalloperationen bzw. Funktionsauswertungen ersetzt.

Beispiel 2.1.2 Wir wollen für f aus (2.1) Einschließungen der Funktionswerte und der Ableitungswerte auf dem Intervall $[x] = [1, 3]$ berechnen. Automatische Differentiation liefert

$$\begin{aligned} f([x], 1) &= ([x], [1, 1]) / (\text{sqr}([x], [1, 1]) + ([1, 1], [0, 0])) \\ &= ([1, 3], [1, 1]) / (\text{sqr}([1, 3], [1, 1]) + ([1, 1], [0, 0])) \\ &= ([1, 3], [1, 1]) / (([1, 9], [2, 6]) + ([1, 1], [0, 0])) \\ &= ([1, 3], [1, 1]) / ([2, 10], [2, 6]) \\ &= \left(\left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right], \left([1, 1] - \left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right] \cdot [2, 6]\right) / [2, 10]\right) \\ &= \left(\left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right], \left[-4, \frac{2}{5}\right]\right). \end{aligned}$$

Damit ist

$$\{f(x), x \in [x]\} \subseteq \left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right]$$

und

$$\{f'(x), x \in [x]\} \subseteq \left[-4, \frac{2}{5}\right].$$

Automatische Differentiation lässt sich auch zur Berechnung von Ableitungen höherer Ordnung sowie für Funktionen mehrerer Veränderlicher durchführen. Ebenso kann an Stelle der zuvor beschriebenen "Vorwärtsmethode" auch eine "Rückwärtsmethode" zur automatischen Differentiation definiert werden. Details findet man in [8] und [11].

Automatische Berechnung von Intervallsteigungen erster Ordnung

Analog zur automatischen Differentiation führen Krawczyk und Neumaier [22] eine Arithmetik zur automatischen Berechnung von Intervallsteigungen erster Ordnung ein. Die Arithmetik wird von Ratz [38] für die Auswertung einiger Standardfunktionen erweitert. Die automatische Steigungsberechnung ermöglicht die Berechnung von Intervallsteigungen erster Ordnung, ohne eine explizite Formel für eine Steigungsfunktion erster Ordnung zu benötigen.

Zur automatischen Berechnung von Intervallsteigungen erster Ordnung verwendet Ratz [38] *Steigungstupel erster Ordnung*.

Definition 2.1.3 Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $[x] \subseteq D$ und $x_0 \in [x]$. Ein Tripel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U)$ mit $U_x, U_{x_0}, \delta U \in \mathbb{IR}$ und

$$\begin{aligned} u(x) &\in U_x, \\ u(x_0) &\in U_{x_0}, \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U \cdot (x - x_0), \end{aligned}$$

für alle $x \in [x]$ heißt *Steigungstupel erster Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_0* .

Ist $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U)$ ein Steigungstupel erster Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_0 , so ist U_x eine Einschließung des Wertebereichs von u auf $[x]$, U_{x_0} eine Einschließung des Funktionswerts $u(x_0)$ und δU eine Intervallsteigung von u auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Es seien $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U)$ und $\mathcal{V} = (V_x, V_{x_0}, \delta V)$ Steigungstupel erster Ordnung von u bzw. v auf dem Intervall $[x]$ bezüglich x_0 . Die Operationen $+$, $-$, \cdot , $/$ für Steigungstupel erster Ordnung werden in [38] durch

$$\begin{aligned} \mathcal{U} + \mathcal{V} &:= (U_x + V_x, U_{x_0} + V_{x_0}, \delta U + \delta V), \\ \mathcal{U} - \mathcal{V} &:= (U_x - V_x, U_{x_0} - V_{x_0}, \delta U - \delta V), \\ \mathcal{U} \cdot \mathcal{V} &:= (U_x \cdot V_x, U_{x_0} \cdot V_{x_0}, U_x \cdot \delta V + V_{x_0} \cdot \delta U), \\ \mathcal{U}/\mathcal{V} &:= (U_x/V_x, U_{x_0}/V_{x_0}, (\delta U - U_{x_0}/V_{x_0} \cdot \delta V)/V_x) \quad \text{für } 0 \notin V_x \end{aligned}$$

definiert. Für eine stetige Standardfunktion φ wird

$$\varphi(\mathcal{U}) := (\varphi(U_x), \varphi(U_{x_0}), \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U)$$

gesetzt. Dabei ist $\varphi(U_x) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung von $\varphi(u_x)$ für alle $u_x \in U_x$ und $\varphi(U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung von $\varphi(u_{x_0})$ für alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$. Ferner schließt

$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{R}$ für jeden Wert $u_{x_0} \in U_{x_0}$ eine Intervallsteigung $\delta\varphi(U_x; u_{x_0})$ erster Ordnung von φ auf U_x bezüglich u_{x_0} ein. Insbesondere ist also

$$\text{sqr}(\mathcal{U}) = (\text{sqr}(U_x), \text{sqr}(U_{x_0}), (U_x + U_{x_0}) \cdot \delta U).$$

In [22] bzw. [38] wird gezeigt, dass die Resultate der obigen Operationen $\mathcal{U} \circ \mathcal{V}$, $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$, und $\varphi(\mathcal{U})$ jeweils wieder Steigungstupel erster Ordnung der Funktionen $u \circ v$ bzw. $\varphi(u)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 sind. Unter Verwendung, dass $([x], x_0, 1)$ ein Steigungstupel der Funktion $f(x) = x$ auf $[x]$ bezüglich x_0 ist und dass $(c, c, 0)$ ein Steigungstupel einer konstanten Funktion $f(x) = c \in \mathbb{R}$ ist, kann dann die automatische Steigungsberechnung durchgeführt werden.

Beispiel 2.1.4 Wir wollen für f aus (2.1) mit Hilfe von automatischer Steigungsberechnung eine Intervallsteigung von f auf $[x] = [1, 3]$ bezüglich $x_0 = 2$ berechnen. Es ist

$$\begin{aligned} & f\left([x], x_0, 1\right) \\ &= ([1, 3], [2, 2], [1, 1]) / \left(\text{sqr}([1, 3], [2, 2], [1, 1]) + ([1, 1], [1, 1], [0, 0])\right) \\ &= ([1, 3], [2, 2], [1, 1]) / \left(\left([1, 9], [4, 4], [3, 5]\right) + ([1, 1], [1, 1], [0, 0])\right) \\ &= ([1, 3], [2, 2], [1, 1]) / \left([2, 10], [5, 5], [3, 5]\right) \\ &= \left(\left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right], \left[\frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right], \left([1, 1] - \left[\frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right] \cdot [3, 5]\right) / [2, 10]\right) \\ &= \left(\left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right], \left[\frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right], \left[-\frac{1}{2}, -\frac{1}{50}\right]\right). \end{aligned}$$

Damit ist

$$\{f(x), x \in [x]\} \subseteq \left[\frac{1}{10}, \frac{3}{2}\right],$$

$$f(x_0) \in \left[\frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right],$$

und ferner ist

$$\delta f([x]; x_0) = \left[-\frac{1}{2}, -\frac{1}{50}\right]$$

eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[x] = [1, 3]$ bezüglich $x_0 = 2$.

Wir wollen nun die Technik aus [22] und [38] erweitern, um eine automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung zu ermöglichen.

Automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung

In [46] geben Shen und Wolfe eine Arithmetik an, die die automatische Berechnung einer Intervallsteigung $\delta_2 f([x]; x_0)$ zweiter Ordnung einer Funktion f auf $[x]$ bezüglich x_0 ermöglicht. Kolev [21] verbessert diese Technik, indem er für konvexe bzw. konkave Standardfunktionen, die im Funktionsausdruck von f auftreten, eine optimale Einschließung der Steigungsfunktionen erster und zweiter Ordnung verwendet.

Während in [21] und [46] Intervallsteigungen $\delta_2 f([x]; x_0)$ zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 betrachtet werden, führen wir in diesem Abschnitt eine Arithmetik ein, die die automatische Berechnung von Intervallsteigungen $\delta_2 f([x]; x_1, x_0)$ bezüglich der im Allgemeinen unterschiedlich wählbaren Punkte x_1 und x_0 ermöglicht. Ferner gehen wir auf die automatische Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung ein.

In [21] wird zur Berechnung von Intervallsteigungen erster und zweiter Ordnung einer Funktion f der Funktionsausdruck von f durchlaufen. Die dabei gewonnenen Zwischenergebnisse für Teilfunktionen des Funktionsausdrucks werden exakt berechnet. Bei Berechnungen auf einem Computer kann man im Allgemeinen das Ergebnis der Rechnung nicht exakt darstellen, sondern nur in einem Intervall einschließen. Wir wollen in unserer Arithmetik Rundungsfehler berücksichtigen und erhalten somit Einschließungen für diese Zwischenergebnisse. Insbesondere sind also sämtliche Zwischenergebnisse für den Funktionswert und die Steigungen im Allgemeinen nicht als reelle Zahlen, sondern als Intervalle mit positivem Durchmesser gegeben. Damit ergeben sich für unsere Arithmetik zur automatischen Steigungsberechnung im Vergleich zu [21] eine Vielzahl neuer Fälle.

2.2 Automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung

2.2.1 Steigungstupel zweiter Ordnung

Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar, $[x] \subseteq D$ und $x_0, x_1 \in [x]$ nicht notwendigerweise verschieden. Dann ist nach Korollar 1.3.9 bzw. Bemerkung 1.3.24 die Steigungsfunktion $\delta_2 u(x; x_1, x_0)$ zweiter Ordnung von u bezüglich x_1 und x_0 stetig auf $[x]$. Folglich existiert eine Intervallsteigung $\delta_2 u([x]; x_1, x_0)$ zweiter Ordnung von u auf $[x]$. Dies führt uns zur Definition eines Steigungstupels zweiter Ordnung.

Definition 2.2.1 Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar, $[x] \subseteq D$ und $x_0, x_1 \in [x]$ beliebig, aber fest. Ein 7-Tupel

$$\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, U_{x_1}, \delta U_{x_1 x_0}, \delta U_{x x_0}, \delta U_{x x_1}, \delta_2 U)$$

mit $U_x, U_{x_0}, U_{x_1}, \delta U_{x_1 x_0}, \delta U_{xx_0}, \delta U_{xx_1}, \delta_2 U \in \mathbb{IR}, U_{x_0} \subseteq U_x, U_{x_1} \subseteq U_x$ und

$$\begin{aligned}
 u(x) &\in U_x, \\
 u(x_0) &\in U_{x_0}, \\
 u(x_1) &\in U_{x_1}, \\
 \delta u(x_1; x_0) &\in \delta U_{x_1 x_0}, \\
 u(x) - u(x_0) &\in \delta U_{xx_0} \cdot (x - x_0), \\
 u(x) - u(x_1) &\in \delta U_{xx_1} \cdot (x - x_1), \\
 u(x) - u(x_0) &\in \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0)
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

für alle $x \in [x]$ heißt *Steigungstupel zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0* .

Bemerkung 2.2.2 In (2.2) enthält U_x den Funktionswert $u(x)$ für jedes $x \in [x]$, U_{x_0} enthält den Funktionswert $u(x_0)$ und U_{x_1} enthält $u(x_1)$. Ferner ist $\delta U_{x_1 x_0}$ eine Einschließung von $\delta u(x_1; x_0)$ und δU_{xx_0} bzw. δU_{xx_1} sind Intervallsteigungen erster Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_0 bzw. x_1 . Außerdem ist $\delta_2 U$ eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0 . Folglich sind

$$\begin{aligned}
 u(x) &\in U_x, \\
 u(x) &\in U_{x_0} + \delta U_{xx_0} \cdot ([x] - x_0), \\
 u(x) &\in U_{x_1} + \delta U_{xx_1} \cdot ([x] - x_1), \\
 u(x) &\in U_{x_0} + \delta U_{x_1 x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 U \cdot ([x] - x_1) \cdot ([x] - x_0)
 \end{aligned}$$

jeweils Einschließungen des Wertebereichs von u auf $[x]$.

Bemerkung 2.2.3 Für $x = x_0$ sind die fünfte und die siebte Relation in (2.2) offenbar immer erfüllt. Ebenso sind die letzten beiden Inklusionen immer für $x = x_1$ erfüllt. Beim Nachweis dieser Relationen können wir daher o.B.d.A. $x \neq x_0$ bzw. $x \neq x_1$ annehmen, was wir im Folgenden jeweils stillschweigend tun werden.

Für konstante Funktionen sowie die Funktion $u(x) = x$ können Steigungstupel auf einfache Weise bestimmt werden. Offensichtlich gilt das folgende Lemma.

Lemma 2.2.4 a) $\mathcal{K} = (k, k, k, 0, 0, 0, 0)$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die konstante Funktion $u(x) \equiv k \in \mathbb{R}$ auf $[x]$ bezüglich $x_1 \in [x]$ und $x_0 \in [x]$.

b) $\mathcal{X} = ([x], x_0, x_1, 1, 1, 1, 0)$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die Funktion $u(x) = x$ auf $[x]$ bezüglich $x_1 \in [x]$ und $x_0 \in [x]$.

2.2.2 Operationen für Steigungstupel zweiter Ordnung

Definition 2.2.5 Es seien \mathcal{U} bzw. \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_1 \in [x]$ und $x_0 \in [x]$.

a) Die Addition bzw. Subtraktion $\mathcal{W} := \mathcal{U} \pm \mathcal{V}$ der Steigungstupel \mathcal{U} und \mathcal{V} sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \pm V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \pm V_{x_0}, \\ W_{x_1} &:= U_{x_1} \pm V_{x_1}, \\ \delta W_{x_1 x_0} &:= \delta U_{x_1 x_0} \pm \delta V_{x_1 x_0}, \\ \delta W_{xx_0} &:= \delta U_{xx_0} \pm \delta V_{xx_0}, \\ \delta W_{xx_1} &:= \delta U_{xx_1} \pm \delta V_{xx_1}, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \pm \delta_2 V. \end{aligned}$$

b) Die Multiplikation $\mathcal{W} := \mathcal{U} \cdot \mathcal{V}$ sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \cdot V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \cdot V_{x_0}, \\ W_{x_1} &:= U_{x_1} \cdot V_{x_1}, \\ \delta W_{x_1 x_0} &:= U_{x_1} \cdot \delta V_{x_1 x_0} + \delta U_{x_1 x_0} \cdot V_{x_0}, \\ \delta W_{xx_0} &:= U_x \cdot \delta V_{xx_0} + \delta U_{xx_0} \cdot V_{x_0}, \\ \delta W_{xx_1} &:= U_x \cdot \delta V_{xx_1} + \delta U_{xx_1} \cdot V_{x_1}, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \cdot V_{x_0} + U_x \cdot \delta_2 V + \delta U_{xx_1} \cdot \delta V_{x_1 x_0}. \end{aligned}$$

c) Die Division $\mathcal{W} := \mathcal{U} / \mathcal{V}$, wobei $0 \notin V_x$, sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x / V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} / V_{x_0}, \\ W_{x_1} &:= U_{x_1} / V_{x_1}, \\ \delta W_{x_1 x_0} &:= \left(\delta U_{x_1 x_0} - W_{x_0} \cdot \delta V_{x_1 x_0} \right) / V_{x_1}, \\ \delta W_{xx_0} &:= \left(\delta U_{xx_0} - W_{x_0} \cdot \delta V_{xx_0} \right) / V_x, \\ \delta W_{xx_1} &:= \left(\delta U_{xx_1} - W_{x_1} \cdot \delta V_{xx_1} \right) / V_x, \\ \delta_2 W &:= \left(\delta_2 U - W_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W_{xx_0} \cdot \delta V_{xx_1} \right) / V_{x_1}. \end{aligned}$$

d) Für eine zweimal stetig differenzierbare Funktion φ und ein Steigungstupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, U_{x_1}, \delta U_{x_1 x_0}, \delta U_{xx_0}, \delta U_{xx_1}, \delta_2 U)$ zweiter Ordnung von $u(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0 definieren wir $\mathcal{W} := \varphi(\mathcal{U})$ durch

$$\begin{aligned} W_x &:= \varphi(U_x), \\ W_{x_0} &:= \varphi(U_{x_0}), \\ W_{x_1} &:= \varphi(U_{x_1}), \\ \delta W_{x_1 x_0} &:= \delta \varphi(U_{x_1}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_1 x_0}, \\ \delta W_{xx_0} &:= \delta \varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{xx_0}, \\ \delta W_{xx_1} &:= \delta \varphi(U_x; U_{x_1}) \cdot \delta U_{xx_1}, \\ \delta_2 W &:= \delta \varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \delta_2 \varphi(U_x; U_{x_1}, U_{x_0}) \cdot \delta U_{xx_1} \cdot \delta U_{x_1 x_0}. \end{aligned}$$

Dabei seien $\varphi(U_x) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$, $\varphi(U_{x_0}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ bzw. $\varphi(U_{x_1}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ Einschließungen des Wertebereichs von φ auf U_x, U_{x_0} bzw. U_{x_1} . Ferner sei $\delta \varphi(U_{x_1}; U_{x_0}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ eine Einschließung der Menge

$$\{ \delta \varphi(u_{x_1}; u_{x_0}) \mid u_{x_1} \in U_{x_1}, u_{x_0} \in U_{x_0} \}, \quad (2.3)$$

$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0}\}, \quad (2.4)$$

$\delta\varphi(U_x; U_{x_1}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(u_x; u_{x_1}) \mid u_x \in U_x, u_{x_1} \in U_{x_1}\}, \quad (2.5)$$

und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_1}, U_{x_0}) \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta_2\varphi(u_x; u_{x_1}, u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_1} \in U_{x_1}, u_{x_0} \in U_{x_0}\}. \quad (2.6)$$

Nach Satz 1.3.5 und Satz 1.3.6 gilt dabei

$$\delta\varphi(a; a) = \varphi'(a) \quad \text{und} \quad \delta_2\varphi(a; a, a) = \frac{1}{2}\varphi''(a), \quad a \in \mathbb{R}, \quad (2.7)$$

sowie

$$\delta_2\varphi(b; a, a) = \delta_2\varphi(a; b, a) = \delta_2\varphi(a; a, b) = \frac{\delta\varphi(b; a) - \varphi'(a)}{b - a}, \quad a, b \in \mathbb{R}, \quad a \neq b. \quad (2.8)$$

Nach den Voraussetzungen für φ und \mathcal{U} sind die Mengen (2.3)-(2.6) beschränkt und können somit durch ein Intervall aus $\mathbb{I}\mathbb{R}$ eingeschlossen werden. Darauf gehen wir in Abschnitt 2.2.3 ein.

Satz 2.2.6 Es seien \mathcal{U} und \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_1 \in [x]$ und $x_0 \in [x]$.

Die Resultate $\mathcal{W} = (W_x, W_{x_0}, W_{x_1}, \delta W_{x_1 x_0}, \delta W_{x x_0}, \delta W_{x x_1}, \delta_2 W)$ der in Definition 2.2.5 eingeführten Operationen sind Steigungstupel zweiter Ordnung der jeweiligen Funktion $w = u \circ v$, $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ bzw. $w(x) = \varphi(u(x))$ auf $[x]$ bezüglich x_1 und x_0 , d. h. sie besitzen jeweils die Eigenschaft (2.2).

Beweis:

Da die Eigenschaften von W_{x_1} und $\delta W_{x x_1}$ analog zu den Eigenschaften von W_{x_0} bzw. $\delta W_{x x_0}$ nachgewiesen werden, führen wir den Beweis für erstere nicht durch.

Aus den folgenden Beweisen ergibt sich jeweils, dass alle Eigenschaften von \mathcal{U} und \mathcal{V} aus (2.2) benötigt werden.

Es sei jeweils $x \in [x]$ beliebig.

a) *Addition/Subtraktion:*

Es ist

$$w(x) = u(x) \pm v(x) \in U_x \pm V_x = W_x,$$

$$w(x) = u(x) \pm v(x) \in U_{x_0} \pm V_{x_0} = W_{x_0}.$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) \pm v(x) - (u(x_0) \pm v(x_0)) \\ &= (u(x) - u(x_0)) \pm (v(x) - v(x_0)) \\ &\in \delta U_{xx_0} \cdot (x - x_0) \pm \delta V_{xx_0} \cdot (x - x_0) \\ &= (\delta U_{xx_0} + \delta V_{xx_0}) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W_{xx_0} \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= (u(x) - u(x_0)) \pm (v(x) - v(x_0)) \\ &= (\delta u(x; x_0) \pm \delta v(x; x_0)) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

folgt

$$\delta w(x_1; x_0) = \delta u(x_1; x_0) \pm \delta v(x_1; x_0) \in \delta U_{x_1x_0} \pm \delta V_{x_1x_0} = \delta W_{x_1x_0}.$$

Schließlich ist

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) - \delta w(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \pm (v(x) - v(x_0) - \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0)) \\ &\in \delta_2 U \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0) \pm \delta_2 V \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0) \\ &= (\delta_2 U \pm \delta_2 V) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0), \end{aligned}$$

woraus mit $\delta_2 W := \delta_2 U \pm \delta_2 V$ die Behauptung folgt.

b) *Multiplikation:*

Es gilt

$$\begin{aligned} w(x) &= u(x) v(x) \in U_x \cdot V_x = W_x, \\ w(x_0) &= u(x_0) v(x_0) \in U_{x_0} \cdot V_{x_0} = W_{x_0}. \end{aligned}$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) v(x) - u(x_0) v(x_0) \\ &= u(x) v(x) - u(x) v(x_0) + u(x) v(x_0) - u(x_0) v(x_0) \\ &\in u(x) \cdot \delta V_{xx_0} \cdot (x - x_0) + \delta U_{xx_0} \cdot v(x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= (u(x) \cdot \delta V_{xx_0} + \delta U_{xx_0} \cdot v(x_0)) \cdot (x - x_0) \\ &\subseteq (U_x \cdot \delta V_{xx_0} + \delta U_{xx_0} \cdot V_{x_0}) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W_{xx_0} \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) v(x) - u(x) v(x_0) + u(x) v(x_0) - u(x_0) v(x_0) \\ &= \left(u(x) \cdot \delta v(x; x_0) + \delta u(x; x_0) \cdot v(x_0) \right) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned}\delta w(x_1; x_0) &= u(x_1) \cdot \delta v(x_1; x_0) + \delta u(x_1; x_0) \cdot v(x_0) \\ &\in U_{x_1} \cdot \delta V_{x_1 x_0} + \delta U_{x_1 x_0} \cdot V_{x_0} \\ &= \delta W_{x_1 x_0}.\end{aligned}$$

Schließlich ist

$$\begin{aligned}& w(x) - w(x_0) - \delta w(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= u(x)v(x) - u(x_0)v(x_0) - u(x_1) \cdot \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\quad - \delta u(x_1; x_0) \cdot v(x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= u(x)(v(x) - v(x_0)) + v(x_0)(u(x) - u(x_0)) \\ &\quad - u(x_1) \cdot \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot v(x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= u(x)(v(x) - v(x_0)) - u(x_1) \cdot \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + v(x_0) \left(u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) \\ &= u(x)(v(x) - v(x_0)) - \left(u(x) - u(x_0) + u(x_1) \right) \cdot \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + v(x_0) \left(u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) \\ &= u(x) \left(v(x) - v(x_0) - \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) \\ &\quad + \left(u(x) - u(x_1) \right) \cdot \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + v(x_0) \left(u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) \\ &\in \left(U_x \cdot \delta_2 V + V_{x_0} \cdot \delta_2 U + \delta U_{xx_1} \cdot \delta V_{x_1 x_0} \right) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0).\end{aligned}$$

c) *Division:*

Es ist

$$\begin{aligned}w(x) &= u(x)/v(x) \in U_x/V_x = W_x, \\ w(x_0) &= u(x_0)/v(x_0) \in U_{x_0}/V_{x_0} = W_{x_0}.\end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned}& w(x) - w(x_0) \\ &= u(x)/v(x) - u(x_0)/v(x_0) \\ &= \left(u(x)v(x_0) - u(x_0)v(x_0) + u(x_0)v(x_0) - u(x_0)v(x) \right) / (v(x)v(x_0)) \\ &= \left(u(x) - u(x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot (v(x) - v(x_0)) \right) / v(x) \\ &\in \left(\delta U_{xx_0} - u(x_0)/v(x_0) \cdot \delta V_{xx_0} \right) / v(x) \cdot (x - x_0) \\ &\subseteq \left(\delta U_{xx_0} - U_{x_0}/V_{x_0} \cdot \delta V_{xx_0} \right) / V_x \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W_{xx_0} \cdot (x - x_0).\end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \left(u(x) - u(x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot (v(x) - v(x_0)) \right) / v(x) \\ &= \left(\delta u(x; x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot \delta v(x; x_0) \right) / v(x) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

folgt

$$\delta w(x_1; x_0) \in \left(\delta U_{x_1 x_0} - U_{x_0} / V_{x_0} \cdot \delta V_{x_1 x_0} \right) / V_{x_1} = \delta W_{x_1 x_0}.$$

Ferner gilt wegen

$$w(x) - w(x_0) = u(x)/v(x) - u(x_0)/v(x_0),$$

dass

$$\left(w(x) - w(x_0) \right) v(x) = u(x) - u(x_0)/v(x_0) \cdot v(x)$$

ist (nach Voraussetzung ist $v(x) \neq 0$). Mit

$$v(x) = v(x_1) + v(x) - v(x_1)$$

folgt daraus

$$\begin{aligned} &\left(w(x) - w(x_0) \right) v(x_1) + \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \left(v(x) - v(x_1) \right) \\ &= u(x) - u(x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot \left(v(x) - v(x_0) \right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} &\left(w(x) - w(x_0) \right) v(x_1) \\ &= u(x) - u(x_0) - w(x_0) \left(v(x) - v(x_0) \right) - \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \left(v(x) - v(x_1) \right). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} &\left(w(x) - w(x_0) - \delta w(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) v(x_1) \\ &= u(x) - u(x_0) - w(x_0) \left(v(x) - v(x_0) \right) - \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \left(v(x) - v(x_1) \right) \\ &\quad - \left(\delta u(x_1; x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot \delta v(x_1; x_0) \right) \cdot (x - x_0) \\ &= u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\quad - w(x_0) \cdot \left(v(x) - v(x_0) - \delta v(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \right) \\ &\quad - \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \left(v(x) - v(x_1) \right) \\ &\in \left(\delta_2 U - W_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W_{x x_0} \cdot \delta V_{x x_1} \right) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Also folgt mit

$$\delta_2 W = \left(\delta_2 U - W_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W_{xx_0} \cdot \delta V_{xx_1} \right) / V_{x_1},$$

dass

$$w(x) - w(x_0) \in \delta w(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0)$$

ist.

d) *Standardfunktionen:*

Es gilt

$$\begin{aligned} w(x) &= \varphi(u(x)) \in \varphi(U_x) = W_x, \\ w(x_0) &= \varphi(u(x_0)) \in \varphi(U_{x_0}) = W_{x_0}. \end{aligned}$$

Weiter ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0)) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)). \end{aligned}$$

Daraus folgt einerseits

$$w(x) - w(x_0) \in \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{xx_0} \cdot (x - x_0) = \delta W_{xx_0} \cdot (x - x_0)$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \delta w(x_1; x_0) &= \delta\varphi(u(x_1); u(x_0)) \cdot \delta u(x_1; x_0) \\ &\in \delta\varphi(U_{x_1}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_1x_0} = \delta W_{x_1x_0}. \end{aligned}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} &\delta\varphi(u(x); u(x_0)) - \delta\varphi(u(x_1); u(x_0)) \\ &= \delta_2\varphi(u(x); u(x_1), u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_1)). \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) - \delta w(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= \varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0)) - \delta\varphi(u(x_1); u(x_0)) \cdot \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)) \\ &\quad - \delta\varphi(u(x_1); u(x_0)) \cdot \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0)) \\ &\quad + \left(\delta\varphi(u(x); u(x_0)) - \delta\varphi(u(x_1); u(x_0)) \right) \cdot \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0) - \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0)) \\ &\quad + \delta_2\varphi(u(x); u(x_1), u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_1)) \cdot \delta u(x_1; x_0) \cdot (x - x_0) \\ &\in \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \delta_2\varphi(U_x; U_{x_1}, U_{x_0}) \cdot \delta U_{xx_1} \cdot \delta U_{x_1x_0} \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta_2 W \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.2.7 Es gibt andere Möglichkeiten, die Operationen $\mathcal{W} := \mathcal{U} \cdot \mathcal{V}$, $\mathcal{W} := \mathcal{U}/\mathcal{V}$ und $\mathcal{W} := \varphi(\mathcal{U})$ für Steigungstupel zweiter Ordnung zu definieren.

So erhält man beispielsweise für die Multiplikation aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x)v(x) - u(x_0)v(x_0) \\ &= u(x)v(x) - u(x_0)v(x) + u(x_0)v(x) - u(x_0)v(x_0) \\ &= v(x)(u(x) - u(x_0)) + u(x_0)(v(x) - v(x_0)) \end{aligned}$$

die Relation

$$w(x) - w(x_0) \in (V_x \cdot \delta U_{xx_0} + \delta V_{xx_0} \cdot U_{x_0}) \cdot (x - x_0),$$

so dass auch

$$\delta W_{xx_0} := V_x \cdot \delta U_{xx_0} + \delta V_{xx_0} \cdot U_{x_0}$$

eine Intervallsteigung erster Ordnung von $w = u \cdot v$ auf $[x]$ bezüglich x_0 ist. Ebenso erhält man, dass bei der Multiplikation auch andere Definitionen für $\delta_2 W$ möglich sind.

Auf die gleiche Weise lässt sich zeigen, dass auch für $\mathcal{W} := \mathcal{U}/\mathcal{V}$ und $\mathcal{W} := \varphi(\mathcal{U})$ andere Definitionen möglich sind.

2.2.3 Steigungen für Standardfunktionen

In diesem Abschnitt wollen wir zeigen, wie für eine zweimal stetig differenzierbare Standardfunktion φ die in Definition 2.2.5 d) verwendeten Einschließungen $\delta\varphi(U_{x_1}; U_{x_0})$, $\delta\varphi(U_x; U_{x_0})$, $\delta\varphi(U_x; U_{x_1})$ und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_1}, U_{x_0})$ der Mengen (2.3) - (2.6) bestimmt werden können.

Falls $U_{x_1} \cap U_{x_0} = \emptyset$, dann ist

$$\{\delta\varphi(u_{x_1}; u_{x_0}) \mid u_{x_1} \in U_{x_1}, u_{x_0} \in U_{x_0}\} \subseteq \frac{\varphi(U_{x_1}) - \varphi(U_{x_0})}{U_{x_1} - U_{x_0}},$$

wobei $\varphi(U_{x_1}) \in \mathbb{IR}$ und $\varphi(U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ Einschließungen des Wertebereichs von $\varphi(x)$ auf U_{x_1} bzw. U_{x_0} sind. In diesem Fall können wir

$$\delta\varphi(U_{x_1}; U_{x_0}) = \frac{\varphi(U_{x_1}) - \varphi(U_{x_0})}{U_{x_1} - U_{x_0}} \quad (2.9)$$

setzen. Falls $U_{x_1} \cap U_{x_0} \neq \emptyset$, so können wir

$$\delta\varphi(U_{x_1}; U_{x_0}) = \varphi'(U_{x_1} \cup U_{x_0}) \quad (2.10)$$

setzen, wobei $\varphi'(U_{x_1} \cup U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung des Wertebereichs von $\varphi'(x)$ auf $U_{x_1} \cup U_{x_0}$ ist, denn nach dem Mittelwertsatz 1.1.1 gilt

$$\{\delta\varphi(u_{x_1}; u_{x_0}) \mid u_{x_1} \in U_{x_1}, u_{x_0} \in U_{x_0}\} \subseteq \{\varphi'(\tilde{u}) \mid \tilde{u} \in U_{x_1} \cup U_{x_0}\}.$$

Genauso gilt auf Grund des Mittelwertsatzes 1.1.1

$$\left\{ \delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0} \right\} \subseteq \left\{ \varphi'(u_x) \mid u_x \in U_x \right\},$$

so dass wir

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \varphi'(U_x) \tag{2.11}$$

und entsprechend

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_1}) = \varphi'(U_x) \tag{2.12}$$

verwenden können.

Nach Korollar 1.3.9 können wir ferner

$$\delta_2\varphi(U_x; U_{x_1}, U_{x_0}) = \frac{1}{2} \varphi''(U_x) \tag{2.13}$$

verwenden.

Für einige Standardfunktionen lassen sich explizite Formeln für die Steigungsfunktionen erster und zweiter Ordnung berechnen, wodurch wir genauere Einschließungen als mit Hilfe von (2.9)-(2.13) erhalten. Die in den folgenden beiden Lemmata gegebenen Einschließungen von $\delta\varphi(u_x; u_{x_0})$, wobei $u_x \in U_x$ und $u_{x_0} \in U_{x_0}$ sind, können entsprechend auf $\delta\varphi(u_{x_1}; u_{x_0})$ und $\delta\varphi(u_x; u_{x_1})$ übertragen und analog bewiesen werden. Wir geben diese Einschließungen und die Beweise nicht explizit an.

Lemma 2.2.8 Es sei \mathcal{U} ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $u : [x] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi(x) = x^2$. Dann gilt für alle $u_x \in U_x$ und alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \in U_x + U_{x_0}, \tag{2.14}$$

sowie

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_1}, u_{x_0}) \in [1, 1]. \tag{2.15}$$

Beweis:

Die Relation (2.14) wurde schon in [38] bewiesen. Wir beschränken uns daher auf den Beweis von (2.15). Wegen $\varphi''(u_x) = 2$ für alle $u_x \in U_x$ und Korollar 1.3.9 folgt (2.15). □

Lemma 2.2.9 Es sei \mathcal{U} ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $u : [x] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\inf(U_x) \geq 0$, $\inf(U_{x_0}) > 0$ sowie $\inf(U_{x_1}) > 0$. Ferner sei $\varphi : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi(x) = \sqrt{x}$. Dann gilt für alle $u_x \in U_x$ und alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \in \frac{1}{\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}}} \tag{2.16}$$

sowie

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_1}, u_{x_0}) \in -\frac{1}{(\sqrt{U_{x_0}} + \sqrt{U_{x_1}})(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}})(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_1}})}, \tag{2.17}$$

wobei $\sqrt{U_x}$, $\sqrt{U_{x_0}}$ und $\sqrt{U_{x_1}}$ nach Definition 1.2.6 erklärt sind.

Beweis:

(2.16) wurde schon in [38] bewiesen. Für alle $u_x \in U_x$, $u_{x_0} \in U_{x_0}$ und $u_{x_1} \in U_{x_1}$ mit $u_x \neq u_{x_0} \neq u_{x_1}$ gilt

$$\begin{aligned}
\delta_2 \varphi(u_x; u_{x_1}, u_{x_0}) &= \frac{\frac{\sqrt{u_x} - \sqrt{u_{x_0}}}{u_x - u_{x_0}} - \frac{\sqrt{u_{x_0}} - \sqrt{u_{x_1}}}{u_{x_0} - u_{x_1}}}{u_x - u_{x_1}} \\
&= \frac{\frac{1}{\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}}} - \frac{1}{\sqrt{u_{x_0}} + \sqrt{u_{x_1}}}}{u_x - u_{x_1}} \\
&= \frac{\sqrt{u_{x_0}} + \sqrt{u_{x_1}} - (\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}})}{(\sqrt{u_{x_0}} + \sqrt{u_{x_1}})(\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}})(u_x - u_{x_1})} \\
&= -\frac{1}{(\sqrt{u_{x_0}} + \sqrt{u_{x_1}})(\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}})(\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_1}})} \\
&\in -\frac{1}{(\sqrt{U_{x_0}} + \sqrt{U_{x_1}})(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}})(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_1}})}.
\end{aligned}$$

Wegen

$$\delta_2 \varphi(a; a, a) = \frac{1}{2} \varphi''(a) = -\frac{1}{(\sqrt{a} + \sqrt{a})(\sqrt{a} + \sqrt{a})(\sqrt{a} + \sqrt{a})}$$

für $a > 0$ und

$$\delta_2 \varphi(b; a, a) = \frac{\delta \varphi(b; a) - \varphi'(a)}{b - a} = -\frac{1}{2\sqrt{a}(\sqrt{a} + \sqrt{b})^2}$$

für $a > 0$ und $b \geq 0$ gilt (2.17) auch für die verbleibenden Fälle. □

Steigungseinschließung mit Hilfe von Konvexitäts- bzw. Konkavitätseigenschaften

Im Folgenden wollen wir angeben, wie wir (2.3) bis (2.6) mit Hilfe von Konvexitäts- bzw. Konkavitätseigenschaften von $\varphi(x)$ bzw. $\varphi'(x)$ einschließen können. Wie schon zuvor vereinbart sei auch in den folgenden Sätzen jeweils (2.7) und (2.8) gesetzt.

Satz 2.2.10 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar auf $[x] = [\underline{x}, \bar{x}] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x}_0, \bar{x}_0] \subseteq [x]$.

Falls $\varphi''(x) \geq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ konvex ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta \varphi(\underline{x}; \underline{x}_0) \leq \delta \varphi(x; x_0) \leq \delta \varphi(\bar{x}; \bar{x}_0) \quad (2.18)$$

für alle $x \in [x]$, $x_0 \in [x_0]$.

Falls $\varphi''(x) \leq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ konkav ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0) \geq \delta\varphi(x; x_0) \geq \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0) \quad (2.19)$$

für alle $x \in [x]$, $x_0 \in [x_0]$.

Beweis: siehe [38]. □

Die Formeln aus Satz 2.2.10 gelten entsprechend für $\delta\varphi(x; x_1)$ und $\delta\varphi(x_1; x_0)$.

Nun wollen wir Einschließungen von $\delta_2\varphi(x; x_1, x_0)$ berechnen für den Fall, dass φ' konvex bzw. konkav ist.

Satz 2.2.11 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dreimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es seien $[x_0] = [\underline{x}_0, \bar{x}_0] \subseteq [x]$ sowie $[x_1] = [\underline{x}_1, \bar{x}_1] \subseteq [x]$.

Falls $\varphi'''(x) \geq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ' konvex ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_1, \underline{x}_0) \leq \delta_2\varphi(x; x_1, x_0) \leq \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_1, \bar{x}_0) \quad (2.20)$$

für alle $x \in [x]$, $x_1 \in [x_1]$ und $x_0 \in [x_0]$.

Falls $\varphi'''(x) \leq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ' konkav ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_1, \underline{x}_0) \geq \delta_2\varphi(x; x_1, x_0) \geq \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_1, \bar{x}_0) \quad (2.21)$$

für alle $x \in [x]$, $x_1 \in [x_1]$ und $x_0 \in [x_0]$.

Beweis:

Wir beweisen (2.20) und betrachten dazu die nach Korollar 1.3.9 stetige Funktion $g : [x] \times [x_1] \times [x_0] \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$g(x, x_1, x_0) := \delta_2\varphi(x; x_1, x_0).$$

Mit Satz 1.3.6 und Korollar 1.3.9 gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(x, x_1, x_0)}{\partial x} &= \lim_{\tilde{x} \rightarrow x} \frac{\delta_2\varphi(\tilde{x}; x_1, x_0) - \delta_2\varphi(x; x_1, x_0)}{\tilde{x} - x} \\ &= \lim_{\tilde{x} \rightarrow x} \delta_3\varphi(x; \tilde{x}, x_1, x_0) \\ &= \delta_3\varphi(x; x, x_1, x_0) \\ &= \frac{1}{6} \varphi'''(\xi), \quad \xi \in [x], \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Folglich ist $g(x, x_1, x_0)$ monoton wachsend bezüglich x .

Nach Satz 1.3.5 ist $g(x, x_1, x_0)$ somit auch für festes x und x_0 monoton wachsend bezüglich x_1 sowie für festes x und x_1 monoton wachsend bezüglich x_0 . Insgesamt folgt damit (2.20).

Der Beweis von (2.21) verläuft analog. □

2.3 Automatische Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung

Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ n -mal stetig differenzierbar und durch einen Ausdruck gegeben. Wir zeigen, dass eine automatische Berechnung von Intervallsteigungen n -ter Ordnung auf $[x] \subseteq D$ möglich ist (sofern die intervallmäßige Auswertung $f([x])$ existiert):

Für eine Funktion $w \in C^1(D)$ und festes $x_j \in [x] \subseteq D$ definieren wir den Operator δ_{x_j} durch

$$\delta_{x_j} w(x) := \delta w(x; x_j).$$

δ_{x_0} weist also der Funktion $w(x)$ die Steigungsfunktion

$$\delta w(x; x_0) = \begin{cases} \frac{w(x) - w(x_0)}{x - x_0} & \text{für } x \neq x_0 \\ w'(x_0) & \text{für } x = x_0 \end{cases}$$

zu. Nach Satz 1.3.5, Satz 1.3.6 sowie Korollar 1.3.9 gilt für $w \in C^n(D)$ und nicht notwendigerweise verschiedene $x_0, \dots, x_{n-1} \in [x]$

$$\delta_{x_0} \delta_{x_1} \delta_{x_2} \dots \delta_{x_{n-1}} w(x) = \delta_n w(x; x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0).$$

Für $u \in C^1(D)$, $x_j \in [x] \subseteq D$ und $\varphi \in C^1(u(D))$ definieren wir den Operator $\delta_{u; x_j}$ durch

$$\delta_{u; x_j}(\varphi(u))(x) := \delta \varphi(u(x); u(x_j)).$$

Dann gilt für $\varphi \in C^n(u(D))$ und nicht notwendigerweise verschiedene $x_0, \dots, x_{n-1} \in [x]$

$$\delta_{u; x_0} \delta_{u; x_1} \delta_{u; x_2} \dots \delta_{u; x_{n-1}}(\varphi(u))(x) = \delta_n \varphi(u(x); u(x_{n-1}), u(x_{n-2}), \dots, u(x_0)).$$

Für $u, v \in C^1(D)$ und $\varphi \in C^1(u(D))$ gelten die Rekursionsformeln

$$\delta_{x_j}(u \pm v)(x) = \delta_{x_j}(u)(x) \pm \delta_{x_j}(v)(x),$$

$$\delta_{x_j}(u \cdot v)(x) = u(x) \cdot \delta_{x_j}(v)(x) + v(x_j) \cdot \delta_{x_j}(u)(x),$$

$$\delta_{x_j}(u/v)(x) = \left(\delta_{x_j}(u)(x) - \frac{u(x_j)}{v(x_j)} \cdot \delta_{x_j}(v)(x) \right) / v(x),$$

$$\delta_{x_j}(\varphi(u))(x) = \delta_{u;x_j}(\varphi(u))(x) \cdot \delta_{x_j}(u)(x),$$

und für die Funktionen $u(x) = x$ sowie $u(x) \equiv k \in \mathbb{R}$ können entsprechend zu Lemma 2.2.4 Intervallsteigungen angegeben werden.

Zusammen mit Satz 1.3.6, Satz 1.3.5 und Korollar 1.3.9 folgt damit, dass unter den obigen Voraussetzungen für die Funktion f eine automatische Berechnung von Intervallsteigungen n -ter Ordnung von f auf $[x] \subseteq D$ bezüglich der Punkte x_{n-1}, \dots, x_0 möglich ist. Die dabei benötigten Einschließungen von Termen wie

$$\delta_n \varphi(u(x); u(x_{n-1}), u(x_{n-2}), \dots, u(x_0))$$

können, sofern keine besseren Einschließungen bekannt sind, über die Ableitungen von φ erhalten werden. Explizite Formeln zur Berechnung von Intervallsteigungen höherer Ordnung als 2 geben wir hier allerdings nicht an.

Kapitel 3

Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für nichtdifferenzierbare Funktionen einer Variablen

Im vorigen Kapitel haben wir gezeigt, wie eine automatische Berechnung von Intervallsteigungen zweiter Ordnung durchgeführt werden kann. Die Steigungsfunktion zweiter Ordnung $\delta_2 f(x; x_1, x_0)$ hängt von der Wahl der Punkte x_1 und x_0 ab. Im Folgenden setzen wir nun $x_1 = x_0$. Dies bringt uns einige Vorteile:

- Im Fall $x_1 = x_0$ erhält man in Definition 2.2.1 als Steigungstupel zweiter Ordnung ein 7-Tupel

$$\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, U_{x_1}, \delta U_{x_1 x_0}, \delta U_{x x_0}, \delta U_{x x_1}, \delta_2 U)$$

mit $U_{x_0} = U_{x_1}$ und $\delta U_{x x_0} = \delta U_{x x_1}$. Folglich kann in diesem Fall das 7-Tupel auf ein 5-Tupel

$$\mathcal{U} := (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$$

mit $U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U \in \mathbb{IR}, U_{x_0} \subseteq U_x$ und

$$\begin{aligned} u(x) &\in U_x, \\ u(x_0) &\in U_{x_0}, \\ u'(x_0) &\in \delta U_{x_0}, \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U \cdot (x - x_0), \\ u(x) - u(x_0) &\in u'(x_0) \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \end{aligned} \tag{3.1}$$

für alle $x \in [x]$ reduziert werden. Dadurch verringert sich im Vergleich zum Fall $x_1 \neq x_0$ der Aufwand zur Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung deutlich.

- Für einige Standardfunktionen $\varphi(x)$, für die $\varphi(x)$ bzw. $\varphi'(x)$ stückweise konvex oder konkav ist, werden wir Formeln für die Berechnung von Intervallsteigungen erster und zweiter Ordnung von φ herleiten, die bessere Einschließungen als die Auswertung von φ' bzw. φ'' liefern. Solche Funktionen sind z. B. $\sinh(x)$, $\cosh(x)$ oder x^n , $n \in \mathbb{N}$. Dazu werden wir Aussagen aus [38] verallgemeinern. Dabei kommt uns zugute, dass mit $x_1 = x_0$ die Zahl der Fallunterscheidungen überschaubar bleibt, was vor allem für eine effiziente Nutzung im Rahmen der globalen Optimierung von Interesse ist.

Im vorigen Kapitel haben wir vorausgesetzt, dass die im Funktionsausdruck von f auftretenden Standardfunktionen φ jeweils hinreichend oft differenzierbar sind. Im Folgenden wollen wir eine automatische Berechnung von Steigungstupeln auch dann ermöglichen, wenn Funktionen wie $\text{abs}(\cdot)$ oder $\text{max}(\cdot)$, die nur stückweise differenzierbar sind, im Funktionsausdruck auftreten. Dadurch ergeben sich zusätzliche Schwierigkeiten, z. B. wenn f an der Stelle x_0 nicht differenzierbar ist, da dann eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von f bezüglich x_0 im Allgemeinen nicht existiert. Wir zeigen, wie in solchen Fällen eine automatische Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung durchgeführt werden kann, wobei das Steigungstupel dann im Allgemeinen keine Intervallsteigung zweiter Ordnung bezüglich x_0 liefert, sondern eine Einschließung des Wertebereichs von f entsprechend der Form (1.11).

Ziel dieses Kapitels ist also die automatische Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung für eine nichtdifferenzierbare (und durch einen Funktionsausdruck gegebene) Funktion, woraus eine Wertebereichseinschließung entsprechend der Form (1.11) folgt. Damit verallgemeinern wir das Vorgehen aus [21] und [46], wo die Funktion als zweimal stetig differenzierbar vorausgesetzt wurde. Außerdem liefern die Formeln, die wir in Abschnitt 3.1.3 für die Intervallsteigungen erster und zweiter Ordnung einiger stückweise konvexen bzw. konkaven Funktionen zeigen, genauere Einschließungen als die in [21] und [46] verwendete Auswertung der ersten und zweiten Ableitung. Ferner verallgemeinern diese Formeln für Intervallsteigungen erster Ordnung Aussagen aus [38]. Des Weiteren zeigen wir in Abschnitt 3.1.5, wie die automatische Berechnung von Steigungstupeln für stetige Funktionen, die mit Hilfe einer if-then-else-Vorschrift gegeben sind, durchgeführt werden kann. Dabei korrigieren wir eine in der Literatur angegebene Formel zur automatischen Berechnung von Steigungstupeln erster Ordnung. Schließlich betrachten wir in Abschnitt 3.2 einige Beispiele und vergleichen verschiedene Wertebereichseinschließungen.

3.1 Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung

3.1.1 Steigungstupel zweiter Ordnung

Für stetige, nicht notwendig differenzierbare Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ können wir Definition 2.2.1 nicht ohne Weiteres übertragen, da die letzte Inklusion in (2.2) dann

im Allgemeinen nicht erfüllbar ist. Dies zeigt das folgende Beispiel.

Beispiel 3.1.1 Es sei $u(x) = |x|$, $[x] = [-1, 1]$, $x_0 = 0$ und $r \in \mathbb{R}$ beliebig. Wir zeigen, dass es kein Intervall $\delta_2 U = [u_1, u_2] \in \mathbb{IR}$ gibt mit

$$u(x) - u(x_0) \in r \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \quad (3.2)$$

für alle $x \in [x]$. (3.2) ist äquivalent zu

$$|x| \in r \cdot x + [u_1, u_2] \cdot x^2 \quad (3.3)$$

für alle $x \in [x]$.

1. Fall: $u_2 \leq 0$.

Falls $r = 0$ ist, so gilt für $x = 1$ offensichtlich

$$|x| \notin r \cdot x + [u_1, u_2] \cdot x^2.$$

Ebenso ist (3.3) im Fall $r \neq 0$ für $x = -\text{sign}(r)$ nicht erfüllt.

2. Fall: $u_2 > 0$.

Falls $r < 1$ ist, so kann man leicht zeigen, dass $|x| > r \cdot x + u_2 \cdot x^2$ für alle $x \in \left(0, \frac{1-r}{u_2}\right)$ gilt. Damit ist (3.3) für $x \in \left(0, \frac{1-r}{u_2}\right)$ nicht erfüllt. Im Fall $r \geq 1$ folgt ebenso $|x| > r \cdot x + u_2 \cdot x^2$ für alle $x \in \left(-\frac{1+r}{u_2}, 0\right)$, d. h. (3.3) ist für $x \in \left(-\frac{1+r}{u_2}, 0\right)$ nicht erfüllt.

Insgesamt folgt also, dass es zu beliebigem $r \in \mathbb{R}$ kein Intervall $\delta_2 U$ gibt, so dass (3.2) für alle $x \in [x]$ erfüllt ist.

Beispiel 3.1.1 zeigt also, dass wir für den in diesem Abschnitt betrachteten Fall $x_1 = x_0$ die Definition eines Steigungstupels zweiter Ordnung im Vergleich zu (3.1) etwas modifizieren müssen.

Definition 3.1.2 Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $[x] \subseteq D$ und $x_0 \in [x]$ beliebig, aber fest. Ein *Steigungstupel zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_0* ist ein 5-Tupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ mit $U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U \in \mathbb{IR}$, $U_{x_0} \subseteq U_x$ und

$$\begin{aligned} u(x) &\in U_x, \\ u(x_0) &\in U_{x_0}, \\ \delta u_{\text{lim}}([x_0]) &\subseteq \delta U_{x_0}, \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U \cdot (x - x_0), \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

für alle $x \in [x]$.

Bemerkung 3.1.3 In (3.4) enthält U_x den Funktionswert $u(x)$ für jedes $x \in [x]$, und U_{x_0} enthält den Funktionswert $u(x_0)$. Ferner ist δU_{x_0} eine Obermenge der "Grenz-Intervallsteigung" $\delta u_{\lim}([x_0])$, und δU ist eine Intervallsteigung erster Ordnung auf $[x]$ bezüglich x_0 . Da für δU_{x_0} eine Obermenge von $\delta u_{\lim}([x_0])$ erlaubt ist, ist $\delta_2 U$ im Allgemeinen keine Intervallsteigung zweiter Ordnung auf $[x]$ bezüglich x_0 im Sinne von (1.9). Dennoch erhalten wir aus (3.4) die Wertebereichseinschließungen

$$\begin{aligned} u(x) &\in U_x, \\ u(x) &\in U_{x_0} + \delta U \cdot ([x] - x_0), \\ u(x) &\in U_{x_0} + \delta U_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 U \cdot ([x] - x_0)^2 \end{aligned}$$

von u auf $[x]$. Den Begriff "Steigungstupel" in Definition 3.1.2 werden wir später rechtfertigen (siehe Bemerkung 3.1.9).

Bemerkung 3.1.4 Für $x = x_0$ sind die letzten beiden Relationen in (3.4) für jede Wahl von δU , δU_{x_0} und $\delta_2 U$ offenbar erfüllt. Beim Nachweis dieser beiden Relationen können wir daher o.B.d.A. $x \neq x_0$ annehmen, was wir im Folgenden jeweils stillschweigend tun werden.

Wie in Kapitel 2 können Steigungstupel zweiter Ordnung für konstante Funktionen sowie die Funktion $u(x) = x$ auf einfache Weise bestimmt werden.

Lemma 3.1.5 a) $\mathcal{K} = (k, k, 0, 0, 0)$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die konstante Funktion $u(x) \equiv k \in \mathbb{R}$ auf $[x]$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

b) $\mathcal{X} = ([x], x_0, 1, 1, 0)$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die Funktion $u(x) = x$ auf $[x]$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

3.1.2 Operationen für Steigungstupel zweiter Ordnung

Definition 3.1.6 Es seien \mathcal{U} bzw. \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

a) Die Addition bzw. Subtraktion $\mathcal{W} := \mathcal{U} \pm \mathcal{V}$ der Steigungstupel \mathcal{U} und \mathcal{V} sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \pm V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \pm V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= \delta U_{x_0} \pm \delta V_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta U \pm \delta V, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \pm \delta_2 V. \end{aligned}$$

b) Die Multiplikation $\mathcal{W} := \mathcal{U} \cdot \mathcal{V}$ sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \cdot V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \cdot V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= \delta U_{x_0} \cdot V_{x_0} + U_{x_0} \cdot \delta V_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta U \cdot V_{x_0} + U_x \cdot \delta V, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \cdot V_{x_0} + U_x \cdot \delta_2 V + \delta U \cdot \delta V_{x_0}. \end{aligned}$$

c) Die Division $\mathcal{W} := \mathcal{U}/\mathcal{V}$, wobei $0 \notin V_x$, sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x/V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0}/V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= (\delta U_{x_0} - W_{x_0} \cdot \delta V_{x_0})/V_{x_0}, \\ \delta W &:= (\delta U - W_{x_0} \cdot \delta V)/V_x, \\ \delta_2 W &:= (\delta_2 U - W_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W \cdot \delta V)/V_{x_0}. \end{aligned}$$

d) Für eine zweimal stetig differenzierbare Funktion φ und ein Steigungstupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ zweiter Ordnung von $u(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 definieren wir $\mathcal{W} := \varphi(\mathcal{U})$ durch

$$\begin{aligned} W_x &:= \varphi(U_x), \\ W_{x_0} &:= \varphi(U_{x_0}), \\ \delta W_{x_0} &:= \delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U, \\ \delta_2 W &:= \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U. \end{aligned}$$

Dabei seien $\varphi(U_x) \in \mathbb{IR}$ bzw. $\varphi(U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ Einschließungen des Wertebereichs von φ auf U_x bzw. U_{x_0} . Ferner sei $\delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(\widetilde{u}_{x_0}; u_{x_0}) \mid \widetilde{u}_{x_0} \in U_{x_0}, u_{x_0} \in U_{x_0}\}, \quad (3.5)$$

$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0}\} \quad (3.6)$$

und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0}\}. \quad (3.7)$$

Nach Satz 1.3.6 ist dabei

$$\delta\varphi(a; a) = \varphi'(a) \quad \text{und} \quad \delta_2\varphi(a; a) = \frac{1}{2} \varphi''(a), \quad a \in \mathbb{R}. \quad (3.8)$$

Wegen der Voraussetzungen für φ und \mathcal{U} sind die Mengen (3.5)-(3.7) beschränkt und können somit durch ein Intervall aus \mathbb{IR} eingeschlossen werden. Dies werden wir in Abschnitt 3.1.3 genauer behandeln.

Satz 3.1.7 Es seien \mathcal{U} und \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

Die Resultate $\mathcal{W} = (W_x, W_{x_0}, \delta W_{x_0}, \delta W, \delta_2 W)$ der in Definition 3.1.6 eingeführten Operationen sind jeweils wieder Steigungstupel zweiter Ordnung der jeweiligen Funktion $w = u \circ v$, $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ bzw. $w(x) = \varphi(u(x))$ auf $[x]$ bezüglich x_0 , d. h. sie besitzen jeweils die Eigenschaft (3.4).

Beweis:

Aus den folgenden Beweisen ergibt sich jeweils, dass alle Eigenschaften von \mathcal{U} und \mathcal{V} aus (3.4) benötigt werden.

Es sei jeweils $x \in [x]$ beliebig.

a) *Addition/Subtraktion:*

Es ist

$$\begin{aligned} w(x) &= u(x) \pm v(x) \in U_x \pm V_x = W_x, \\ w(x_0) &= u(x_0) \pm v(x_0) \in U_{x_0} \pm V_{x_0} = W_{x_0}. \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) \pm v(x) - (u(x_0) \pm v(x_0)) \\ &= (u(x) - u(x_0)) \pm (v(x) - v(x_0)) \\ &\in \delta U \cdot (x - x_0) \pm \delta V \cdot (x - x_0) \\ &= (\delta U + \delta V) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= (u(x) - u(x_0)) \pm (v(x) - v(x_0)) \\ &= (\delta u(x; x_0) \pm \delta v(x; x_0)) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

erhalten wir

$$\delta w_{\lim}([x_0]) \subseteq \delta u_{\lim}([x_0]) \pm \delta v_{\lim}([x_0]) \in \delta U_{x_0} \pm \delta V_{x_0} = \delta W_{x_0}.$$

Wegen

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) \\ &= u(x) - u(x_0) \pm (v(x) - v(x_0)) \\ &\in \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \pm \left(\delta V_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 V \cdot (x - x_0)^2 \right) \\ &= \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) \pm \delta V_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \pm \delta_2 V \cdot (x - x_0)^2 \\ &= (\delta U_{x_0} \pm \delta V_{x_0}) \cdot (x - x_0) + (\delta_2 U \pm \delta_2 V) \cdot (x - x_0)^2 \end{aligned}$$

folgt mit $\delta_2 W := \delta_2 U \pm \delta_2 V$, dass

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2$$

ist.

b) *Multiplikation:*

Es gilt

$$w(x) = u(x)v(x) \in U_x \cdot V_x = W_x,$$

$$w(x_0) = u(x_0)v(x_0) \in U_{x_0} \cdot V_{x_0} = W_{x_0}.$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x)v(x) - u(x_0)v(x_0) \\ &= u(x)v(x) - u(x)v(x_0) + u(x)v(x_0) - u(x_0)v(x_0) \\ &\in u(x) \cdot \delta V \cdot (x - x_0) + \delta U \cdot v(x_0) \cdot (x - x_0) \\ &= (u(x) \cdot \delta V + \delta U \cdot v(x_0)) \cdot (x - x_0) \\ &\subseteq (U_x \cdot \delta V + \delta U \cdot V_{x_0}) \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x)v(x) - u(x)v(x_0) + u(x)v(x_0) - u(x_0)v(x_0) \\ &= \left(u(x) \cdot \delta v(x; x_0) + \delta u(x; x_0) \cdot v(x_0) \right) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \delta w_{\lim}([x_0]) &\subseteq u(x_0) \cdot \delta v_{\lim}([x_0]) + \delta u_{\lim}([x_0]) \cdot v(x_0) \\ &\subseteq U_{x_0} \cdot \delta V_{x_0} + \delta U_{x_0} \cdot V_{x_0} \\ &= \delta W_{x_0}. \end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) \\ &= u(x)v(x) - u(x_0)v(x_0) \\ &= u(x)v(x) - u(x)v(x_0) + u(x)v(x_0) - u(x_0)v(x_0) \\ &= u(x)(v(x) - v(x_0)) + v(x_0)(u(x) - u(x_0)) \\ &\in u(x) \left(\delta V_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 V \cdot (x - x_0)^2 \right) \\ &\quad + v(x_0) \left(\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \right) \\ &= \left(u(x) \cdot \delta V_{x_0} + v(x_0) \cdot \delta U_{x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \left(u(x) \cdot \delta_2 V + v(x_0) \cdot \delta_2 U \right) \cdot (x - x_0)^2 \\ &\subseteq \left(\left(u(x_0) + \delta U \cdot (x - x_0) \right) \cdot \delta V_{x_0} + v(x_0) \cdot \delta U_{x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \left(u(x) \cdot \delta_2 V + v(x_0) \cdot \delta_2 U \right) \cdot (x - x_0)^2 \\ &\subseteq \left(U_{x_0} \cdot \delta V_{x_0} + V_{x_0} \cdot \delta U_{x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \left(U_x \cdot \delta_2 V + V_{x_0} \cdot \delta_2 U + \delta U \cdot \delta V_{x_0} \right) \cdot (x - x_0)^2 \end{aligned}$$

folgt mit $\delta_2 W = U_x \cdot \delta_2 V + V_{x_0} \cdot \delta_2 U + \delta U \cdot \delta V_{x_0}$, dass

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2$$

ist.

c) *Division:*

Es ist

$$\begin{aligned} w(x) &= u(x)/v(x) \in U_x/V_x = W_x, \\ w(x_0) &= u(x_0)/v(x_0) \in U_{x_0}/V_{x_0} = W_{x_0}. \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) \\ &= u(x)/v(x) - u(x_0)/v(x_0) \\ &= \left(u(x)v(x_0) - u(x_0)v(x_0) + u(x_0)v(x_0) - u(x_0)v(x) \right) / (v(x)v(x_0)) \\ &= \left(u(x) - u(x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot (v(x) - v(x_0)) \right) / v(x) \\ &\in \left(\delta U - u(x_0)/v(x_0) \cdot \delta V \right) / v(x) \cdot (x - x_0) \\ &\subseteq \left(\delta U - U_{x_0}/V_{x_0} \cdot \delta V \right) / V_x \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Aus

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \left(u(x) - u(x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot (v(x) - v(x_0)) \right) / v(x) \\ &= \left(\delta u(x; x_0) - u(x_0)/v(x_0) \cdot \delta v(x; x_0) \right) / v(x) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

erhalten wir

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \left(\delta U_{x_0} - U_{x_0}/V_{x_0} \cdot \delta V_{x_0} \right) / V_{x_0} = \delta W_{x_0}.$$

Ferner gilt wegen

$$w(x) - w(x_0) = u(x)/v(x) - u(x_0)/v(x_0),$$

dass

$$\left(w(x) - w(x_0) \right) v(x) = u(x) - u(x_0)/v(x_0) \cdot v(x)$$

ist (nach Voraussetzung ist $v(x) \neq 0$). Wegen

$$v(x) \in v(x_0) + \delta V \cdot (x - x_0)$$

folgt damit

$$\begin{aligned} & u(x) - u(x_0) / v(x_0) \cdot v(x) \\ \in & \left(w(x) - w(x_0) \right) v(x_0) + \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \delta V \cdot (x - x_0), \end{aligned}$$

woraus wir

$$\begin{aligned} & \left(w(x) - w(x_0) \right) v(x_0) \\ \in & u(x) - u(x_0) / v(x_0) \cdot v(x) - \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \delta V \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

erhalten. Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} & \left(w(x) - w(x_0) \right) v(x_0) \\ \in & \left(u(x) - u(x_0) - u(x_0) / v(x_0) \cdot (v(x) - v(x_0)) \right) \\ & - \left(w(x) - w(x_0) \right) \cdot \delta V \cdot (x - x_0) \\ \subseteq & \left(\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \right. \\ & \left. - u(x_0) / v(x_0) \cdot (\delta V_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 V \cdot (x - x_0)^2) \right) - \delta W \cdot \delta V \cdot (x - x_0)^2 \\ = & \left(\delta U_{x_0} - u(x_0) / v(x_0) \cdot \delta V_{x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\ & + \left(\delta_2 U - u(x_0) / v(x_0) \cdot \delta_2 V - \delta W \cdot \delta V \right) \cdot (x - x_0)^2 \\ \subseteq & \left(\delta U_{x_0} - U_{x_0} / V_{x_0} \cdot \delta V_{x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\ & + \left(\delta_2 U - U_{x_0} / V_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W \cdot \delta V \right) \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Also folgt mit

$$\delta W_{x_0} = \left(\delta U_{x_0} - U_{x_0} / V_{x_0} \cdot \delta V_{x_0} \right) / V_{x_0}$$

und

$$\delta_2 W = \left(\delta_2 U - U_{x_0} / V_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W \cdot \delta V \right) / V_{x_0},$$

dass

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2$$

ist.

d) *Standardfunktionen:*

Es gilt

$$\begin{aligned} w(x) &= \varphi(u(x)) \in \varphi(U_x) = W_x, \\ w(x_0) &= \varphi(u(x_0)) \in \varphi(U_{x_0}) = W_{x_0}. \end{aligned}$$

Nach Bemerkung 3.1.4 genügt es, den Beweis für den Fall $x \neq x_0$ durchzuführen.

Es ist dann

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0)) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)). \end{aligned}$$

Daraus folgt einerseits

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &\in \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U \cdot (x - x_0) \\ &= \delta W \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \delta w_{\text{lim}}([x_0]) &\subseteq \varphi'(u(x_0)) \cdot \delta U_{x_0} \\ &\subseteq \delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} = \delta W_{x_0}. \end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \varphi(u(x)) &= \varphi(u(x_0)) + \varphi'(u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)) \\ &\quad + \delta_2\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0))^2 \end{aligned}$$

ist im Fall $u(x) \neq u(x_0)$

$$\begin{aligned} \delta\varphi(u(x); u(x_0)) &= \frac{\varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0))}{u(x) - u(x_0)} \\ &= \varphi'(u(x_0)) + \delta_2\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)). \end{aligned}$$

Für den Fall $u(x) = u(x_0)$ gilt ebenso

$$\delta\varphi(u(x); u(x_0)) = \varphi'(u(x_0)) + \delta_2\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)).$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} &w(x) - w(x_0) \\ &= \varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0)) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)) \\ &\in \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \left(\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \right) \\ &= \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\ &= \left(\varphi'(u(x_0)) + \delta_2\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot (u(x) - u(x_0)) \right) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\ &= \varphi'(u(x_0)) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (u(x) - u(x_0)) \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \delta\varphi(u(x); u(x_0)) \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\ &\subseteq \delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) \\ &\quad + \left(\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U + \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U \right) \cdot (x - x_0)^2, \end{aligned}$$

woraus wir mit

$$\delta_2 W = \delta_2 \varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U + \delta \varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U$$

die gesuchte Einschließung

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2$$

erhalten. □

Bemerkung 3.1.8 Mit ähnlicher Argumentation wie in Bemerkung 2.2.7 erkennt man, dass in Definition 3.1.6 b)-d) für δW und $\delta_2 W$ auch andere Definitionen möglich sind, mit denen Satz 3.1.7 gültig ist.

Bemerkung 3.1.9 Die in Definition 3.1.6 angegebenen Operationen entsprechen gerade den Operationen aus Definition 2.2.5 für den Fall $x_1 = x_0$. Für zweimal stetig differenzierbare Funktionen $u, v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ erhält man folglich mit den Operationen aus Definition 3.1.6 sogar Tupel \mathcal{W} mit der Eigenschaft (3.1), so dass $\delta_2 W$ eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von $w(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 ist. Dies rechtfertigt die Bezeichnung "Steigungstupel" in Definition 3.1.2.

3.1.3 Zweimal stetig differenzierbare Standardfunktionen

In diesem Abschnitt wollen wir angeben, wie wir für zweimal stetig differenzierbare Standardfunktionen φ die in Definition 3.1.6 d) verwendeten Einschließungen $\delta \varphi(U_{x_0}; U_{x_0})$, $\delta \varphi(U_x; U_{x_0})$ und $\delta_2 \varphi(U_x; U_{x_0})$ der Mengen (3.5) - (3.7) berechnen können.

Wegen

$$\left\{ \delta \varphi(\widetilde{u}_{x_0}; u_{x_0}) \mid \widetilde{u}_{x_0} \in U_{x_0}, u_{x_0} \in U_{x_0} \right\} \subseteq \left\{ \varphi'(u_{x_0}) \mid u_{x_0} \in U_{x_0} \right\}$$

können wir

$$\delta \varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) = \varphi'(U_{x_0})$$

setzen. Genauso gilt auf Grund des Mittelwertsatzes 1.1.1

$$\left\{ \delta \varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0} \right\} \subseteq \left\{ \varphi'(u_x) \mid u_x \in U_x \right\},$$

so dass wir

$$\delta \varphi(U_x; U_{x_0}) = \varphi'(U_x) \tag{3.9}$$

verwenden können.

Nach dem Satz von Taylor ist

$$\varphi(u(x)) - \varphi(u(x_0)) \in \varphi'(u(x_0))(u(x) - u(x_0)) + \frac{1}{2} \varphi''(U_x)(u(x) - u(x_0))^2$$

für alle $x \in [x]$, und folglich können wir

$$\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) = \frac{1}{2} \varphi''(U_x) \quad (3.10)$$

verwenden.

Für einige Standardfunktionen lassen sich explizite Formeln für Steigungsfunktionen erster und zweiter Ordnung berechnen, wodurch wir genauere Einschließungen als mit Hilfe von (3.9) und (3.10) erhalten.

Lemma 3.1.10 Es sei \mathcal{U} ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $u : [x] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x]$ bezüglich $x_0 \in [x]$ und $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi(x) = x^2$. Dann gilt für alle $u_x \in U_x$ und alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \in U_x + U_{x_0} \quad (3.11)$$

sowie

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) \in [1, 1]. \quad (3.12)$$

Beweis:

(3.11) wurde schon in [38] bewiesen. Wir beschränken uns daher auf den Beweis von (3.12). Für alle $u_x \in U_x$ und $u_{x_0} \in U_{x_0}$ mit $u_x \neq u_{x_0}$ gilt nach (1.10)

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) = \frac{u_x^2 - u_{x_0}^2 - 2u_{x_0}(u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2} = 1 \in [1, 1].$$

Mit (3.8) ist für alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\delta_2\varphi(u_{x_0}; u_{x_0}) = \frac{1}{2} \varphi''(u_{x_0}) = 1 \in [1, 1].$$

□

Lemma 3.1.11 Es sei \mathcal{U} ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $u : [x] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x]$ bezüglich $x_0 \in [x]$ mit $\inf(U_x) \geq 0$ und $\inf(U_{x_0}) > 0$. Außerdem sei $\varphi : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi(x) = \sqrt{x}$. Dann gilt für alle $u_x \in U_x$ und alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \in \frac{1}{\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}}} \quad (3.13)$$

sowie

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) \in -\frac{1}{2\sqrt{U_{x_0}}(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}})^2}. \quad (3.14)$$

Beweis:

(3.13) wurde bereits in [38] bewiesen. Wir zeigen (3.14). Für alle $u_x \in U_x$ und $u_{x_0} \in U_{x_0}$ mit $u_x \neq u_{x_0}$ gilt

$$\begin{aligned} \delta_2 \varphi(u_x; u_{x_0}) &= \frac{\sqrt{u_x} - \sqrt{u_{x_0}} - \frac{1}{2\sqrt{u_{x_0}}}(u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2} \\ &= \frac{\frac{1}{\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}}} - \frac{1}{2\sqrt{u_{x_0}}}}{u_x - u_{x_0}} \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{u_{x_0}}(\sqrt{u_x} + \sqrt{u_{x_0}})^2} \\ &\in -\frac{1}{2\sqrt{U_{x_0}}(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}})^2}. \end{aligned}$$

Mit (3.8) gilt außerdem für alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$

$$\begin{aligned} \delta_2 \varphi(u_{x_0}; u_{x_0}) &= \frac{1}{2} \varphi''(u_{x_0}) \\ &= -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{u_{x_0}}(\sqrt{u_{x_0}} + \sqrt{u_{x_0}})^2} \\ &\in -\frac{1}{2\sqrt{U_{x_0}}(\sqrt{U_x} + \sqrt{U_{x_0}})^2}. \end{aligned}$$

□

Steigungseinschließung mit Hilfe von Konvexitäts- und Konkavitätseigenschaften

Im Folgenden wollen wir angeben, wie wir (3.6) und (3.7) einschließen können, wenn $\varphi(x)$ bzw. $\varphi'(x)$ konvex oder konkav ist. Außerdem werden wir auch entsprechende Einschließungen für einige Standardfunktionen herleiten, die stückweise konvex bzw. konkav sind. Wie schon zuvor vereinbart sei auch in den folgenden Sätzen jeweils $\delta\varphi(x_0; x_0) = \varphi'(x_0)$ und $\delta_2\varphi(x_0; x_0) = \frac{1}{2}\varphi''(x_0)$.

Eine Einschließung von (3.6) findet man für konvexe bzw. konkave Funktionen mit Hilfe von Satz 2.2.10.

Für Funktionen wie $\varphi(x) = \sinh x$ oder $\varphi(x) = x^n$, $n \in \mathbb{N}$ ungerade, können wir zur Einschließung von (3.6) den folgenden Satz verwenden. Dieser verallgemeinert Formeln aus [38], wo Intervallsteigungen erster Ordnung für die Funktion $\varphi(x) = x^n$, $n \in \mathbb{N}$ ungerade, berechnet werden.

Satz 3.1.12 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x}_0, \bar{x}_0] \subseteq [x]$. Ferner sei $\varphi'(x) \geq 0$ auf $[x]$ sowie $\varphi''(x) \leq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ und $\varphi''(x) \geq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \geq 0\}$. Dann gilt mit

$$\delta\varphi([x]; [x_0]) = \begin{cases} [\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)] & \text{falls } \underline{x} \geq 0, \\ [\delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0), \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)] & \text{falls } \bar{x} \leq 0, \\ \left[\frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0)}{\bar{x} - \bar{x}_0}, \max\{\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\} \right] & \text{falls } \underline{x} \leq \bar{x}_0 < 0 < \bar{x}, \\ \left[\frac{\varphi(0) - \varphi(\underline{x}_0)}{\underline{x} - \underline{x}_0}, \max\{\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\} \right] & \text{falls } \underline{x} < 0 < \underline{x}_0 \leq \bar{x}, \\ [\varphi'(0), \max\{\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}] & \text{falls } 0 \in [x] \wedge 0 \in [x_0], \end{cases}$$

die Einschließung

$$\delta\varphi([x]; [x_0]) \supseteq \{\delta\varphi(x; x_0) \mid x \in [x], x_0 \in [x_0]\}.$$

Beweis:

Im Folgenden seien stets $x \in [x]$ und $x_0 \in [x_0]$.

Im Fall $\underline{x} \geq 0$ ist $\varphi(x)$ konvex auf $[x]$, und somit ist Satz 2.2.10 anwendbar. Analog wird der Fall $\bar{x} \leq 0$ behandelt. Für die restlichen Fälle zeigen wir zunächst die oberen Schranken von $\delta\varphi([x]; [x_0])$:

i) Für alle $x \leq 0$, $x_0 \leq 0$ gilt nach Satz 2.2.10 $\delta\varphi(x; x_0) \leq \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)$, da $\varphi(x)$ konkav auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ ist. Analog gilt für alle $x \geq 0$, $x_0 \geq 0$, dass $\delta\varphi(x; x_0) \leq \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)$ ist.

ii) Es sei nun $\bar{x} > 0$ und $\underline{x}_0 < 0$. Für alle $x_0 \leq 0$ und alle x mit $\varphi'(x) \leq \varphi'(\underline{x}_0)$ gilt dann nach Korollar 1.3.9

$$\begin{aligned} \delta\varphi(x; x_0) &= \varphi'(\xi), & \xi \text{ zwischen } x_0 \text{ und } x, \\ &\leq \varphi'(\underline{x}_0) \\ &= \delta\varphi(\underline{x}_0; \underline{x}_0) \end{aligned}$$

und damit nach i) $\delta\varphi(x; x_0) \leq \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)$.

iii) Wir betrachten nun im Fall $\bar{x} > 0$, $\underline{x}_0 < 0$ ein festes $\tilde{x}_0 \leq 0$, $\tilde{x}_0 \in [x_0]$, sowie ein $\tilde{x} > 0$, $\tilde{x} \in [x]$, mit $\varphi'(\tilde{x}) > \varphi'(\underline{x}_0)$. Mit ii) und wegen $\varphi''(x) \geq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \geq 0\}$ gilt $\varphi'(x) \geq \varphi'(\xi)$ für alle $x \geq \tilde{x}$ und alle $\xi \in [\tilde{x}_0, x]$. Damit erhalten wir

$$\frac{\partial(\delta\varphi(x; \tilde{x}_0))}{\partial x} = \frac{\varphi'(x) - \frac{\varphi(x) - \varphi(\tilde{x}_0)}{x - \tilde{x}_0}}{x - \tilde{x}_0} \geq 0$$

für alle $x \geq \tilde{x}$. Folglich ist $\delta\varphi(x; \tilde{x}_0)$ für $x \geq \tilde{x}$ monoton wachsend bezüglich x und somit

$$\delta\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \delta\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0). \quad (3.15)$$

Falls nun $\delta\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) \leq \varphi'(\tilde{x}_0)$ ist, so gilt mit (i)

$$\delta\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \varphi'(\tilde{x}_0) \leq \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0).$$

Ist andererseits $\delta\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) > \varphi'(\tilde{x}_0)$, dann gilt für die Funktion $g : [\tilde{x}_0, 0] \rightarrow \mathbb{R}$, $g(t) = \delta\varphi(\bar{x}; t)$

$$\begin{aligned} g'(t) &= \frac{\partial(\delta\varphi(\bar{x}; t))}{\partial t} = \frac{-\varphi'(t) + \delta\varphi(\bar{x}; t)}{\bar{x} - t} \\ &\geq \frac{-\varphi'(\tilde{x}_0) + g(t)}{\bar{x} - t} \end{aligned}$$

und

$$g'(\tilde{x}_0) > 0.$$

Daraus folgt, dass g auf $[\tilde{x}_0, 0]$ monoton wächst, und folglich ist

$$\delta\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) \leq \begin{cases} \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0), & \text{falls } \bar{x}_0 \leq 0, \\ \delta\varphi(\bar{x}; 0), & \text{falls } \bar{x}_0 > 0. \end{cases}$$

Mit (3.15) und i) erhalten wir damit

$$\delta\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0).$$

iv) Die entsprechenden Fälle für $\underline{x} < 0$, $\bar{x}_0 > 0$ werden analog zu ii) und iii) gezeigt. Insgesamt folgt damit aus i)-iv) für alle $x \in [x]$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\delta\varphi(x; x_0) \leq \max\{\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}.$$

Für die untere Schranke von $\delta\varphi([x]; [x_0])$ in den Fällen mit $0 \in [x]$ gilt:

- Zunächst ist $\delta\varphi(x; x_0) = \varphi'(\xi) \geq \varphi'(0)$. Im Fall $0 \in [x_0]$ wird die untere Schranke $\varphi'(0)$ wegen $\delta\varphi(0; 0) = \varphi'(0)$ angenommen.
- Nun betrachten wir den Fall $\bar{x}_0 < 0$. Nach (2.19) gilt für alle $x \leq 0$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\delta\varphi(x; x_0) \geq \delta\varphi(0; \bar{x}_0) \geq \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0)}{\bar{x} - \bar{x}_0}.$$

Für alle $x \geq 0$ ist $\varphi(x) \geq \varphi(0)$, und damit folgt

$$\begin{aligned} \delta\varphi(x; x_0) &= \frac{\varphi(x) - \varphi(x_0)}{x - x_0} \\ &\geq \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0)}{x - x_0} \end{aligned}$$

für alle $x \geq 0$, $x_0 \in [x_0]$. Die Funktion $h(x, x_0) := \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0)}{x - x_0}$, $x \geq 0$, $x_0 \in [x_0]$, ist wegen

$$\frac{\partial (h(x, x_0))}{\partial x} = \frac{\varphi(x_0) - \varphi(0)}{(x - x_0)^2} \leq 0$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial (h(x, x_0))}{\partial x_0} &= \frac{-\varphi'(x_0) + \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0)}{x - x_0}}{x - x_0} \\ &\leq \frac{-\varphi'(x_0) + \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0)}{0 - x_0}}{x - x_0} \\ &= \frac{-\varphi'(x_0) + \varphi'(\xi)}{x - x_0}, \quad \xi \in [x_0, 0], \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

monoton fallend bezüglich x und monoton fallend bezüglich x_0 . Also gilt für alle $x \geq 0$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\delta\varphi(x; x_0) \geq \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0)}{x - x_0} \geq \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0)}{\bar{x} - \bar{x}_0}.$$

- Die untere Schranke von $\delta\varphi([x]; [x_0])$ im Fall $0 \in [x]$, $\underline{x}_0 > 0$ wird analog zum Fall $\bar{x}_0 < 0$ bewiesen. □

Analog zu Satz 3.1.12 erhalten wir den folgenden Satz.

Satz 3.1.13 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x}_0, \bar{x}_0] \subseteq [x]$. Ferner sei $\varphi'(x) \leq 0$ auf $[x]$ sowie $\varphi''(x) \geq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ und $\varphi''(x) \leq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \geq 0\}$. Dann gilt mit

$$\delta\varphi([x]; [x_0]) = \begin{cases} [\delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0), \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)] & \text{falls } \underline{x} \geq 0, \\ [\delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)] & \text{falls } \bar{x} \leq 0, \\ \left[\min \{ \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0) \}, \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0)}{\bar{x} - \bar{x}_0} \right] & \text{falls } \underline{x} \leq \bar{x}_0 < 0 < \bar{x}, \\ \left[\min \{ \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0) \}, \frac{\varphi(0) - \varphi(\underline{x}_0)}{\underline{x} - \underline{x}_0} \right] & \text{falls } \underline{x} < 0 < \underline{x}_0 \leq \bar{x}, \\ [\min \{ \delta\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0) \}, \varphi'(0)] & \text{falls } 0 \in [x] \wedge 0 \in [x_0], \end{cases}$$

die Einschließung

$$\delta\varphi([x]; [x_0]) \supseteq \{ \delta\varphi(x; x_0) \mid x \in [x], x_0 \in [x_0] \}.$$

Ähnlich wie zuvor können wir auch für $\delta_2\varphi(x; x_0)$ vorgehen und erhalten die folgenden Sätze.

Satz 3.1.14 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dreimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x_0}, \overline{x_0}] \subseteq [x]$.

Falls $\varphi'''(x) \geq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ' konvex ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}) \leq \delta_2\varphi(x; x_0) \leq \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0}) \quad (3.16)$$

für alle $x \in [x]$, $x_0 \in [x_0]$.

Falls $\varphi'''(x) \leq 0$, $x \in [x]$, d. h. falls φ' konkav ist auf $[x]$, so gilt

$$\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}) \geq \delta_2\varphi(x; x_0) \geq \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0}) \quad (3.17)$$

für alle $x \in [x]$, $x_0 \in [x_0]$.

Beweis:

Die Aussagen folgen aus Satz 2.2.11, da die Funktion

$$g : [x] \times [x_1] \times [x_0] \rightarrow \mathbb{R}, \quad g(x, x_1, x_0) := \delta_2\varphi(x; x_1, x_0)$$

nach Korollar 1.3.9 stetig ist. □

Satz 3.1.15 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dreimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x_0}, \overline{x_0}] \subseteq [x]$. Ferner sei $\varphi'(x) = -\varphi'(-x)$ auf $\{x \in [x] \mid -x \in [x]\}$, $\varphi''(x) \geq 0$ auf $[x]$, sowie $\varphi'''(x) \leq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ und $\varphi'''(x) \geq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \geq 0\}$. Dann gilt mit

$$\delta_2\varphi([x]; [x_0]) = \begin{cases} [\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}), \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0})] & \text{falls } \underline{x} \geq 0, \\ [\delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0}), \delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0})] & \text{falls } \overline{x} \leq 0, \\ \left[\frac{\varphi(0) - \varphi(\overline{x_0}) - \varphi'(\overline{x_0}) \cdot (0 - \overline{x_0})}{(\overline{x} - \overline{x_0})^2}, \max\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}), \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0})\} \right] & \text{falls } \underline{x} \leq \overline{x_0} < 0 < \overline{x}, \\ \left[\frac{\varphi(0) - \varphi(\underline{x_0}) - \varphi'(\underline{x_0}) \cdot (0 - \underline{x_0})}{(\underline{x} - \underline{x_0})^2}, \max\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}), \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0})\} \right] & \text{falls } \underline{x} < 0 < \underline{x_0} \leq \overline{x}, \\ \left[\frac{1}{2} \varphi''(0), \max\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x_0}), \delta_2\varphi(\overline{x}; \overline{x_0})\} \right] & \text{falls } 0 \in [x] \wedge 0 \in [x_0], \end{cases}$$

die Einschließung

$$\delta_2\varphi([x]; [x_0]) \supseteq \{ \delta_2\varphi(x; x_0) \mid x \in [x], x_0 \in [x_0] \}.$$

Beweis:

Im Folgenden seien stets $x \in [x]$ und $x_0 \in [x_0]$.

Im Fall $\underline{x} \geq 0$ ist $\varphi'(x)$ konvex auf $[x]$, und somit ist Satz 3.1.14 anwendbar. Analog wird der Fall $\bar{x} \leq 0$ behandelt. Für die restlichen Fälle zeigen wir zunächst die oberen Schranken von $\delta_2\varphi([x]; [x_0])$:

i) Für alle $x \leq 0$ und alle $x_0 \leq 0$ gilt nach Satz 3.1.14 $\delta_2\varphi(x; x_0) \leq \delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)$, da $\varphi'(x)$ konkav auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ ist. Analog gilt für alle $x \geq 0$ und $x_0 \geq 0$, dass $\delta_2\varphi(x; x_0) \leq \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)$ ist.

ii) Es sei nun $\bar{x} > 0$ und $\underline{x}_0 < 0$. Für alle $x_0 \leq 0$ und alle x mit $|x| \leq |\underline{x}_0|$ gilt dann nach Korollar 1.3.9

$$\begin{aligned} \delta_2\varphi(x; x_0) &= \frac{1}{2} \varphi''(\xi), \quad \xi \text{ zwischen } x_0 \text{ und } x, \\ &\leq \frac{1}{2} \varphi''(\underline{x}_0) \\ &= \delta_2\varphi(\underline{x}_0; \underline{x}_0) \end{aligned}$$

und damit nach i) $\delta_2\varphi(x; x_0) \leq \delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)$.

iii) Wir betrachten nun im Fall $\bar{x} > 0$, $\underline{x}_0 < 0$ ein festes $\tilde{x}_0 \leq 0$, $\tilde{x}_0 \in [x_0]$, sowie ein $\tilde{x} > 0$, $\tilde{x} \in [x]$, mit $\tilde{x} > |\underline{x}_0|$. Zunächst gilt

$$\frac{\partial(\delta_2\varphi(x; \tilde{x}_0))}{\partial x} = \frac{\varphi'(x) + \varphi'(\tilde{x}_0) - 2 \frac{\varphi(x) - \varphi(\tilde{x}_0)}{x - \tilde{x}_0}}{(x - \tilde{x}_0)^2}. \quad (3.18)$$

Aus den Voraussetzungen des Satzes folgt $\varphi''(x) \geq \varphi''(\xi)$ für alle $x \geq |\tilde{x}_0|$ und alle $\xi \in [\tilde{x}_0, x]$. Damit ist die Zählerfunktion

$$z(x) := \varphi'(x) + \varphi'(\tilde{x}_0) - 2 \frac{\varphi(x) - \varphi(\tilde{x}_0)}{x - \tilde{x}_0}, \quad x > |\tilde{x}_0|,$$

aus (3.18) wegen

$$\begin{aligned} \frac{\partial z(x)}{\partial x} &= \varphi''(x) - 2 \frac{\varphi'(x)(x - \tilde{x}_0) - \varphi(x) + \varphi(\tilde{x}_0)}{(x - \tilde{x}_0)^2} \\ &= \varphi''(x) - \varphi''(\xi), \quad \xi \in [\tilde{x}_0, x], \end{aligned}$$

für $x > |\tilde{x}_0|$ monoton wachsend bezüglich x . Auf Grund von

$$\varphi'(|\tilde{x}_0|) + \varphi'(\tilde{x}_0) - 2 \frac{\varphi(|\tilde{x}_0|) - \varphi(\tilde{x}_0)}{|\tilde{x}_0| - \tilde{x}_0} = 0$$

ist damit $\delta_2\varphi(x; \tilde{x}_0)$ für $x > |\tilde{x}_0|$ monoton wachsend bezüglich x , woraus

$$\delta_2\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \delta_2\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) \quad (3.19)$$

folgt. Falls nun $\delta_2\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) \leq \frac{1}{2}\varphi''(\tilde{x}_0)$ ist, so gilt mit (i)

$$\delta_2\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \frac{1}{2}\varphi''(\tilde{x}_0) \leq \delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0).$$

Ist andererseits $\delta_2\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) > \frac{1}{2}\varphi''(\tilde{x}_0)$, dann gilt für die Funktion $g : [\tilde{x}_0, 0] \rightarrow \mathbb{R}$, $g(t) = \delta_2\varphi(\bar{x}; t)$

$$\begin{aligned} g'(t) &= \frac{\partial(\delta_2\varphi(\bar{x}; t))}{\partial t} = 2 \frac{-\frac{1}{2}\varphi''(t) + \delta_2\varphi(\bar{x}; t)}{\bar{x} - t} \\ &\geq 2 \frac{-\frac{1}{2}\varphi''(\tilde{x}_0) + g(t)}{\bar{x} - t} \end{aligned}$$

und

$$g'(\tilde{x}_0) > 0.$$

Daraus folgt, dass g auf $[\tilde{x}_0, 0]$ monoton wachsend ist, und folglich gilt

$$\delta_2\varphi(\bar{x}; \tilde{x}_0) \leq \begin{cases} \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0), & \text{falls } \bar{x}_0 \leq 0, \\ \delta_2\varphi(\bar{x}; 0), & \text{falls } \bar{x}_0 > 0. \end{cases}$$

Mit (3.19) und i) erhalten wir daraus

$$\delta_2\varphi(\tilde{x}; \tilde{x}_0) \leq \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0).$$

iv) Die entsprechenden Fälle für $\underline{x} < 0$, $\bar{x}_0 > 0$ werden analog zu ii) und iii) gezeigt.

Insgesamt folgt damit aus i)-iv) für alle $x \in [x]$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\delta_2\varphi(x; x_0) \leq \max\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}.$$

Für die untere Schranke von $\delta_2\varphi([x]; [x_0])$ in den Fällen mit $0 \in [x]$ gilt:

- Zunächst ist $\delta_2\varphi(x; x_0) = \frac{1}{2}\varphi''(\xi) \geq \frac{1}{2}\varphi''(0)$. Im Fall $0 \in [x_0]$ wird die untere Schranke $\varphi''(0)$ wegen $\delta_2\varphi(0; 0) = \frac{1}{2}\varphi''(0)$ angenommen.
- Nun betrachten wir den Fall $\bar{x}_0 < 0$. Nach (3.17) gilt für alle $x \leq 0$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\begin{aligned} \delta_2\varphi(x; x_0) &\geq \delta_2\varphi(0; \bar{x}_0) \\ &= \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0) - \varphi'(\bar{x}_0) \cdot (0 - \bar{x}_0)}{(0 - \bar{x}_0)^2}, \end{aligned}$$

und auf Grund von

$$\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0) - \varphi'(\bar{x}_0) \cdot (0 - \bar{x}_0) = \frac{1}{2} \varphi''(\xi) \cdot (0 - \bar{x}_0)^2 \geq 0$$

folgt daraus

$$\delta_2 \varphi(x; x_0) \geq \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0) - \varphi'(\bar{x}_0) \cdot (0 - \bar{x}_0)}{(\bar{x} - \bar{x}_0)^2}$$

für alle $x \leq 0$, $x_0 \in [x_0]$.

Wegen $\varphi'(x) = -\varphi'(-x)$ ist $\varphi'(0) = 0$. Mit $\varphi''(x) \geq 0$ erhalten wir $\varphi(x) \geq \varphi(0)$ für alle $x \geq 0$ sowie $\varphi'(x_0) \leq 0$ für alle $x_0 \in [x_0]$. Damit folgt

$$\begin{aligned} \delta_2 \varphi(x; x_0) &= \frac{\varphi(x) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (x - x_0)}{(x - x_0)^2} \\ &\geq \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0)}{(x - x_0)^2} \end{aligned}$$

für alle $x \geq 0$, $x_0 \in [x_0]$. Die Funktion

$$h(x, x_0) := \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0)}{(x - x_0)^2}, \quad x \geq 0, x_0 \in [x_0],$$

ist wegen

$$\begin{aligned} \frac{\partial(h(x, x_0))}{\partial x} &= -2 \cdot \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0)}{(x - x_0)^3} \\ &= -\frac{\varphi''(\xi_1) \cdot (0 - x_0)^2}{(x - x_0)^3}, \quad \xi_1 \in [\underline{x}_0, 0], \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} &\frac{\partial(h(x, x_0))}{\partial x_0} \\ &= \frac{-\varphi''(x_0) \cdot (0 - x_0) \cdot (x - x_0) + 2 \left(\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0) \right)}{(x - x_0)^3} \\ &\leq 2 \cdot \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0) - \frac{1}{2} \varphi''(x_0) \cdot (0 - x_0)^2}{(x - x_0)^3} \\ &= \frac{1}{3} \cdot \frac{\varphi'''(\xi_2) \cdot (0 - x_0)^3}{(x - x_0)^3}, \quad \xi_2 \in [\underline{x}_0, 0], \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

monoton fallend bezüglich x und monoton fallend bezüglich x_0 . Also gilt für alle $x \geq 0$ und alle $x_0 \in [x_0]$

$$\begin{aligned} \delta_2\varphi(x; x_0) &\geq \frac{\varphi(0) - \varphi(x_0) - \varphi'(x_0) \cdot (0 - x_0)}{(x - x_0)^2} \\ &\geq \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0) - \varphi'(\bar{x}_0) \cdot (0 - \bar{x}_0)}{(\bar{x} - \bar{x}_0)^2}. \end{aligned}$$

- Die untere Schranke von $\delta_2\varphi([x]; [x_0])$ im Fall $0 \in [x]$, $\underline{x}_0 > 0$ wird analog zum Fall $\bar{x}_0 < 0$ bewiesen.

□

Analog zu Satz 3.1.15 erhalten wir den folgenden Satz.

Satz 3.1.16 Es sei $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dreimal stetig differenzierbar auf $[x] \subseteq D$, und es sei $[x_0] = [\underline{x}_0, \bar{x}_0] \subseteq [x]$. Ferner sei $\varphi'(x) = -\varphi'(-x)$ auf $\{x \in [x] \mid -x \in [x]\}$, $\varphi''(x) \leq 0$ auf $[x]$, sowie $\varphi'''(x) \geq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \leq 0\}$ und $\varphi'''(x) \leq 0$ auf $\{x \in [x] \mid x \geq 0\}$.

Dann gilt mit

$$\delta_2\varphi([x]; [x_0]) = \begin{cases} [\delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0), \delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0)] & \text{falls } \underline{x} \geq 0, \\ [\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)] & \text{falls } \bar{x} \leq 0, \\ \left[\min\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}, \frac{\varphi(0) - \varphi(\bar{x}_0) - \varphi'(\bar{x}_0) \cdot (0 - \bar{x}_0)}{(\bar{x} - \bar{x}_0)^2} \right] & \text{falls } \underline{x} \leq \bar{x}_0 < 0 < \bar{x}, \\ \left[\min\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}, \frac{\varphi(0) - \varphi(\underline{x}_0) - \varphi'(\underline{x}_0) \cdot (0 - \underline{x}_0)}{(\underline{x} - \underline{x}_0)^2} \right] & \text{falls } \underline{x} < 0 < \underline{x}_0 \leq \bar{x}, \\ \left[\min\{\delta_2\varphi(\underline{x}; \underline{x}_0), \delta_2\varphi(\bar{x}; \bar{x}_0)\}, \frac{1}{2}\varphi''(0) \right] & \text{falls } 0 \in [x] \wedge 0 \in [x_0], \end{cases}$$

die Einschließung

$$\delta_2\varphi([x]; [x_0]) \supseteq \{\delta_2\varphi(x; x_0) \mid x \in [x], x_0 \in [x_0]\}.$$

Die Sätze 2.2.10 sowie 3.1.12 bis 3.1.16 können wir nun verwenden, um für einige Standardfunktionen Einschließungen $\delta\varphi(U_x; U_{x_0})$ und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0})$ von (3.6) bzw. (3.7) zu erhalten. Dabei sei jeweils $U_x = [\underline{u}_x, \overline{u}_x]$ und $U_{x_0} = [\underline{u}_{x_0}, \overline{u}_{x_0}]$.

a) $\varphi(x) = \exp x$:

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\exp(\underline{u}_x) - \exp(\underline{u}_{x_0})}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \frac{\exp(\overline{u}_x) - \exp(\overline{u}_{x_0})}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\exp(\underline{u}_x), \frac{\exp(\overline{u}_x) - \exp(\overline{u}_{x_0})}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\exp(\underline{u}_x) - \exp(\underline{u}_{x_0})}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \exp(\overline{u}_x) \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ \exp(U_x) & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\exp(\underline{u}_x) - \exp(\underline{u}_{x_0}) - \exp(\underline{u}_{x_0}) \cdot (\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})}{(\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})^2}, \frac{\exp(\overline{u}_x) - \exp(\overline{u}_{x_0}) - \exp(\overline{u}_{x_0}) \cdot (\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})}{(\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})^2} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{1}{2} \exp(\underline{u}_x), \frac{\exp(\overline{u}_x) - \exp(\overline{u}_{x_0}) - \exp(\overline{u}_{x_0}) \cdot (\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})}{(\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})^2} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\exp(\underline{u}_x) - \exp(\underline{u}_{x_0}) - \exp(\underline{u}_{x_0}) \cdot (\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})}{(\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})^2}, \frac{1}{2} \exp(\overline{u}_x) \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ \frac{1}{2} \exp(U_x) & \text{sonst.} \end{cases}$$

b) $\varphi(x) = \ln x$, und es sei $\inf(U_x) > 0$:

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\ln(\underline{u}_x) - \ln(\underline{u}_{x_0})}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \frac{\ln(\overline{u}_x) - \ln(\overline{u}_{x_0})}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\ln(\overline{u}_x) - \ln(\overline{u}_{x_0})}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}}, \frac{1}{\underline{u}_x} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{1}{\underline{u}_x}, \frac{\ln(\underline{u}_x) - \ln(\underline{u}_{x_0})}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ 1/U_x & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\ln(\underline{u}_x) - \ln(\underline{u}_{x_0}) - \frac{1}{\underline{u}_{x_0}} \cdot (\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})}{(\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})^2}, \frac{\ln(\overline{u}_x) - \ln(\overline{u}_{x_0}) - \frac{1}{\overline{u}_{x_0}} \cdot (\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})}{(\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})^2} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\underline{u}_x^2}, \frac{\ln(\overline{u}_x) - \ln(\overline{u}_{x_0}) - \frac{1}{\overline{u}_{x_0}} \cdot (\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})}{(\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})^2} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\ln(\underline{u}_x) - \ln(\underline{u}_{x_0}) - \frac{1}{\underline{u}_{x_0}} \cdot (\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})}{(\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})^2}, -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\overline{u}_x^2} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{U_x^2} & \text{sonst.} \end{cases}$$

c) $\varphi(x) = x^k$, $k > 2$, k gerade:

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[k (\underline{u}_x)^{k-1}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, k (\overline{u}_x)^{k-1} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ k \cdot (U_x)^{k-1} & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta_2 \varphi (U_x; U_{x_0}) = \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2}, \frac{\bar{u}_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2} \right] \\ \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_x \neq \bar{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{1}{2} k (k-1) (u_x)^{k-2}, \frac{\bar{u}_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2} \right] \\ \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_x \neq \bar{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2}, \frac{1}{2} k (k-1) (\bar{u}_x)^{k-2} \right] \\ \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_x = \bar{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{u_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2}, \frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_{x_0} \neq \bar{u}_x \leq 0, \\ \left[\frac{\bar{u}_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2}, \frac{1}{2} k (k-1) (u_x)^{k-2} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_{x_0} \neq \bar{u}_x \leq 0, \\ \left[\frac{1}{2} k (k-1) (\bar{u}_x)^{k-2}, \frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_{x_0} = \bar{u}_x \leq 0, \\ \left[z, \max \left\{ \frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2}, \frac{\bar{u}_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2} \right\} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_x < 0 < \bar{u}_x \wedge \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \bar{u}_x \neq \bar{u}_{x_0}, \\ \left[z, \max \left\{ \frac{1}{2} k (k-1) (u_x)^{k-2}, \frac{\bar{u}_x^k - \bar{u}_{x_0}^k - k \cdot \bar{u}_{x_0}^{k-1} \cdot (\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2} \right\} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_{x_0} = \underline{u}_x < 0 < \bar{u}_x \wedge \bar{u}_x \neq \bar{u}_{x_0}, \\ \left[z, \max \left\{ \frac{u_x^k - u_{x_0}^k - k \cdot u_{x_0}^{k-1} \cdot (u_x - u_{x_0})}{(u_x - u_{x_0})^2}, \frac{1}{2} k (k-1) (\bar{u}_x)^{k-2} \right\} \right] \\ \text{falls } \underline{u}_x < 0 < \bar{u}_x = \bar{u}_{x_0} \wedge \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0}, \\ \frac{1}{2} k (k-1) \cdot (U_x)^{k-2} \quad \text{sonst,} \end{array} \right.$$

wobei

$$z := \begin{cases} \frac{(k-1) \cdot \underline{u}_{x_0}^k}{(\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0})^2} & \text{für } \underline{u}_{x_0} < 0, \\ \frac{(k-1) \cdot \overline{u}_{x_0}^k}{(\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0})^2} & \text{für } \overline{u}_{x_0} > 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

d) $\varphi(x) = x^k$, $k > 2$, k ungerade:

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[k (\underline{u}_x)^{k-1}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, k (\overline{u}_x)^{k-1} \right] & \text{falls } 0 \leq \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0}, \\ \left[\frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}}, \frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_{x_0} \neq \overline{u}_x \leq 0, \\ \left[\frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}}, k (\underline{u}_x)^{k-1} \right] & \text{falls } \underline{u}_x = \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_{x_0} \neq \overline{u}_x \leq 0, \\ \left[k (\overline{u}_x)^{k-1}, \frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}} \right] & \text{falls } \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_{x_0} = \overline{u}_x \leq 0, \\ \left[z, \max \left\{ \frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right\} \right] & \text{falls } \underline{u}_x < 0 < \overline{u}_x \wedge \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0} \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[z, \max \left\{ k (\underline{u}_x)^{k-1}, \frac{\overline{u}_x^k - \overline{u}_{x_0}^k}{\overline{u}_x - \overline{u}_{x_0}} \right\} \right] & \text{falls } \underline{u}_{x_0} = \underline{u}_x < 0 < \overline{u}_x \wedge \overline{u}_x \neq \overline{u}_{x_0}, \\ \left[z, \max \left\{ \frac{\underline{u}_x^k - \underline{u}_{x_0}^k}{\underline{u}_x - \underline{u}_{x_0}}, k (\overline{u}_x)^{k-1} \right\} \right] & \text{falls } \underline{u}_x < 0 < \overline{u}_x = \overline{u}_{x_0} \wedge \underline{u}_x \neq \underline{u}_{x_0}, \\ k \cdot (U_x)^{k-1} & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei

$$z := \begin{cases} \frac{-\overline{u_{x_0}}^k}{\underline{u_x} - \overline{u_{x_0}}} & \text{für } \overline{u_{x_0}} < 0, \\ \frac{-\underline{u_{x_0}}^k}{\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}}} & \text{für } \underline{u_{x_0}} > 0, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} \left[\frac{\underline{u_x}^k - \underline{u_{x_0}}^k - k \cdot \underline{u_{x_0}}^{k-1} \cdot (\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}})}{(\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}})^2}, \frac{\overline{u_x}^k - \overline{u_{x_0}}^k - k \cdot \overline{u_{x_0}}^{k-1} \cdot (\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}})}{(\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}})^2} \right] \\ \text{falls } \underline{u_x} \neq \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} \neq \overline{u_{x_0}}, \\ \left[\frac{1}{2} k (k-1) (\underline{u_x})^{k-2}, \frac{\overline{u_x}^k - \overline{u_{x_0}}^k - k \cdot \overline{u_{x_0}}^{k-1} \cdot (\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}})}{(\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}})^2} \right] \\ \text{falls } \underline{u_x} = \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} \neq \overline{u_{x_0}}, \\ \left[\frac{\underline{u_x}^k - \underline{u_{x_0}}^k - k \cdot \underline{u_{x_0}}^{k-1} \cdot (\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}})}{(\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}})^2}, \frac{1}{2} k (k-1) (\overline{u_x})^{k-2} \right] \\ \text{falls } \underline{u_x} \neq \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} = \overline{u_{x_0}}, \\ \frac{1}{2} k (k-1) \cdot (U_x)^{k-2} \quad \text{sonst.} \end{cases}$$

Satz 3.1.17 Für die zuvor unter a) - d) angegebenen Formeln für $\delta\varphi(U_x; U_{x_0})$ und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0})$ gilt

$$\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \in \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \quad (3.20)$$

und

$$\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) \in \delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \quad (3.21)$$

für alle $u_x \in U_x$ und alle $u_{x_0} \in U_{x_0}$.

Beweis:

Die Behauptung folgt jeweils direkt aus den Sätzen 2.2.10 sowie 3.1.12 - 3.1.16, wobei die "Randfälle" $\underline{u_x} = \underline{u_{x_0}}$ bzw. $\overline{u_x} = \overline{u_{x_0}}$ durch

$$\delta\varphi(\underline{u_{x_0}}; \underline{u_{x_0}}) = \varphi'(\underline{u_{x_0}}),$$

$$\delta_2\varphi(\underline{u_{x_0}}; \underline{u_{x_0}}) = \frac{1}{2} \varphi''(\underline{u_{x_0}})$$

bzw. durch

$$\begin{aligned}\delta\varphi(\overline{u_{x_0}}; \overline{u_{x_0}}) &= \varphi'(\overline{u_{x_0}}), \\ \delta_2\varphi(\overline{u_{x_0}}; \overline{u_{x_0}}) &= \frac{1}{2} \varphi''(\overline{u_{x_0}})\end{aligned}$$

abgedeckt sind. □

Bemerkung 3.1.18 Analog wie zuvor für Exponential-, Logarithmus- und Potenzfunktion erhalten wir aus den Sätzen 2.2.10 und 3.1.12 - 3.1.16 auch für die Funktionen $\varphi(x) = \sinh x$ sowie $\varphi(x) = \cosh x$ die Steigungseinschließungen $\delta\varphi(U_x; U_{x_0})$ und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0})$.

3.1.4 Nichtdifferenzierbare stetige Standardfunktionen

Gegeben seien Steigungstupel zweiter Ordnung \mathcal{U} und \mathcal{V} der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$. In diesem Abschnitt zeigen wir, wie wir daraus Steigungstupel zweiter Ordnung für die Funktionen $w(x) = |u(x)|$, $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ und $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$ auf $[x]$ bezüglich x_0 berechnen können. Dadurch können wir dann die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung auf nichtdifferenzierbare stetige Funktionen ausweiten.

1. $w(x) = \varphi(u(x)) = |u(x)|$:

Wir definieren die Auswertung der Betragsfunktion $\varphi(x) = |x|$ auf einem Intervall $[x]$ durch

$$|[x]| = \text{abs}([x]) := \{|x| \mid x \in [x]\} = \left[\min_{x \in [x]} |x|, \max_{x \in [x]} |x| \right].$$

Für unsere Steigungsarithmetik bestimmen wir $\mathcal{W} = \varphi(\mathcal{U}) = \text{abs}(\mathcal{U})$ durch

$$\begin{aligned}W_x &= \text{abs}(U_x), \\ W_{x_0} &= \text{abs}(U_{x_0}), \\ \delta W_{x_0} &= \delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0}, \\ \delta W &= \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U, \\ \delta_2 W &= [r].\end{aligned}$$

Dabei sei

$$\delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) = \begin{cases} [-1, -1] & \text{falls } \overline{u_x} \leq 0 \\ [1, 1] & \text{falls } \underline{u_x} \geq 0 \\ [-1, -1] & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \overline{u_{x_0}} < 0 \\ [1, 1] & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_{x_0}} > 0 \\ [-1, 1] & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) = \begin{cases} [-1, -1] & \text{falls } \overline{u_x} \leq 0 \\ [1, 1] & \text{falls } \underline{u_x} \geq 0 \\ \left[\frac{|\underline{u_x}| - |\underline{u_{x_0}}|}{\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}}}, \frac{|\overline{u_x}| - |\overline{u_{x_0}}|}{\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}}} \right] & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_x} \neq \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} \neq \overline{u_{x_0}} \\ \left[-1, \frac{|\overline{u_x}| - |\overline{u_{x_0}}|}{\overline{u_x} - \overline{u_{x_0}}} \right] & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_x} = \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} \neq \overline{u_{x_0}} \\ \left[\frac{|\underline{u_x}| - |\underline{u_{x_0}}|}{\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}}}, 1 \right] & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_x} \neq \underline{u_{x_0}} \wedge \overline{u_x} = \overline{u_{x_0}} \\ [-1, 1] & \text{sonst} \end{cases}$$

sowie

$$[r] = \begin{cases} -1 \cdot \delta_2 U & \text{falls } \overline{u_x} \leq 0 \\ \delta_2 U & \text{falls } \underline{u_x} \geq 0 \\ \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \left[0, -\frac{1}{2 \cdot \overline{u_{x_0}}} \right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \overline{u_{x_0}} < 0 \wedge -\overline{u_{x_0}} \in U_x \\ \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \left[0, \frac{2 \cdot \overline{u_x}}{(\underline{u_x} - \overline{u_{x_0}})^2} \right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \overline{u_{x_0}} < 0 \wedge -\overline{u_{x_0}} \notin U_x \\ \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \left[0, \frac{1}{2 \cdot \underline{u_{x_0}}} \right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_{x_0}} > 0 \wedge -\underline{u_{x_0}} \in U_x \\ \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \left[0, -\frac{2 \cdot \underline{u_x}}{(\underline{u_x} - \underline{u_{x_0}})^2} \right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U & \text{falls } 0 \in U_x \wedge \underline{u_{x_0}} > 0 \wedge -\underline{u_{x_0}} \notin U_x \\ [-1, 1] \cdot \delta_2 U & \text{sonst.} \end{cases}$$

2. $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$:

Die Auswertung der max-Funktion auf Intervallen $[a]$ und $[b]$ sei definiert durch

$$\max\{[a], [b]\} := [\max\{\underline{a}, \underline{b}\}, \max\{\overline{a}, \overline{b}\}].$$

Für unsere Steigungsarithmetik bestimmen wir $\mathcal{W} = \max \{\mathcal{U}, \mathcal{V}\}$ durch

$$\begin{aligned} W_x &= \max \{U_x, V_x\}, \\ W_{x_0} &= \max \{U_{x_0}, V_{x_0}\}, \\ \delta W_{x_0} &= \begin{cases} \delta U_{x_0} & \text{falls } \underline{u_x} \geq \overline{v_x} \\ \delta V_{x_0} & \text{falls } \underline{v_x} \geq \overline{u_x} \\ \delta U_{x_0} \sqcup \delta V_{x_0} & \text{sonst,} \end{cases} \\ \delta W &= \begin{cases} \delta U & \text{falls } \underline{u_x} \geq \overline{v_x} \\ \delta V & \text{falls } \underline{v_x} \geq \overline{u_x} \\ \delta U \sqcup \delta V & \text{sonst,} \end{cases} \\ \delta_2 W &= \begin{cases} \delta_2 U & \text{falls } \underline{u_x} \geq \overline{v_x} \\ \delta_2 V & \text{falls } \underline{v_x} \geq \overline{u_x} \\ \delta_2 U \sqcup \delta_2 V & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

3. $w(x) = \min \{u(x), v(x)\}$:

Die Auswertung der min-Funktion auf Intervallen $[a]$ und $[b]$ sei definiert durch

$$\min \{[a], [b]\} := [\min \{\underline{a}, \underline{b}\}, \min \{\overline{a}, \overline{b}\}].$$

Analog zu 2. definieren wir $\mathcal{W} = \min \{\mathcal{U}, \mathcal{V}\}$ durch

$$\begin{aligned} W_x &= \min \{U_x, V_x\}, \\ W_{x_0} &= \min \{U_{x_0}, V_{x_0}\}, \\ \delta W_{x_0} &= \begin{cases} \delta U_{x_0} & \text{falls } \overline{u_x} \leq \underline{v_x} \\ \delta V_{x_0} & \text{falls } \overline{v_x} \leq \underline{u_x} \\ \delta U_{x_0} \sqcup \delta V_{x_0} & \text{sonst,} \end{cases} \\ \delta W &= \begin{cases} \delta U & \text{falls } \overline{u_x} \leq \underline{v_x} \\ \delta V & \text{falls } \overline{v_x} \leq \underline{u_x} \\ \delta U \sqcup \delta V & \text{sonst,} \end{cases} \\ \delta_2 W &= \begin{cases} \delta_2 U & \text{falls } \overline{u_x} \leq \underline{v_x} \\ \delta_2 V & \text{falls } \overline{v_x} \leq \underline{u_x} \\ \delta_2 U \sqcup \delta_2 V & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Satz 3.1.19 Es seien \mathcal{U} und \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$. Dann gilt:

- Das unter 1. definierte Tupel $\mathcal{W} = \varphi(\mathcal{U}) = \text{abs}(\mathcal{U})$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $w : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $w(x) = \varphi(u(x)) = |u(x)|$ auf $[x]$ bezüglich x_0 .
- Das unter 2. definierte Tupel $\mathcal{W} = \max\{\mathcal{U}, \mathcal{V}\}$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $w : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ auf $[x]$ bezüglich x_0 .
- Das unter 3. definierte Tupel $\mathcal{W} = \min\{\mathcal{U}, \mathcal{V}\}$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $w : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$ auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Beweis:

Die für W_x , W_{x_0} und δW zu tätigen Schlüsse wurden in [38] durchgeführt. Es bleiben somit noch die Relationen aus (3.4) für δW_{x_0} sowie $\delta_2 W$ nachzuprüfen.

1. $w(x) = \varphi(u(x)) = |u(x)|$:

i) Für den Beweis von $\delta w_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \delta W_{x_0}$ können wir o.B.d.A. $u(x) \neq u(x_0)$ voraussetzen. Für jedes $x \in [x]$ mit $u(x) \neq u(x_0)$ gilt nämlich

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= |u(x)| - |u(x_0)| \\ &\in a \cdot (u(x) - u(x_0)) \end{aligned}$$

für ein beliebiges Intervall $a = [\underline{a}, \bar{a}]$ oder ein beliebiges $a \in \mathbb{R}$, und der weitere Beweis verläuft analog zum Folgenden.

Wegen

$$\frac{w(x) - w(x_0)}{x - x_0} = \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0}$$

folgt

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) = -1 \cdot \delta u_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq -1 \cdot \delta U_{x_0} \quad \text{für } \overline{u_{x_0}} < 0 \text{ bzw. für } \overline{u_x} \leq 0,$$

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) = 1 \cdot \delta u_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \delta U_{x_0} \quad \text{für } \underline{u_{x_0}} > 0 \text{ bzw. für } \underline{u_x} \geq 0$$

und

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq [-1, 1] \cdot \delta u_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq [-1, 1] \cdot \delta U_{x_0} \quad \text{sonst.}$$

ii) Im Fall $\overline{u_x} \leq 0$ ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= |u(x)| - |u(x_0)| \\ &= -u(x) + u(x_0) \\ &= -1 \cdot (u(x) - u(x_0)) \\ &\in -1 \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) - 1 \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Also ist in diesem Fall mit $\delta_2 W = -1 \cdot \delta_2 U$ die Relation aus (3.4) erfüllt.

Der Nachweis für den Fall $\underline{u}_x \geq 0$ wird analog durchgeführt.

iii) Nun betrachten wir den Fall $0 \in U_x \wedge \overline{u_{x_0}} < 0 \wedge -\overline{u_{x_0}} \in U_x$.

Für alle $x \in [x]$ mit $u(x) \geq 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & w(x) - w(x_0) \\
 = & |u(x)| - |u(x_0)| \\
 = & \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot (u(x) - u(x_0)) \\
 \in & \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \left(\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \right) \\
 = & \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\
 = & \left(-1 + \frac{2u(x)}{u(x) - u(x_0)} \right) \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\
 = & -\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \left(\frac{|u(x)| - |u(x_0)|}{u(x) - u(x_0)} \cdot \delta_2 U \right. \\
 & \left. + \frac{2u(x)}{(u(x) - u(x_0))^2} \cdot \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0} \cdot \delta U_{x_0} \right) \cdot (x - x_0)^2
 \end{aligned}$$

Wegen $u(x) \geq 0$ ist

$$0 \leq \frac{2u(x)}{(u(x) - u(x_0))^2} \leq \frac{2u(x)}{(u(x) - \overline{u_{x_0}})^2}.$$

Durch Extremwertberechnung folgt mit Hilfe von $u(x) \geq 0$ und der Voraussetzung $-\overline{u_{x_0}} \in U_x$, dass

$$\frac{2u(x)}{(u(x) - \overline{u_{x_0}})^2} \leq \frac{2(-\overline{u_{x_0}})}{(-\overline{u_{x_0}} - \overline{u_{x_0}})^2}$$

und damit

$$\frac{2u(x)}{(u(x) - u(x_0))^2} \in \left[0, -\frac{1}{2\overline{u_{x_0}}} \right] \quad (3.22)$$

gilt. Insgesamt haben wir somit für $u(x) \geq 0$ gezeigt, dass

$$\left. \begin{aligned}
 w(x) - w(x_0) \in & -\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \left(\delta \varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U \right. \\
 & \left. + \left[0, -\frac{1}{2\overline{u_{x_0}}} \right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U \right) \cdot (x - x_0)^2
 \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

ist.

Für alle $x \in [x]$ mit $u(x) < 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= |u(x)| - |u(x_0)| \\ &= -(u(x) - u(x_0)) \\ &\in -\delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) - \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Wegen $-1 \in \delta\varphi(U_x; U_{x_0})$ und $0 \in \left[0, -\frac{1}{2\bar{u}_{x_0}}\right]$ ist

$$\begin{aligned} &-1 \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2 \\ &\subseteq \left(\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \left[0, -\frac{1}{2\bar{u}_{x_0}}\right] \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U \right) \cdot (x - x_0)^2, \end{aligned}$$

und damit ist (3.23) auch für alle $x \in [x]$ mit $u(x) < 0$ erfüllt. Somit ist der dritte Fall für $\delta_2 W$ bewiesen.

iv) Der vierte Fall, d. h. der Fall $0 \in U_x \wedge \bar{u}_{x_0} < 0 \wedge -\bar{u}_{x_0} \notin U_x$, kann analog zum dritten Fall bewiesen werden, wobei sich an Stelle von (3.22)

$$\frac{2 \cdot u(x)}{(u(x) - u(x_0))^2} \in \left[0, \frac{2 \cdot \bar{u}_x}{(\bar{u}_x - \bar{u}_{x_0})^2}\right]$$

ergibt.

v) Der fünfte und der sechste Fall für $\delta_2 W$ lassen sich analog zu den Fällen drei und vier nachweisen.

vi) Es verbleibt der siebte Fall für $\delta_2 W$. Wegen

$$u(x) - u(x_0) \in \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2$$

ist

$$\begin{aligned} |u(x)| - |u(x_0)| &\in [-1, 1] \cdot (u(x) - u(x_0)) \\ &\subseteq [-1, 1] \cdot \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + [-1, 1] \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2, \end{aligned}$$

womit schließlich der siebte Fall nachgewiesen ist.

2. $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$:

Zunächst ist

$$w(x) = \max\{u(x), v(x)\} \in \max\{U_x, V_x\} = W_x$$

und

$$w(x_0) = \max\{u(x_0), v(x_0)\} \in \max\{U_{x_0}, V_{x_0}\} = W_{x_0},$$

was die Behauptung für W_x und W_{x_0} nachweist.

Für den Fall, dass $\max\{u(x), v(x)\} = u(x)$ und $\max\{u(x_0), v(x_0)\} = u(x_0)$ ist, gilt

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \max\{u(x), v(x)\} - \max\{u(x_0), v(x_0)\} \\ &= u(x) - u(x_0) \\ &= \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0} \cdot (x - x_0), \end{aligned}$$

woraus

$$\delta w_{\lim}([x_0]) = \delta u_{\lim}([x_0]) \subseteq \delta U_{x_0}$$

sowie

$$w(x) - w(x_0) \in \delta U \cdot (x - x_0)$$

folgt. Außerdem ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) - u(x_0) \\ &\in \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Damit ist insbesondere der Fall $\underline{u}_x \geq \overline{v}_x$ abgedeckt.

Der Fall, dass $\max\{u(x), v(x)\} = v(x)$ und $\max\{u(x_0), v(x_0)\} = v(x_0)$ ist, wird analog bewiesen.

Nun zeigen wir die Behauptung für den Fall, dass $\max\{u(x), v(x)\} = u(x)$ und $\max\{u(x_0), v(x_0)\} = v(x_0)$ ist. Mit Hilfe von

$$v(x) - v(x_0) \leq u(x) - v(x_0) \leq u(x) - u(x_0)$$

folgt dann

$$\begin{aligned} \delta w_{\lim}([x_0]) &\subseteq \delta U_{x_0} \underline{\cup} \delta V_{x_0}, \\ w(x) - w(x_0) &\in (\delta U \underline{\cup} \delta V) \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

sowie

$$w(x) - w(x_0) \in (\delta U_{x_0} \underline{\cup} \delta V_{x_0}) \cdot (x - x_0) + (\delta_2 U \underline{\cup} \delta_2 V) \cdot (x - x_0)^2.$$

Der Fall, dass $\max\{u(x), v(x)\} = v(x)$ und $\max\{u(x_0), v(x_0)\} = u(x_0)$ ist, wird wiederum analog bewiesen. Insgesamt haben wir damit alle Fälle abgedeckt und die Behauptung für δW_{x_0} , δW und $\delta_2 W$ gezeigt.

3. $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$:

Der Beweis verläuft analog zum Beweis für $w = \max\{u, v\}$.

□

3.1.5 Die If-Then-Else-Funktion

Im Rahmen der automatischen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung wollen wir auch stetige Funktionen untersuchen, die abschnittsweise definiert sind und mit Hilfe einer if-then-else-Vorschrift beschrieben werden können. Dazu definieren wir zunächst die Funktion $\text{ite} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ ("if-then-else").

Definition 3.1.20 Wir definieren $\text{ite} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\text{ite}(z, u, v) := \begin{cases} u & \text{falls } z < 0 \\ v & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.24)$$

Im Folgenden seien die stetigen Funktionen $u, v, z : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben, und es sei $[x] \subseteq D$. Wir betrachten die Funktion $w : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x)). \quad (3.25)$$

Lemma 3.1.21 Ist für jedes $\hat{x} \in [x]$ mit $z(\hat{x}) = 0$ die Bedingung

$$u(\hat{x}) = v(\hat{x}) \quad (3.26)$$

erfüllt, so ist $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ stetig auf $[x]$.

Beweis:

Es sei $x_0 \in [x]$ beliebig. Falls $z(x_0) < 0$, so gibt es auf Grund der Stetigkeit von z eine Umgebung $U(x_0)$ mit $z(x) < 0$ für alle $x \in U(x_0)$. Damit ist $w(x) = u(x)$ für alle $x \in U(x_0)$, woraus die Stetigkeit von w in x_0 folgt. Analog folgt im Fall $z(x_0) > 0$ die Stetigkeit von w in x_0 . Falls $z(x_0) = 0$, so ist nach Voraussetzung $u(x_0) = v(x_0)$. Für jede Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $[x]$, mit

$$x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x_0$$

gilt somit wegen

$$w(x_n) = \begin{cases} u(x_n) & \text{falls } z(x_n) < 0 \\ v(x_n) & \text{falls } z(x_n) \geq 0, \end{cases}$$

dass

$$w(x_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} u(x_0) = v(x_0) = w(x_0).$$

Folglich ist w stetig in x_0 . □

Bemerkung 3.1.22 Beachte, dass aus $w(x)$ stetig und $z(\hat{x}) = 0$ nicht folgt, dass $u(\hat{x}) = v(\hat{x})$ ist.

Mit Hilfe von (3.24) und (3.25) können Funktionen dargestellt werden, die abschnittsweise definiert sind.

Beispiel 3.1.23 Es seien $z, u, v : [x] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $z(x) = x - 1$, $u(x) = x^2$ und $v(x) = e^{x-1}$ für $x \in [-5, 5]$. Dann folgt, dass

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = \begin{cases} x^2 & \text{falls } x < 1 \\ e^{x-1} & \text{falls } x \geq 1 \end{cases} \quad (3.27)$$

ist. Da (3.26) erfüllt ist, ist $w(x)$ aus (3.27) stetig auf $[-5, 5]$.

Definition 3.1.24 Für die Auswertung der ite-Funktion auf Intervallen $[z] = [\underline{z}, \bar{z}]$, $[u] = [\underline{u}, \bar{u}]$ und $[v] = [\underline{v}, \bar{v}]$ definieren wir

$$\text{ite}([z], [u], [v]) := \begin{cases} [u] & \text{falls } \bar{z} < 0 \\ [v] & \text{falls } \underline{z} \geq 0 \\ [u] \sqcup [v] & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.28)$$

Dabei ist $[u] \sqcup [v]$ nach Definition 1.2.5 das kleinste Intervall, das sowohl $[u]$ als auch $[v]$ enthält, d. h.

$$[u] \sqcup [v] = [\min\{\underline{u}, \underline{v}\}, \max\{\bar{u}, \bar{v}\}].$$

Bemerkung 3.1.25 Definition 3.1.24 hat zur Folge, dass für $[z_1] \subseteq [z_2]$, $[u_1] \subseteq [u_2]$ und $[v_1] \subseteq [v_2]$ die Teilmengenbeziehung

$$\text{ite}([z_1], [u_1], [v_1]) \subseteq \text{ite}([z_2], [u_2], [v_2])$$

erfüllt ist.

Sind daher die Funktionen z , u und v inklusionsmonoton, so ist auch die Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ inklusionsmonoton.

Steigungstupel für die Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$

Gegeben seien auf einem Intervall $[x] \subseteq \mathbb{R}$ die stetigen Funktionen $u(x)$, $v(x)$ und $z(x)$ mit zugehörigen Steigungstupeln zweiter Ordnung \mathcal{U} , \mathcal{V} und \mathcal{Z} bezüglich $x_0 \in [x]$. Ferner sei die Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ auf $[x]$ stetig. Für die Arithmetik zur automatischen Steigungsberechnung suchen wir ein Steigungstupel zweiter Ordnung $\mathcal{W} := \text{ite}(\mathcal{Z}, \mathcal{U}, \mathcal{V})$ von $w(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Wir bestimmen $\mathcal{W} = \text{ite}(\mathcal{Z}, \mathcal{U}, \mathcal{V})$ durch

$$W_x = \text{ite}(Z_x, U_x, V_x),$$

$$W_{x_0} = \text{ite}(Z_{x_0}, U_{x_0}, V_{x_0}),$$

$$\delta W_{x_0} = \begin{cases} \delta U_{x_0} & \text{falls } \overline{z_x} < 0 \\ \delta V_{x_0} & \text{falls } \underline{z_x} \geq 0 \\ \delta U_{x_0} \sqcup (\delta V_{x_0} + (\delta U_{x_0} - \delta V_{x_0}) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0 \\ \delta V_{x_0} \sqcup (\delta U_{x_0} + (\delta V_{x_0} - \delta U_{x_0}) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \underline{z_{x_0}} \geq 0 \\ \left(\delta U_{x_0} \sqcup (\delta V_{x_0} + (\delta U_{x_0} - \delta V_{x_0}) \cdot [0, 1]) \right) & \\ \sqcup \left(\delta V_{x_0} \sqcup (\delta U_{x_0} + (\delta V_{x_0} - \delta U_{x_0}) \cdot [0, 1]) \right) & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta W = \begin{cases} \delta U & \text{falls } \overline{z_x} < 0 \\ \delta V & \text{falls } \underline{z_x} \geq 0 \\ \delta U \sqcup (\delta V + (\delta U - \delta V) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0 \\ \delta V \sqcup (\delta U + (\delta V - \delta U) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \underline{z_{x_0}} \geq 0 \\ \left(\delta U \sqcup (\delta V + (\delta U - \delta V) \cdot [0, 1]) \right) & \\ \sqcup \left(\delta V \sqcup (\delta U + (\delta V - \delta U) \cdot [0, 1]) \right) & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$\delta_2 W = \begin{cases} \delta U & \text{falls } \overline{z_x} < 0 \\ \delta V & \text{falls } \underline{z_x} \geq 0 \\ \delta_2 U \sqcup (\delta_2 V + (\delta_2 U - \delta_2 V) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0 \\ \delta_2 V \sqcup (\delta_2 U + (\delta_2 V - \delta_2 U) \cdot [0, 1]) & \text{falls } 0 \in Z_x \wedge \underline{z_{x_0}} \geq 0 \\ \left(\delta_2 U \sqcup (\delta_2 V + (\delta_2 U - \delta_2 V) \cdot [0, 1]) \right) & \\ \sqcup \left(\delta_2 V \sqcup (\delta_2 U + (\delta_2 V - \delta_2 U) \cdot [0, 1]) \right) & \text{sonst.} \end{cases}$$

Satz 3.1.26 Es seien \mathcal{U}, \mathcal{V} und \mathcal{Z} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $v : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $z : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$. Ferner sei die Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ stetig. Dann ist das oben definierte Tupel $\mathcal{W} = \text{ite}(\mathcal{Z}, \mathcal{U}, \mathcal{V})$ ein Steigungstupel zweiter Ordnung von w auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Beweis:

Zunächst gilt mit Bemerkung 3.1.25

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) \in \text{ite}(Z_x, U_x, V_x) = W_x$$

und

$$w(x_0) = \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \in \text{ite}(Z_{x_0}, U_{x_0}, V_{x_0}) = W_{x_0},$$

womit die Behauptung für W_x und W_{x_0} bewiesen ist.

Es bleiben also noch die Steigungstapel-Eigenschaften für δW_{x_0} , δW und $\delta_2 W$ nachzuweisen.

- Für den Fall, dass $\overline{z_x} < 0$ ist, gilt

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\ &= u(x) - u(x_0), \end{aligned}$$

woraus

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) = \delta u_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \delta U_{x_0}$$

sowie

$$w(x) - w(x_0) \in \delta U \cdot (x - x_0) = \delta W \cdot (x - x_0)$$

folgt. Ferner ist

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) &= u(x) - u(x_0) \\ &\in \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Analog wird der Fall $\underline{z_x} \geq 0$ bewiesen.

- Nun betrachten wir den Fall $0 \in Z_x$ und $\overline{z_{x_0}} < 0$:

Wegen $\overline{z_{x_0}} < 0$ ist $\text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) = u(x_0)$. Auf Grund der Stetigkeit der Funktion z gilt $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = u(x)$ in einer Umgebung von x_0 und damit offensichtlich auch

$$\delta w_{\text{lim}}([x_0]) = \delta u_{\text{lim}}([x_0]) \subseteq \delta U_{x_0} \subseteq \delta W_{x_0}.$$

Es ist leicht einzusehen, dass in dieser Umgebung auch die Bedingungen für δW_x und $\delta_2 W$ erfüllt sind, da \mathcal{U} ein Steigungstapel zweiter Ordnung der Funktion $u(x)$ ist. Andererseits kann es aus Stetigkeitsgründen ein $\tilde{x} \in [x]$, $\tilde{x} \geq x_0$, mit

$$\text{ite}(z(\tilde{x}), u(\tilde{x}), v(\tilde{x})) = v(\tilde{x})$$

nur dann geben, wenn ein $x_s \in [x]$, $x_s \geq x_0$, $|x_s - x_0| \leq |\tilde{x} - x_0|$, mit $u(x_s) = v(x_s)$ existiert. Für dieses x_s gilt dann

$$u(x_s) = u(x_0) + \delta u(x_s; x_0) \cdot (x_s - x_0)$$

sowie

$$v(x_s) = v(x_0) + \delta v(x_s; x_0) \cdot (x_s - x_0)$$

und damit durch Gleichsetzen

$$v(x_0) - u(x_0) = (\delta u(x_s; x_0) - \delta v(x_s; x_0)) \cdot (x_s - x_0).$$

Also gilt für alle $x \in [x]$ mit $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = v(x)$

$$\begin{aligned}
& \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
&= v(x) - u(x_0) \\
&= v(x_0) + \delta v(x; x_0) \cdot (x - x_0) - u(x_0) \\
&= \left(\delta v(x; x_0) + (\delta u(x_s; x_0) - \delta v(x_s; x_0)) \cdot \frac{x_s - x_0}{x - x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\
&\in (\delta V + (\delta U - \delta V) \cdot [0, 1]) \cdot (x - x_0).
\end{aligned}$$

Da ferner für alle $x \in [x]$ mit $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = u(x)$

$$\begin{aligned}
& \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
&= u(x) - u(x_0) \\
&\in \delta U \cdot (x - x_0)
\end{aligned}$$

gilt, folgt somit für alle $x \in [x]$

$$\begin{aligned}
& \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
&\in \left(\delta U \sqcup (\delta V + (\delta U - \delta V) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0) \\
&= \delta W \cdot (x - x_0).
\end{aligned}$$

Analog gehen wir für den Nachweis der Formel für $\delta_2 W$ vor. Wiederum kann es aus Stetigkeitsgründen nur dann ein $\tilde{x} \in [x]$, $\tilde{x} \geq x_0$, mit

$$\text{ite}(z(\tilde{x}), u(\tilde{x}), v(\tilde{x})) = v(\tilde{x})$$

geben, wenn ein $x_s \in [x]$, $x_s \geq x_0$, $|x_s - x_0| \leq |\tilde{x} - x_0|$, mit $u(x_s) = v(x_s)$ existiert. Für dieses x_s gilt dann

$$u(x_s) = u(x_0) + \delta u_s \cdot (x_s - x_0) + \delta_2 u_s \cdot (x_s - x_0)^2$$

sowie

$$v(x_s) = v(x_0) + \delta v_s \cdot (x_s - x_0) + \delta_2 v_s \cdot (x_s - x_0)^2$$

für ein $\delta u_s \in \delta U_{x_0}$ und ein $\delta_2 u_s \in \delta_2 U$ bzw. ein $\delta v_s \in \delta V_{x_0}$ und ein $\delta_2 v_s \in \delta_2 V$. Damit ist

$$v(x_0) - u(x_0) = (\delta u_s - \delta v_s) \cdot (x_s - x_0) + (\delta_2 u_s - \delta_2 v_s) \cdot (x_s - x_0)^2.$$

Außerdem gibt es, da \mathcal{V} ein Steigungstupel zweiter Ordnung von v auf $[x]$ ist, zu jedem $x \in [x]$ ein $\delta v_{x_0} \in \delta V_{x_0}$ und ein $\delta_2 v \in \delta_2 V$ mit

$$v(x) = v(x_0) + \delta v_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 v \cdot (x - x_0)^2.$$

Folglich gilt für alle $x \in [x]$ mit $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = v(x)$

$$\begin{aligned}
 & \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
 = & v(x) - u(x_0) \\
 = & v(x_0) + \delta v_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 v \cdot (x - x_0)^2 - u(x_0) \\
 = & \left(\delta v_{x_0} + (\delta u_s - \delta v_s) \cdot \frac{x_s - x_0}{x - x_0} \right) \cdot (x - x_0) \\
 & + \left(\delta_2 v + (\delta_2 u_s - \delta_2 v_s) \cdot \frac{(x_s - x_0)^2}{(x - x_0)^2} \right) \cdot (x - x_0)^2 \\
 \in & (\delta V_{x_0} + (\delta U_{x_0} - \delta V_{x_0}) \cdot [0, 1]) \cdot (x - x_0) \\
 & + (\delta_2 V + (\delta_2 U - \delta_2 V) \cdot [0, 1]) \cdot (x - x_0)^2.
 \end{aligned}$$

Da für alle $x \in [x]$ mit $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = u(x)$

$$\begin{aligned}
 & \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
 = & u(x) - u(x_0) \\
 \in & \delta U_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 U \cdot (x - x_0)^2
 \end{aligned}$$

gilt, folgt somit für alle $x \in [x]$

$$\begin{aligned}
 & \text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\
 \in & \left(\delta U_{x_0} \sqcup (\delta V_{x_0} + (\delta U_{x_0} - \delta V_{x_0}) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0) \\
 & + \left(\delta_2 U \sqcup (\delta_2 V + (\delta_2 U - \delta_2 V) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0)^2 \\
 = & \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2.
 \end{aligned}$$

- Beweis für den Fall $0 \in Z_x$ und $\underline{z_{x_0}} \geq 0$:

Zunächst gilt

$$\begin{aligned}
 \delta w_{\lim}([x_0]) & \subseteq \delta u_{\lim}([x_0]) \sqcup \delta v_{\lim}([x_0]) \\
 & \subseteq \delta U_{x_0} \sqcup \delta V_{x_0} \\
 & \subseteq \delta W_{x_0}.
 \end{aligned}$$

Wegen $\underline{z_{x_0}} \geq 0$ ist $w(x_0) = \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) = v(x_0)$. Da w stetig ist, kann es ein $\tilde{x} \in [x]$, $\tilde{x} \geq x_0$, mit

$$\text{ite}(z(\tilde{x}), u(\tilde{x}), v(\tilde{x})) = u(\tilde{x})$$

nur dann geben, wenn ein $x_s \in [x]$, $x_s \geq x_0$, $|x_s - x_0| \leq |\tilde{x} - x_0|$, mit $u(x_s) = v(x_s)$ existiert oder wenn $u(x_0) = v(x_0)$. Im ersten Fall erhalten wir analog zum Fall $0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0$

$$w(x) - w(x_0) \in \left(\delta V \sqcup (\delta U + (\delta V - \delta U) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0)$$

sowie

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) \in & \left(\delta V_{x_0} \sqcup (\delta U_{x_0} + (\delta V_{x_0} - \delta U_{x_0}) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0) \\ & + \left(\delta_2 V \sqcup (\delta_2 U + (\delta_2 V - \delta_2 U) \cdot [0, 1]) \right) \cdot (x - x_0)^2, \end{aligned}$$

und im Fall $u(x_0) = v(x_0)$ gilt offenbar

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) \in & (\delta U \sqcup \delta V) \cdot (x - x_0) \\ \subseteq & \delta W \cdot (x - x_0) \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} w(x) - w(x_0) \in & (\delta U_{x_0} \sqcup \delta V_{x_0}) \cdot (x - x_0) + (\delta_2 U \sqcup \delta_2 V) \cdot (x - x_0)^2 \\ \subseteq & \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2. \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich daraus

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W \cdot (x - x_0)$$

und

$$w(x) - w(x_0) \in \delta W_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 W \cdot (x - x_0)^2$$

für alle $x \in [x]$.

- In den sonstigen Fällen, d. h. falls $\overline{z_x} \geq 0 \wedge \underline{z_x} < 0 \wedge \overline{z_{x_0}} \geq 0 \wedge \underline{z_{x_0}} < 0$, gilt:
 - (i) Falls $z(x_0) < 0$, so können wir völlig analog zum Fall $0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0$ vorgehen und erhalten die gleichen Ergebnisse.
 - (ii) Falls $z(x_0) \geq 0$, so können wir genau wie im Fall $0 \in Z_x \wedge \underline{z_{x_0}} \geq 0$ vorgehen und erhalten die gleichen Resultate.
 Insgesamt erhält man aus der Vereinigung von (i) und (ii) ähnlich wie in den Fällen zuvor die Behauptung. □

Bemerkung 3.1.27 Es seien $\mathcal{Z} = (Z_x, Z_{x_0}, \delta Z)$, $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U)$ sowie $\mathcal{V} = (V_x, V_{x_0}, \delta V)$ Steigungstupel erster Ordnung (siehe Definition 2.1.3) der stetigen Funktionen $z(x)$, $u(x)$ und $v(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 . Ferner sei

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$$

stetig. In [20] und [38] soll ein Steigungstupel erster Ordnung $\mathcal{W} = (W_x, W_{x_0}, \delta W)$ für $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ auf folgende Weise bestimmt werden:

$$W_x = \text{ite}(Z_x, U_x, V_x) \tag{3.29}$$

$$W_{x_0} = \text{ite}(Z_{x_0}, U_{x_0}, V_{x_0}) \tag{3.30}$$

$$\delta W = \begin{cases} \delta U & \text{falls } \overline{z_x} < 0 \\ \delta V & \text{falls } \underline{z_x} > 0 \\ \delta U \sqcup \delta V & \text{sonst.} \end{cases} \tag{3.31}$$

Falls jedoch $0 \in Z_x$, so bilden W_x, W_{x_0} und δW kein Steigungstupel erster Ordnung im Sinne von Definition 2.1.3, denn

$$w(x) \in W_{x_0} + \delta W \cdot ([x] - x_0)$$

ist dann im Widerspruch zu Bemerkung 1.3.12 a) nicht notwendigerweise für alle $x \in [x]$ erfüllt. Folglich können diese Operationen auch nicht bei der Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung verwendet werden. Wir zeigen dies mit folgendem Beispiel.

Beispiel 3.1.28 Es seien $z(x) = x$, $u(x) = x$ und $v(x) = \frac{1}{3}(x+1)^3 - \frac{1}{3}$ auf dem Intervall $[x] = [-3, 1]$. Ferner sei $x_0 = -1$. Wir wollen mit Hilfe von (3.29)-(3.31) ein Steigungstupel erster Ordnung für $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ auf $[x]$ bezüglich x_0 bestimmen.

Wir erhalten

$$\begin{aligned} Z_x &= [-3, 1], & Z_{x_0} &= [-1, -1], & \delta Z &= [1, 1], \\ U_x &= [-3, 1], & U_{x_0} &= [-1, -1], & \delta U &= [1, 1], \\ V_x &= \left[-3, \frac{7}{3}\right], & V_{x_0} &= \left[-\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\right], & \delta V &= \left[0, \frac{4}{3}\right]. \end{aligned}$$

Aus (3.29) folgt

$$W_x = \text{ite}(Z_x, U_x, V_x) = U_x \sqcup V_x = \left[-3, \frac{7}{3}\right],$$

aus (3.30) folgt

$$W_{x_0} = \text{ite}(Z_{x_0}, U_{x_0}, V_{x_0}) = U_{x_0} = [-1, -1],$$

und (3.31) ergibt schließlich

$$\delta W = \delta U \sqcup \delta V = \left[0, \frac{4}{3}\right].$$

Nun ist jedoch

$$W_{x_0} + \delta W \cdot ([x] - x_0) = \left[-\frac{11}{3}, \frac{5}{3}\right]$$

keine Einschließung des exakten Wertebereichs $[-3, \frac{7}{3}]$ von

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$$

auf $[x]$, und damit können (3.29)-(3.31) so nicht für die Steigungsarithmetik verwendet werden. Die Aussage in [20] sowie der Beweis aus Theorem 3.6 in [38] sind damit nicht richtig.

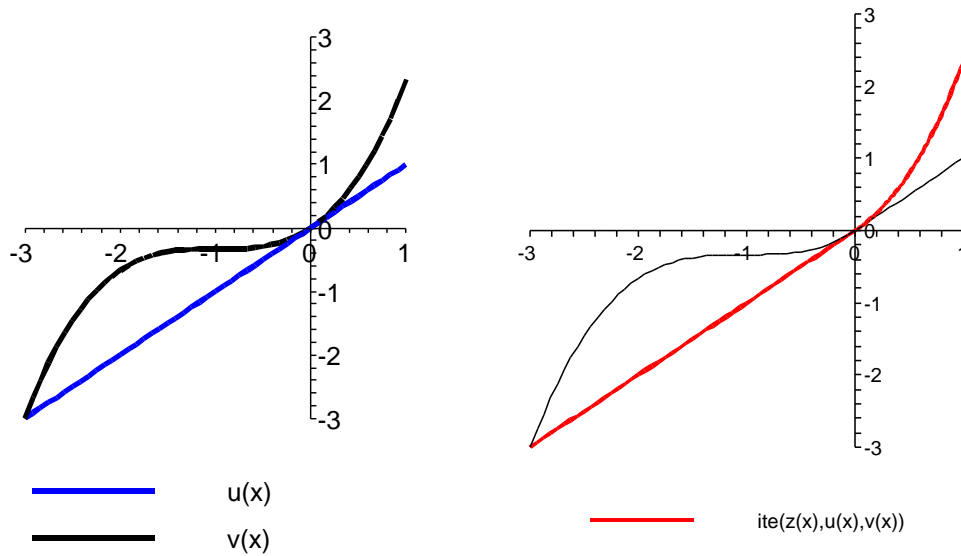


Abbildung 3.1: Die Funktionen $u(x)$, $v(x)$ und $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$

Wir verdeutlichen dieses Beispiel mit den folgenden Diagrammen. Abbildung 3.1 zeigt die Funktionen $u(x)$, $v(x)$ und $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$.

Abbildung 3.2 stellt die Funktion $v(x)$ dar sowie die beiden mit Hilfe von $\delta V = [\underline{\delta v}, \overline{\delta v}]$ definierten Geraden

$$g_1(x) = v(x_0) + \overline{\delta v} \cdot (x - x_0) = -\frac{1}{3} + \frac{4}{3}(x + 1),$$

$$g_2(x) = v(x_0) + \underline{\delta v} \cdot (x - x_0) = -\frac{1}{3},$$

die auf Grund der Steigungseigenschaft von $\delta V = [\underline{\delta v}, \overline{\delta v}]$ den Wertebereich von $v(x)$ auf $[x]$ einschließen.

Abbildung 3.3 verdeutlicht, dass mit den obigen Werten

$$\delta W = [\underline{\delta w}, \overline{\delta w}] = \left[0, \frac{4}{3}\right] = \delta V$$

die beiden Geraden

$$\begin{aligned} h_1(x) &= w(x_0) + \overline{\delta w} \cdot (x - x_0) \\ &= u(x_0) + \overline{\delta w} \cdot (x - x_0) \\ &= -1 + \frac{4}{3}(x + 1) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} h_2(x) &= w(x_0) + \underline{\delta w} \cdot (x - x_0) \\ &= u(x_0) + \underline{\delta w} \cdot (x - x_0) \\ &= -1 \end{aligned}$$

den Wertebereich der Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ nicht einschließen.

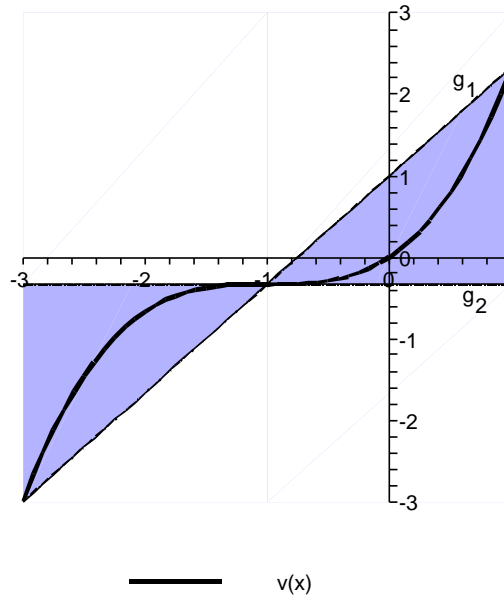


Abbildung 3.2: Die Funktion $v(x)$ sowie die Geraden g_1 und g_2

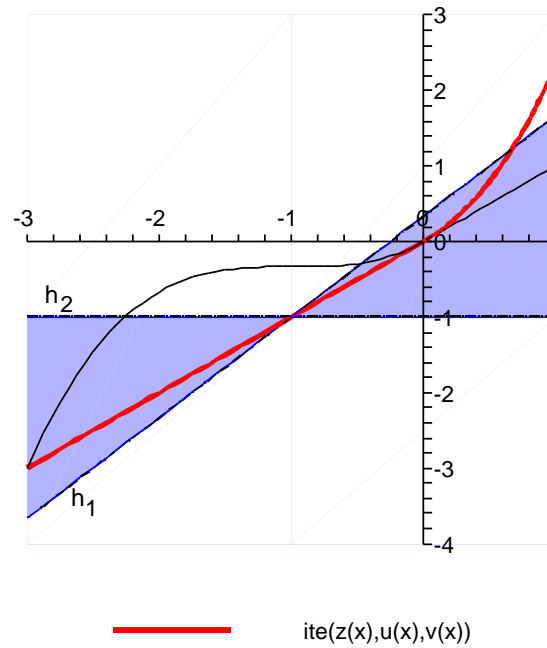


Abbildung 3.3: h_1 und h_2 schließen den Wertebereich nicht ein

Beispiel 3.1.29 Wir wollen nun mit den Operationen aus Satz 3.1.26 ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die Funktion $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$ aus Beispiel 3.1.28 berechnen. Wie zuvor erhalten wir zunächst

$$W_x = \text{ite}(Z_x, U_x, V_x) = \left[-3, \frac{7}{3}\right].$$

Wegen $0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0$ folgt

$$W_{x_0} = U_{x_0} = [-1, -1]$$

und

$$\begin{aligned} \delta W_{x_0} &= \delta U_{x_0} \sqcup \left(\delta V_{x_0} + (\delta U_{x_0} - \delta V_{x_0}) \cdot [0, 1] \right) \\ &= [1, 1] \sqcup \left([0, 0] + ([1, 1] - [0, 0]) \cdot [0, 1] \right) \\ &= [0, 1]. \end{aligned}$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \delta W &= \delta U \sqcup \left(\delta V + (\delta U - \delta V) \cdot [0, 1] \right) \\ &= [1, 1] \sqcup \left(\left[0, \frac{4}{3}\right] + \left([1, 1] - \left[0, \frac{4}{3}\right]\right) \cdot [0, 1] \right) \\ &= \left[-\frac{1}{3}, \frac{7}{3}\right]. \end{aligned}$$

Mit (1.10) ist

$$\delta_2 U = [0, 0]$$

sowie

$$\delta_2 v(x; x_0) = \frac{1}{3}(x - x_0) \in \left[-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right] = \delta_2 V.$$

Folglich gilt

$$\begin{aligned} \delta_2 W &= \delta_2 U \sqcup \left(\delta_2 V + (\delta_2 U - \delta_2 V) \cdot [0, 1] \right) \\ &= [0, 0] \sqcup \left(\left[-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right] + \left([0, 0] - \left[-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}\right]\right) \cdot [0, 1] \right) \\ &= \left[-\frac{4}{3}, \frac{4}{3}\right]. \end{aligned}$$

Damit sind nun

$$\begin{aligned} w(x_0) + \delta W \cdot ([x] - x_0) &= W_{x_0} + \delta W \cdot ([x] - x_0) \\ &= \left[-\frac{17}{3}, \frac{11}{3}\right] \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
 & w(x_0) + \delta W_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 W \cdot ([x] - x_0)^2 \\
 = & W_{x_0} + \delta W_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 W \cdot ([x] - x_0)^2 \\
 = & [-1, -1] + [0, 1] \cdot [-2, 2] + \left[-\frac{4}{3}, \frac{4}{3}\right] \cdot [0, 4] \\
 = & \left[-\frac{25}{3}, \frac{19}{3}\right]
 \end{aligned}$$

jeweils Einschließungen des exakten Wertebereichs $[-3, \frac{7}{3}]$ von

$$w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$$

auf $[x]$.

Abbildung 3.4 zeigt, dass mit $\delta W := [\underline{\delta w}, \overline{\delta w}]$ die beiden Geraden

$$s_1(x) := w(x_0) + \overline{\delta w} \cdot (x - x_0) = -1 + \frac{7}{3}(x + 1)$$

und

$$s_2(x) := w(x_0) + \underline{\delta w} \cdot (x - x_0) = -1 - \frac{1}{3}(x + 1)$$

für jedes $x \in [x]$ den Funktionswert $w(x)$ einschließen.

Ferner zeigt Abbildung 3.5, dass mit $\delta W_{x_0} := [\underline{\delta w_{x_0}}, \overline{\delta w_{x_0}}]$ und $\delta_2 W = [\underline{\delta_2 w}, \overline{\delta_2 w}]$ die vier Parabelstücke

$$t_1(x) := w(x_0) + \overline{\delta w_{x_0}} \cdot (x - x_0) + \underline{\delta_2 w} \cdot (x - x_0)^2 \quad \underline{x} \leq x \leq x_0,$$

$$t_2(x) := w(x_0) + \underline{\delta w_{x_0}} \cdot (x - x_0) + \overline{\delta_2 w} \cdot (x - x_0)^2 \quad \underline{x} \leq x \leq x_0,$$

$$t_3(x) := w(x_0) + \underline{\delta w_{x_0}} \cdot (x - x_0) + \underline{\delta_2 w} \cdot (x - x_0)^2 \quad x_0 \leq x \leq \bar{x},$$

$$t_4(x) := w(x_0) + \overline{\delta w_{x_0}} \cdot (x - x_0) + \overline{\delta_2 w} \cdot (x - x_0)^2 \quad x_0 \leq x \leq \bar{x},$$

ebenfalls für jedes $x \in [x]$ den Funktionswert $w(x)$ einschließen.

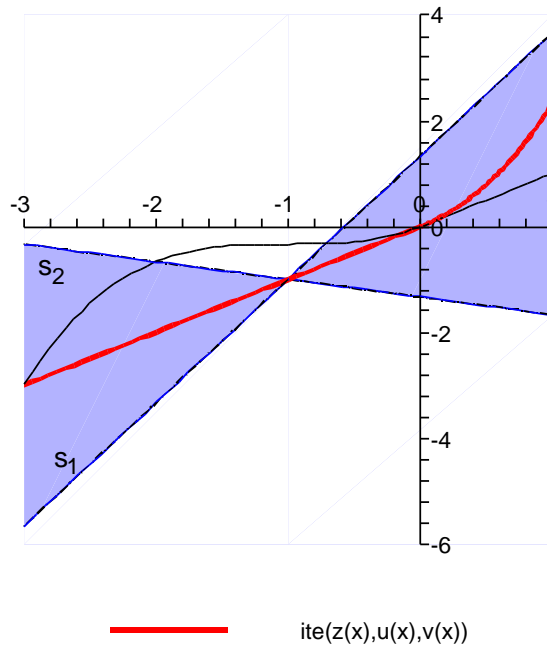
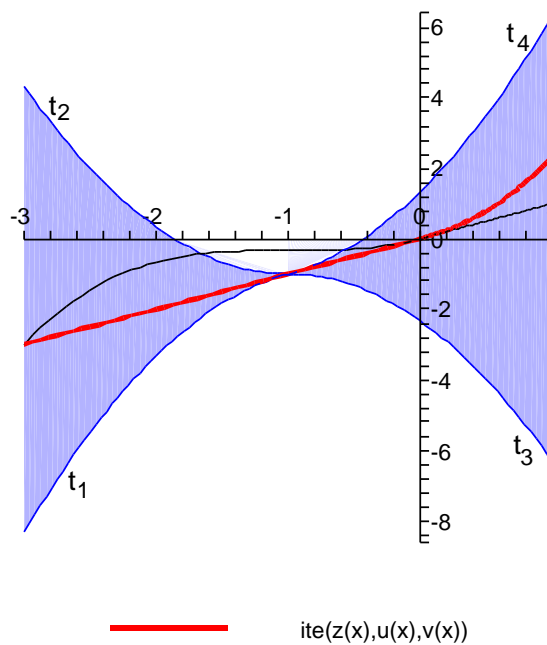
Bemerkung 3.1.30 Auch die in Abschnitt 3.1.4 betrachteten Funktionen $w(x) = |u(x)|$, $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ und $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$ können mit Hilfe einer if-then-else-Vorschrift dargestellt werden. So gilt zum Beispiel für $w(x) = |u(x)|$

$$w(x) = |u(x)| = \text{ite}(u(x), -u(x), u(x)),$$

und für $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ ist

$$w(x) = \max\{u(x), v(x)\} = \text{ite}(v(x) - u(x), u(x), v(x)).$$

Bei der automatischen Steigungsberechnung bevorzugen wir für diese Funktionen die in Abschnitt 3.1.4 definierten Operationen, da diese die spezifischen Eigenschaften der entsprechenden Funktion verwenden.

Abbildung 3.4: Einschließung von $w(x)$ durch die Geraden s_1 und s_2 Abbildung 3.5: Einschließung von $w(x)$ durch die Parabelstücke t_1 , t_2 , t_3 und t_4

3.2 Implementierung und Beispiele

3.2.1 Implementierung

Die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung mit den in diesem Kapitel definierten Operationen soll nun auf einem Rechner implementiert werden. Um Rundungsfehler zu berücksichtigen und gesicherte Einschließungen zu erhalten, wird dabei Maschinenintervallarithmetik [23] eingesetzt. Da dabei die Steigungstupeleigenschaften (3.4) nicht verletzt werden, ist dies ohne weitere Schwierigkeiten möglich. Wir verwenden die Programmiersprache Pascal-XSC [19] unter Nutzung von [12]. Einen aktuellen Pascal-XSC-Compiler stellt die Arbeitsgruppe "Wissenschaftliches Rechnen / Softwaretechnologie" der Universität Wuppertal unter <http://www.xsc.de> bereit.

Im Modul "slopes_second", dessen Programmcode dieser Arbeit beiliegt bzw. im Internet unter <http://iamlasun8.mathematik.uni-karlsruhe.de/~ae26/software/> erhältlich ist, werden die benötigten Typ-Spezifikationen, Operatoren und Elementarfunktionen bereitgestellt. Es ist eine Erweiterung eines Moduls aus [38], wo die automatische Berechnung von Steigungstupeln erster Ordnung implementiert wurde.

3.2.2 Wertebereichseinschließung mit Hilfe von Steigungstupeln zweiter Ordnung

Bevor wir anschließend Beispiele betrachten, gehen wir noch auf einige Details zur Wertebereichseinschließung mit Hilfe von Steigungstupeln zweiter Ordnung ein.

Es sei $\mathcal{F} = (F_x, F_{x_0}, \delta F_{x_0}, \delta F, \delta_2 F)$ ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$. Dann gilt für alle $x \in [x]$

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F \cdot (x - x_0) \quad (3.32)$$

und

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 F \cdot (x - x_0)^2. \quad (3.33)$$

Nach (3.32) ist damit

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F \cdot ([x] - x_0) \quad (3.34)$$

eine Einschließung des Wertebereichs von f auf $[x]$. Für die Wertebereichseinschließung mit Hilfe von (3.33) gibt es mehrere Möglichkeiten. Nach Satz 1.2.2 ist

$$\begin{aligned} & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 F \cdot (x - x_0)^2 \\ = & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot (x - x_0) + \delta_2 F \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_0) \\ = & F_{x_0} + \left(\delta F_{x_0} + \delta_2 F \cdot (x - x_0) \right) \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Somit erhalten wir die Wertebereichseinschließungen

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0)^2, \quad (3.35)$$

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \cdot ([x] - x_0) \quad (3.36)$$

und

$$f(x) \in F_{x_0} + \left(\delta F_{x_0} + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \right) \cdot ([x] - x_0), \quad (3.37)$$

wobei in (3.35) gemäß Definition 1.2.6

$$([x] - x_0)^2 = \left[\min_{x \in [x]} (x - x_0)^2, \max_{x \in [x]} (x - x_0)^2 \right]$$

sei.

Im Folgenden wollen wir untersuchen, welche der Wertebereichseinschließungen (3.35)-(3.37) am genauesten ist. Auf Grund der Subdistributivität gilt

$$\begin{aligned} & F_{x_0} + \left(\delta F_{x_0} + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \right) \cdot ([x] - x_0) \\ \subseteq & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \cdot ([x] - x_0). \end{aligned}$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0)^2 \\ \subseteq & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \cdot ([x] - x_0), \end{aligned}$$

und folglich liefert (3.36) schlechtere Einschließungen als (3.35) und (3.37). Einen Vergleich von (3.35) und (3.37) für den Fall $x_0 = \text{mid}[x]$ liefert der folgende Satz.

Satz 3.2.1 Es seien $F_{x_0}, \delta F_{x_0}, \delta_2 F, [x] \in \mathbb{IR}$ und $x_0 = \text{mid}[x]$. Dann gilt

$$\begin{aligned} & F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0)^2 \\ \subseteq & F_{x_0} + \left(\delta F_{x_0} + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \right) \cdot ([x] - x_0). \end{aligned}$$

Beweis:

Es sei $[x] = [x_0 - d, x_0 + d]$ mit $d \geq 0$ und somit $([x] - x_0)^2 = [-d, d]^2 = [0, d^2]$. Ferner seien $\delta F_{x_0} = [\underline{r}, \bar{r}]$ und $\delta_2 F = [\underline{s}, \bar{s}]$.

Es genügt offensichtlich, die Inklusion

$$[\underline{r}, \bar{r}] \cdot [-d, d] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [0, d^2] \subseteq \left([\underline{r}, \bar{r}] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [-d, d] \right) \cdot [-d, d] \quad (3.38)$$

zu zeigen.

Wegen $\underline{r} \leq \bar{r}$ gilt

$$|[\underline{r}, \bar{r}]| = \max\{|\underline{r}|, |\bar{r}|\} = \max\{-\underline{r}, \bar{r}\}.$$

Im Folgenden sei zunächst $|[\underline{r}, \bar{r}]| = \bar{r}$ angenommen, was $\bar{r} \geq 0$ impliziert.

1. Fall: $\underline{s} \geq 0$:

Für die linke Seite von (3.38) gilt

$$\begin{aligned} [\underline{r}, \bar{r}] \cdot [-d, d] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [0, d^2] &= [-\bar{r}d, \bar{r}d] + [0, \bar{s}d^2] \\ &= [-\bar{r}d, \bar{r}d + \bar{s}d^2], \end{aligned}$$

und für die rechte Seite von (3.38) erhalten wir

$$\left([\underline{r}, \bar{r}] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [-d, d]\right) \cdot [-d, d] = \left([\underline{r} - \bar{s}d, \bar{r} + \bar{s}d]\right) \cdot [-d, d].$$

Wegen

$$(\bar{r} + \bar{s}d)(-d) = -\bar{r}d - \bar{s}d^2 \leq -\bar{r}d$$

und

$$(\bar{r} + \bar{s}d)d = \bar{r}d + \bar{s}d^2$$

folgt

$$[-\bar{r}d, \bar{r}d + \bar{s}d^2] \subseteq \left([\underline{r} - \bar{s}d, \bar{r} + \bar{s}d]\right) \cdot [-d, d]$$

und damit (3.38).

2. Fall: $\bar{s} \leq 0$:

Für die linke Seite von (3.38) gilt

$$[\underline{r}, \bar{r}] \cdot [-d, d] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [0, d^2] = [-\bar{r}d + \underline{s}d^2, \bar{r}d],$$

und für die rechte Seite von (3.38) erhalten wir

$$\left([\underline{r}, \bar{r}] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [-d, d]\right) \cdot [-d, d] = \left([\underline{r} + \underline{s}d, \bar{r} - \underline{s}d]\right) \cdot [-d, d].$$

Wegen

$$(\bar{r} - \underline{s}d)(-d) = -\bar{r}d + \underline{s}d^2$$

und

$$(\bar{r} - \underline{s}d)d = \bar{r}d - \underline{s}d^2 \geq \bar{r}d$$

folgt

$$[-\bar{r}d + \underline{s}d^2, \bar{r}d] \subseteq \left([\underline{r} + \underline{s}d, \bar{r} - \underline{s}d]\right) \cdot [-d, d]$$

und damit (3.38).

3. Fall: $\underline{s} < 0 < \bar{s}$:

Für die linke Seite von (3.38) gilt

$$[\underline{r}, \bar{r}] \cdot [-d, d] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [0, d^2] = [-\bar{r}d + \underline{s}d^2, \bar{r}d + \bar{s}d^2].$$

a) Falls $|\bar{s}| \geq |\underline{s}|$ ist, so folgt für die rechte Seite von (3.38)

$$\left([\underline{r}, \bar{r}] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [-d, d] \right) \cdot [-d, d] = \left([\underline{r} - \bar{s}d, \bar{r} + \bar{s}d] \right) \cdot [-d, d].$$

Wegen

$$(\bar{r} + \bar{s}d)(-d) = -\bar{r}d - \bar{s}d^2 \leq -\bar{r}d + \underline{s}d^2$$

und

$$(\bar{r} + \bar{s}d)d = \bar{r}d + \bar{s}d^2$$

folgt

$$[-\bar{r}d + \underline{s}d^2, \bar{r}d + \bar{s}d^2] \subseteq \left([\underline{r} - \bar{s}d, \bar{r} + \bar{s}d] \right) \cdot [-d, d]$$

und damit (3.38).

b) Falls $|\bar{s}| < |\underline{s}|$ ist, so folgt für die rechte Seite von (3.38)

$$\left([\underline{r}, \bar{r}] + [\underline{s}, \bar{s}] \cdot [-d, d] \right) \cdot [-d, d] = \left([\underline{r} + \underline{s}d, \bar{r} - \underline{s}d] \right) \cdot [-d, d].$$

Wegen

$$(\bar{r} - \underline{s}d)(-d) = -\bar{r}d + \underline{s}d^2$$

und

$$(\bar{r} - \underline{s}d)d = \bar{r}d - \underline{s}d^2 \geq \bar{r}d + \bar{s}d^2$$

folgt

$$[-\bar{r}d + \underline{s}d^2, \bar{r}d + \bar{s}d^2] \subseteq \left([\underline{r} + \underline{s}d, \bar{r} - \underline{s}d] \right) \cdot [-d, d]$$

und damit (3.38).

Damit ist der Satz für den Fall $|\underline{r}, \bar{r}| = \bar{r}$ bewiesen. Falls $|\underline{r}, \bar{r}| = -\underline{r}$ ist, was $\underline{r} \leq 0$ impliziert, so verläuft der Beweis analog.

□

Bemerkung 3.2.2 Für $x_0 \neq \text{mid}[x]$ ist die Aussage von Satz 3.2.1 nicht gültig. Denn es ist zum Beispiel für $F_{x_0} = [0, 0]$, $\delta F_{x_0} = [2, 2]$, $\delta_2 F = [1, 2]$, $[x] = [0, 4]$ und $x_0 = 3$

$$\begin{aligned} F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0)^2 &= [2, 2] \cdot [-3, 1] + [1, 2] \cdot [0, 9] \\ &= [-6, 20] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} F_{x_0} + \left(\delta F_{x_0} + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) \right) \cdot ([x] - x_0) &= \left([2, 2] + [1, 2] \cdot [-3, 1] \right) \cdot [-3, 1] \\ &= [-12, 12]. \end{aligned}$$

3.2.3 Beispiele

Die in diesem Kapitel eingeführte automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung wollen wir nun beispielhaft auf einige Funktionen $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ anwenden.

Ist

$$\mathcal{F} = (F_x, F_{x_0}, \delta F_{x_0}, \delta F, \delta_2 F)$$

ein Steigungstupel zweiter Ordnung von f auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$, so ist nach (3.34)

$$S_1 := F_{x_0} + \delta F \cdot ([x] - x_0) \quad (3.39)$$

eine Wertebereichseinschließung von f auf $[x]$, wie sie schon in [38] mit Hilfe von Steigungstupeln erster Ordnung berechnet wurde.

Motiviert durch Satz 3.2.1 wählen wir aus den Relationen (3.35)-(3.37) die Wertebereichseinschließung

$$S_2 := F_{x_0} + \delta F_{x_0} \cdot ([x] - x_0) + \delta_2 F \cdot ([x] - x_0)^2, \quad (3.40)$$

auch wenn $\text{mid}[x]$ im Allgemeinen keine Maschinenzahl auf dem Rechner ist.

Für zweimal stetig differenzierbare Funktionen f wollen wir die Werte von S_1 und S_2 auch mit den zentrierten Formen

$$D_1 := f(x_0) + f'([x]) \cdot ([x] - x_0) \quad (3.41)$$

aus (1.2) sowie

$$D_2 := f(x_0) + f'(x_0) \cdot ([x] - x_0) + \frac{1}{2} f''([x]) \cdot ([x] - x_0)^2 \quad (3.42)$$

vergleichen. $f'([x])$ bzw. $f''([x])$ sind dabei Einschließungen aller Werte von f' bzw. f'' auf $[x]$ und werden durch automatische Differentiation gewonnen ([12]). D_1 und D_2 sind nach dem Mittelwertsatz bzw. nach dem Satz von Taylor ebenfalls Wertebereichseinschließungen von f auf $[x]$.

Wir betrachten folgende Beispielfunktionen:

1. $f(x) = (x + \sin x) \cdot \exp(-x^2)$
2. $f(x) = x^4 - 10x^3 + 35x^2 - 50x + 24$
3. $f(x) = (\ln(x + 1.25) - 0.84x)^2$
4. $f(x) = \frac{2}{100}x^2 - \frac{3}{100} \exp\left(-\left(20(x - 0.875)\right)^2\right)$
5. $f(x) = \exp(x^2)$
6. $f(x) = x^4 - 12x^3 + 47x^2 - 60x - 20 \exp(-x)$
7. $f(x) = x^6 - 15x^4 + 27x^2 + 250$
8. $f(x) = (\arctan(|x - 1|))^2 / (x^6 - 2x^4 + 20)$
9. $f(x) = \max\left\{\exp(-x), \sin(|x - 1|)\right\}$
10. $f(x) = \text{ite}\left(x - 1, x^4 - 1 + \sin(x - 1), \left|x^2 - \frac{5}{2}x + \frac{3}{2}\right|\right)$
11. $f(x) = |(x - 1)(x^2 + x + 5)| \cdot \exp\left((x - 2)^2\right)$
12. $f(x) = \max\{x^5 - x^2 + x, \exp(x) \cdot (x - 1) + 1\}$
13. $f(x) = \text{ite}\left(x - 1, (x - 1) \cdot \arctan x \cdot \exp(x + \sin x), \left|(x^2 - \frac{5}{2}x + \frac{3}{2}) \cdot \sin x\right|\right)$

Diese Funktionen sollen jeweils auf dem Intervall $[x] = [0.75, 1.75]$ ausgewertet werden, und wir setzen $x_0 := \text{mid}[x]$.

Die Funktionen 1-7 wurden schon in [38] als Beispielfunktionen herangezogen und sollen daher nun auch im Zusammenhang mit Steigungstupeln zweiter Ordnung untersucht werden. Die stetigen Funktionen 8-13 sind auf $[x]$ nicht differenzierbar, so dass die Auswertungen D_1 und D_2 nicht berechnet werden können.

Die Berechnungen werden mit Hilfe des in Abschnitt 3.2.1 beschriebenen Pascal-XSC-Moduls durchgeführt.

Die Ergebnisse für D_1 und D_2 lauten:

Nr.	D_1	D_2
1	[-2.262E+000, 3.184E+000]	[-9.099E-001, 2.889E+000]
2	[-4.475E+001, 4.295E+001]	[-5.215E+000, 7.598E+000]
3	[-3.758E-001, 4.115E-001]	[-4.135E-002, 1.895E-001]
4	[-1.051E+001, 1.057E+001]	[-1.835E+003, 3.062E+000]
5	[-3.265E+001, 4.219E+001]	[-1.193E+000, 4.882E+001]
6	[-8.586E+001, 2.928E+001]	[-4.003E+001, -1.173E+001]
7	[1.195E+002, 3.993E+002]	[1.827E+002, 3.044E+002]

Für S_1 und S_2 erhalten wir:

Nr.	S_1	S_2
1	[-9.387E-001, 1.861E+000]	[-2.465E-001, 1.476E+000]
2	[-2.284E+001, 2.104E+001]	[-1.778E+000, 3.536E+000]
3	[-1.986E-001, 2.343E-001]	[-4.096E-002, 1.501E-001]
4	[-1.321E-001, 1.946E-001]	[-3.444E-001, 1.146E-001]
5	[-1.184E+001, 2.139E+001]	[-1.193E+000, 2.139E+001]
6	[-6.107E+001, 4.492E+000]	[-3.576E+001, -1.647E+001]
7	[1.859E+002, 3.329E+002]	[2.104E+002, 2.751E+002]
8	[-3.325E-001, 3.389E-001]	[-3.859E-001, 2.327E-001]
9	[-2.135E-001, 7.866E-001]	[-2.832E-001, 1.271E+000]
10	[-7.375E+000, 7.500E+000]	[-5.945E+000, 7.516E+000]
11	[-1.985E+001, 2.670E+001]	[-8.953E+000, 3.422E+001]
12	[-1.013E+001, 1.561E+001]	[-2.615E+000, 1.511E+001]
13	[-1.500E+001, 1.512E+001]	[-1.264E+001, 1.327E+001]

Für die Funktionen 1-7 liefern S_1 und S_2 wie erwartet genauere Einschließungen als D_1 bzw. D_2 . Der Vergleich zwischen S_1 und S_2 zeigt bei den Funktionen 1-7, dass S_2 in den meisten Fällen eine Teilmenge von S_1 ist.

Bei den nichtdifferenzierbaren Funktionen 8-13 zeigt der Vergleich, dass S_2 nicht immer in S_1 enthalten ist. Dies liegt vor allem daran, dass für nichtdifferenzierbare Funktionen φ im Steigungstupel $\mathcal{W} = \varphi(\mathcal{U})$ unter Umständen sehr große Intervalle für $\delta_2\mathcal{W}$ entstehen können. Dennoch können, wie in den Beispielen ersichtlich, eine oder beide Grenzen des Intervalls S_2 bessere Schranken liefern als S_1 .

Kapitel 4

Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für Funktionen mehrerer Variablen

4.1 Automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung

In diesem Abschnitt wollen wir die Arithmetik zur automatischen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung aus Kapitel 3 auf Funktionen mehrerer Variablen verallgemeinern. Ähnlich dazu kann man auch die Arithmetik aus Kapitel 2 auf Funktionen mehrerer Variablen übertragen, was wir hier allerdings nicht tun.

Wir können das Vorgehen aus dem Fall einer Funktion von einer Veränderlichen weitgehend übernehmen. Zunächst benötigen wir eine entsprechende Definition der "Grenz-Intervallsteigung" und eines Steigungstupels zweiter Ordnung.

Definition 4.1.1 Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$, $[x] \subseteq D$. Ferner sei $x_0 \in [x]$ und $f_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f_i(t) := f((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, t, (x_0)_{i+1}, \dots, (x_0)_n)$. Gilt für alle $i \in \{1, \dots, n\}$

$$\liminf_{t \rightarrow (x_0)_i} \frac{f_i(t) - f_i((x_0)_i)}{t - (x_0)_i} \in \mathbb{R}$$

und

$$\limsup_{t \rightarrow (x_0)_i} \frac{f_i(t) - f_i((x_0)_i)}{t - (x_0)_i} \in \mathbb{R},$$

so definieren wir die "Grenz-Intervallsteigung" $\delta f_{\lim}([x_0]) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$ durch

$$\left(\delta f_{\lim}([x_0]) \right)_i := \left[\liminf_{t \rightarrow (x_0)_i} \frac{f_i(t) - f_i((x_0)_i)}{t - (x_0)_i}, \limsup_{t \rightarrow (x_0)_i} \frac{f_i(t) - f_i((x_0)_i)}{t - (x_0)_i} \right].$$

Bemerkung 4.1.2 Existieren die partiellen Ableitungen $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$, $i = 1, \dots, n$, von f in einer Umgebung von x_0 und sind sie jeweils stetig in x_0 , so ist offenbar

$$\left(\delta f_{\text{lim}}([x_0])\right)_i = \left[\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_0), \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_0)\right].$$

Definition 4.1.3 Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$ mit $[x] \subseteq D$ und $x_0 \in [x]$ beliebig, aber fest. Ein *Steigungstupel zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich x_0* ist ein 5-Tupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ mit $U_x, U_{x_0} \in \mathbb{I}\mathbb{R}$, $\delta U_{x_0}, \delta U \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$, $\delta_2 U \in \mathbb{I}\mathbb{R}^{n \times n}$, $U_{x_0} \subseteq U_x$ und

$$\begin{aligned} u(x) &\in U_x, \\ u(x_0) &\in U_{x_0}, \\ \delta u_{\text{lim}}([x_0]) &\subseteq \delta U_{x_0}, \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U^T \cdot (x - x_0), \\ u(x) - u(x_0) &\in \delta U_{x_0}^T \cdot (x - x_0) + (x - x_0)^T \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0) \end{aligned} \quad (4.1)$$

für alle $x \in [x]$.

Für konstante Funktionen sowie die Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) = x_i$, $i \in \{1, \dots, n\}$, können Steigungstupel zweiter Ordnung auf folgende Weise bestimmt werden.

Lemma 4.1.4 Es sei $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$, $x_0 \in [x]$, $i \in \{1, \dots, n\}$ sowie $e^i \in \mathbb{R}^n$ der i -te Einheitsvektor.

a) $\mathcal{K} = (k, k, 0, 0, 0)$ ist ein Steigungstupel zweiter Ordnung für die konstante Funktion $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) \equiv k \in \mathbb{R}$, auf $[x]$ bezüglich x_0 . Dabei stehen die ersten beiden Nullen für den Nullvektor und die letzte Null für die Nullmatrix.

b) $\mathcal{X} = ([x]_i, (x_0)_i, e^i, e^i, 0)$ ist ein Steigungstupel für die Funktion $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) = x_i$, auf $[x]$ bezüglich x_0 . Dabei steht die 0 für die Nullmatrix.

Analog zum Fall einer Funktion von einer Veränderlichen definieren wir Operationen für Steigungstupel zweiter Ordnung von Funktionen mehrerer Veränderlicher.

Definition 4.1.5 Es seien \mathcal{U} und \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $v : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

a) Die Addition bzw. Subtraktion $\mathcal{W} := \mathcal{U} \pm \mathcal{V}$ der Steigungstupel \mathcal{U} und \mathcal{V} sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \pm V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \pm V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= \delta U_{x_0} \pm \delta V_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta U \pm \delta V, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \pm \delta_2 V. \end{aligned}$$

b) Die Multiplikation $\mathcal{W} := \mathcal{U} \cdot \mathcal{V}$ sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x \cdot V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0} \cdot V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= \delta U_{x_0} \cdot V_{x_0} + U_{x_0} \cdot \delta V_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta U \cdot V_{x_0} + U_x \cdot \delta V, \\ \delta_2 W &:= \delta_2 U \cdot V_{x_0} + U_x \cdot \delta_2 V + \delta U \cdot \delta V_{x_0}^T. \end{aligned}$$

c) Die Division $\mathcal{W} := \mathcal{U}/\mathcal{V}$, wobei $0 \notin V_x$, sei definiert durch

$$\begin{aligned} W_x &:= U_x/V_x, \\ W_{x_0} &:= U_{x_0}/V_{x_0}, \\ \delta W_{x_0} &:= (\delta U_{x_0} - W_{x_0} \cdot \delta V_{x_0})/V_{x_0}, \\ \delta W &:= (\delta U - W_{x_0} \cdot \delta V)/V_x, \\ \delta_2 W &:= (\delta_2 U - W_{x_0} \cdot \delta_2 V - \delta W \cdot \delta V^T)/V_{x_0}. \end{aligned}$$

d) Für eine zweimal stetig differenzierbare Funktion φ und ein Steigungstupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ zweiter Ordnung von $u(x)$ auf $[x]$ bezüglich x_0 definieren wir $\mathcal{W} := \varphi(\mathcal{U})$ durch

$$\begin{aligned} W_x &:= \varphi(U_x), \\ W_{x_0} &:= \varphi(U_{x_0}), \\ \delta W_{x_0} &:= \delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0}, \\ \delta W &:= \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U, \\ \delta_2 W &:= \delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta_2 U + \delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \cdot \delta U_{x_0} \cdot \delta U^T. \end{aligned}$$

Dabei ist wie in Kapitel 3 $\delta\varphi(U_{x_0}; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(\widetilde{u}_{x_0}; u_{x_0}) \mid \widetilde{u}_{x_0} \in U_{x_0}, u_{x_0} \in U_{x_0}\}, \quad (4.2)$$

$\delta\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0}\} \quad (4.3)$$

und $\delta_2\varphi(U_x; U_{x_0}) \in \mathbb{IR}$ eine Einschließung der Menge

$$\{\delta_2\varphi(u_x; u_{x_0}) \mid u_x \in U_x, u_{x_0} \in U_{x_0}\}. \quad (4.4)$$

Die Mengen (4.2)-(4.4) sind identisch mit den Mengen (3.5)-(3.7) aus Kapitel 3. Folglich können für die Einschließungen dieser Mengen die entsprechenden Formeln aus Abschnitt 3.1.3 verwendet werden.

Ähnlich wie in Kapitel 3 erhalten wir den folgenden Satz.

Satz 4.1.6 Es seien \mathcal{U} und \mathcal{V} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$.

Die Resultate $\mathcal{W} = (W_x, W_{x_0}, \delta W_{x_0}, \delta W, \delta_2 W)$ der in Definition 4.1.5 eingeführten Operationen sind Steigungstupel zweiter Ordnung der jeweiligen Funktion $w = u \circ v$, $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ bzw. $w(x) = \varphi(u(x))$ auf $[x]$ bezüglich x_0 , d. h. sie besitzen jeweils die Eigenschaft (4.1).

Beweis:

Der Beweis verläuft ähnlich wie in Satz 3.1.7, wobei an den entsprechenden Stellen berücksichtigt werden muss, dass $\delta U_{x_0}, \delta U, \delta V_{x_0}, \delta V \in \mathbb{R}^n$ und $\delta_2 U, \delta_2 V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist. Damit erhält man z. B. $\delta U_{x_0} \cdot \delta U^T$ an Stelle von $\delta U_{x_0} \cdot \delta U$ und $(x - x_0)^T \cdot \delta_2 U \cdot (x - x_0)$ an Stelle von $\delta_2 U \cdot (x - x_0)^2$. \square

Gegeben seien Steigungstupel zweiter Ordnung \mathcal{U} und \mathcal{V} der stetigen Funktionen $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $v : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x] \subseteq D$ bezüglich $x_0 \in [x]$. Um damit Steigungstupel zweiter Ordnung für die Funktionen $w(x) = |u(x)|$, $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ und $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$ auf $[x]$ bezüglich x_0 zu berechnen, können wir die Operationen aus Abschnitt 3.1.4 entsprechend übertragen. Wir müssen dazu in den Formeln zu $w(x) = |u(x)|$ aus Abschnitt 3.1.4 lediglich $\delta U_{x_0} \cdot \delta U$ durch $\delta U_{x_0} \cdot \delta U^T$ ersetzen. Für die Funktionen $w(x) = \max\{u(x), v(x)\}$ und $w(x) = \min\{u(x), v(x)\}$ können die Formeln unverändert aus Abschnitt 3.1.4 übernommen werden. Die Beweise verlaufen jeweils analog zu Abschnitt 3.1.4.

Entsprechend können wir Satz 3.1.26 für Funktionen u, v, z mehrerer Veränderlicher übertragen.

Satz 4.1.7 Es seien \mathcal{U}, \mathcal{V} und \mathcal{Z} Steigungstupel zweiter Ordnung der stetigen Funktionen $u : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $v : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $z : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ auf $[x]$ bezüglich $x_0 \in [x]$, und ferner sei die Funktion $w : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $w(x) = \text{ite}(z(x), u(x), v(x))$, stetig. Dann ist das wie in Satz 3.1.26 definierte Tupel $\mathcal{W} = \text{ite}(\mathcal{Z}, \mathcal{U}, \mathcal{V})$ ein Steigungstupel zweiter Ordnung von w auf $[x]$ bezüglich x_0 .

Beweis:

Der Beweis benötigt im Vergleich zum Beweis von Satz 3.1.26 nur folgende leichte Modifikationen:

Im Fall $0 \in Z_x \wedge \overline{z_{x_0}} < 0$ ist $\text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) = u(x_0)$, und aus Stetigkeitsgründen kann es ein $\tilde{x} \in [x]$, $\tilde{x} \neq x_0$, mit

$$\text{ite}(z(\tilde{x}), u(\tilde{x}), v(\tilde{x})) = v(\tilde{x})$$

nur dann geben, wenn ein $x_s \in \mathbb{R}^n$ auf der Verbindungsstrecke

$$x_0 + t \cdot (\tilde{x} - x_0), \quad t \in [0, 1],$$

von x_0 und \tilde{x} existiert mit $u(x_s) = v(x_s)$. Für dieses x_s gilt dann

$$u(x_s) \in u(x_0) + \delta U^T \cdot (x_s - x_0)$$

sowie

$$v(x_s) \in v(x_0) + \delta V^T \cdot (x_s - x_0)$$

und damit

$$\begin{aligned} v(x_0) - u(x_0) &\in v(x_s) - \delta V^T \cdot (x_s - x_0) - u(x_s) + \delta U^T \cdot (x_s - x_0) \\ &= (\delta U^T - \delta V^T) \cdot (x_s - x_0). \end{aligned}$$

Da für jede Komponente $(x_s - x_0)_i \in [0, 1] \cdot (\tilde{x} - x_0)_i$ gilt, folgt

$$v(x_0) - u(x_0) \in (\delta U^T - \delta V^T) \cdot [0, 1] \cdot (\tilde{x} - x_0),$$

und somit gilt für alle $x \in [x]$ mit $\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) = v(x)$

$$\begin{aligned} &\text{ite}(z(x), u(x), v(x)) - \text{ite}(z(x_0), u(x_0), v(x_0)) \\ &= v(x) - u(x_0) \\ &\in v(x_0) + \delta V^T \cdot (x - x_0) - u(x_0) \\ &\subseteq \left(\delta V^T + (\delta U^T - \delta V^T) \cdot [0, 1] \right) \cdot (x - x_0). \end{aligned}$$

Die restlichen Teile des Beweises können im Vergleich zum Beweis von Satz 3.1.26 auf die gleiche Weise modifiziert werden. \square

4.2 Komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung

Analog zu [38] können wir die Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung von Funktionen mehrerer Veränderlicher auf eine komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung zurückführen. Diese Technik findet anschließend Verwendung im Algorithmus zur globalen Optimierung.

Definition 4.2.1 Es sei $u : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $i \in \{1, \dots, n\}$ fest. Wir definieren die Familie von Funktionen

$$\mathcal{G}_i := \left\{ \begin{array}{l} g : [x]_i \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad g(x_i) := u(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n) \\ \text{mit } x_j \in [x]_j \text{ fest für } j \in \{1, \dots, n\}, j \neq i. \end{array} \right\} \quad (4.5)$$

Jedes $g \in \mathcal{G}_i$ ist somit eine stetige Funktion einer Variablen, und damit ist für jedes $g \in \mathcal{G}_i$ die automatische Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung von g auf $[x]_i$ bezüglich eines festen $(x_0)_i \in [x]_i$, $(x_0)_i \in \mathbb{R}$, wie in Kapitel 3 definiert.

Für die komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln modifizieren wir die Definition eines Steigungstupels zweiter Ordnung im Vergleich zu Kapitel 3 wie folgt.

Definition 4.2.2 Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $[x] \in \mathbb{R}^n$ mit $[x] \subseteq D$. Ferner seien $i \in \{1, \dots, n\}$ und $(x_0)_i \in \mathbb{R}$, $(x_0)_i \in [x]_i$ fest. Ein *Steigungstupel*

zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich der Komponente i ist ein 5-Tupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ mit $U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U \in \mathbb{I}\mathbb{R}$, $U_{x_0} \subseteq U_x$ und

$$\begin{aligned} g(x_i) &\in U_x, \\ g((x_0)_i) &\in U_{x_0}, \\ \delta g_{\text{lim}}([x_0]_i) &\subseteq \delta U_{x_0}, \\ g(x_i) - g((x_0)_i) &\in \delta U \cdot (x_i - (x_0)_i), \\ g(x_i) - g((x_0)_i) &\in \delta U_{x_0} \cdot (x_i - (x_0)_i) + \delta_2 U \cdot (x_i - (x_0)_i)^2 \end{aligned}$$

für alle $x_i \in [x]_i$ und alle $g \in \mathcal{G}_i$. Dabei ist \mathcal{G}_i wie in (4.5) definiert.

Bemerkung 4.2.3 Ist \mathcal{U} ein Steigungstupel zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich der Komponente i , so gilt für alle $x \in [x]$

$$u(x) \in U_{x_0} + \delta U \cdot ([x]_i - (x_0)_i) \quad (4.6)$$

sowie

$$u(x) \in U_{x_0} + \delta U_{x_0} \cdot ([x]_i - (x_0)_i) + \delta_2 U \cdot ([x]_i - (x_0)_i)^2, \quad (4.7)$$

d. h. (4.6) und (4.7) sind jeweils Einschließungen des Wertebereichs von u auf $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$.

Mit Definition 4.2.2 haben wir die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für Funktionen mehrerer Variablen auf die in Kapitel 3 beschriebene automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung für Funktionen einer Variablen zurückgeführt. Damit können wir sämtliche Formeln aus Kapitel 3 auf die komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung übertragen. Die Beweise können analog zu den Beweisen aus Kapitel 3 geführt werden. Lediglich für konstante Funktionen und Funktionen der Form $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) = x_k$, $k \in \{1, \dots, n\}$, ergibt sich die folgende Änderung.

Lemma 4.2.4 Es sei $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$, $x_0 \in [x] \subseteq D$ sowie $i \in \{1, \dots, n\}$.

a) Für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ ist $\mathcal{K} = (k, k, 0, 0, 0)$ ein Steigungstupel zweiter Ordnung der konstanten Funktion $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) \equiv k \in \mathbb{R}$, auf $[x]$ bezüglich der Komponente i .

b) Für die Funktion $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $u(x) = x_k$, ist

$$\mathcal{X} = \begin{cases} ([x]_k, [x]_k, 0, 0, 0), & \text{falls } k \neq i, \\ ([x]_i, (x_0)_i, 1, 1, 0), & \text{falls } k = i, \end{cases}$$

ein Steigungstupel zweiter Ordnung auf $[x]$ bezüglich der Komponente i .

Beweis: Klar. □

Bemerkung 4.2.5 Wir können eine Technik ähnlich der Steigungsberechnung nach Hansen (siehe Abschnitt 1.3.3) verwenden, um die Wertebereichseinschließungen (4.6) und (4.7), die mit Hilfe der komponentenweisen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung gewonnen werden, zu verbessern. Es sei $u : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $x_0 \in [x] \subseteq D$ fest. Es ist

$$\left. \begin{aligned} & u(x_1, \dots, x_n) - u((x_0)_1, \dots, (x_0)_n) \\ = & u(x_1, \dots, x_n) - u((x_0)_1, x_2, \dots, x_n) + u((x_0)_1, x_2, \dots, x_n) \\ & - u((x_0)_1, (x_0)_2, x_3, \dots, x_n) + u((x_0)_1, (x_0)_2, x_3, \dots, x_n) \\ & - + \dots + u((x_0)_1, \dots, (x_0)_{n-1}, x_n) - u((x_0)_1, \dots, (x_0)_n). \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

Wir berechnen für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ für die Funktion

$$u_i : \left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, [x]_i, [x]_{i+1}, \dots, [x]_n \right) \rightarrow \mathbb{R}$$

mit

$$\begin{aligned} u_i(x) &:= u\left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n\right) \\ &\text{für } x \in \left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, [x]_i, [x]_{i+1}, \dots, [x]_n\right) \end{aligned}$$

jeweils ein Steigungstupel $\mathcal{U}_i := (U_{x_i}, U_{x_0; i}, \delta U_{x_0; i}, \delta U_i, \delta_2 U_i)$ zweiter Ordnung von u_i auf $\left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, [x]_i, [x]_{i+1}, \dots, [x]_n\right)$ bezüglich der i -ten Komponente.

Somit erhalten wir die Wertebereichseinschließungen

$$u(x) \in U_{x;1}, \quad (4.9)$$

$$u(x) \in U_{x_0;n} + \sum_{j=1}^n \delta U_j \cdot \left([x]_j - (x_0)_j\right), \quad (4.10)$$

$$u(x) \in U_{x_0;n} + \sum_{j=1}^n \delta U_{x_0;j} \cdot \left([x]_j - (x_0)_j\right) + \sum_{j=1}^n \delta_2 U_j \cdot \left([x]_j - (x_0)_j\right)^2 \quad (4.11)$$

für alle $x \in [x]$.

4.3 Beispiele

Wir wollen nun den Wertebereich einer Funktion mehrerer Veränderlicher mit Hilfe von automatischer Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung einschließen.

Dazu betrachten wir die folgenden Beispielfunktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

1.
$$f(x) = \left(\left(\frac{5}{\pi}x_4 - \frac{5.1}{4\pi^2}x_4^2 + x_2 - 6 \right)^2 + 10 \left(1 - \frac{1}{8\pi} \right) \cos x_4 + 10 \right) \cdot x_3^2 - x_1^5 + x_2 \frac{\sinh(x_5)}{x_6^2 + 1} x_6 - \exp(x_3) \cdot x_5$$
2.
$$f(x) = 4x_1^2 - 2.1x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4$$
3.
$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2$$
4.
$$f(x) = 12x_1^2 - 6.3x_1^4 + x_1^6 + 6x_2(x_2 - x_1)$$
5.
$$f(x) = \sin x_1 + \sin\left(\frac{10}{3}x_1\right) + \ln x_1 - 0.84x_1 + 1000x_1x_2^2 \exp(-x_3^2)$$
6.
$$f(x) = (x_1 + \sin x_1) \exp(-x_1^2) + \ln(x_3) \frac{x_2^2}{x_1}$$

Die Funktionen sollen jeweils auf dem Definitionsbereich

$$[x] = ([x]_1, \dots, [x]_n) = ([4, 4.25], \dots, [4, 4.25])$$

ausgewertet werden, und wir setzen jeweils $x_0 = \text{mid}[x]$.

Die Funktionen 2-6 wurden bereits in [38] als Beispielfunktionen verwendet. Die Funktion 1 als Funktion von 6 Veränderlichen ist eine Variante der Funktion 1 aus [38].

Wir berechnen mit Hilfe der Technik aus Abschnitt 4.1 ein Steigungstupel $\mathcal{F} = (F_x, F_{x_0}, \delta F_{x_0}, \delta F, \delta_2 F)$ zweiter Ordnung von f auf $[x]$ und erhalten damit nach (4.1) die Wertebereichseinschließungen

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F^T \cdot ([x] - x_0) =: S_{m;1}$$

und

$$f(x) \in F_{x_0} + \delta F_{x_0}^T \cdot ([x] - x_0) + ([x] - x_0)^T \cdot \delta_2 F \cdot ([x] - x_0) =: S_{m;2}$$

mit $F_{x_0} \in \mathbb{IR}$, $\delta F_{x_0}, \delta F \in \mathbb{IR}^n$ und $\delta_2 F \in \mathbb{IR}^{n \times n}$.

Wir vergleichen diese Werte mit den Wertebereichseinschließungen

$$f(x) \in F_{x_0;n} + \sum_{j=1}^n \delta F_j \cdot ([x]_j - (x_0)_j) =: S_{k;1}$$

und

$$\begin{aligned} f(x) &\in F_{x_0;n} + \sum_{j=1}^n \delta F_{x_0;j} \cdot ([x]_j - (x_0)_j) + \sum_{j=1}^n \delta_2 F_j \cdot ([x]_j - (x_0)_j)^2 \\ &=: S_{k;2}, \end{aligned}$$

die wir mit Hilfe der komponentenweisen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung aus Bemerkung 4.2.5 erhalten. Für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ ist dabei $\mathcal{F}_i := (F_{x;i}, F_{x_0;i}, \delta F_{x_0;i}, \delta F_i, \delta_2 F_i)$ ein Steigungstupel zweiter Ordnung der Funktion

$$f_i : \left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, [x]_i, [x]_{i+1}, \dots, [x]_n \right) \rightarrow \mathbb{R}$$

mit

$$f_i(x) := f\left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n\right)$$

auf $\left((x_0)_1, \dots, (x_0)_{i-1}, [x]_i, [x]_{i+1}, \dots, [x]_n \right)$ bezüglich der Komponente i .

Die Ergebnisse für $S_{m;1}$ und $S_{m;2}$ lauten:

Nr.	$S_{m;1}$	$S_{m;2}$
1	[-1.4971E+003, -9.7301E+002]	[-1.4940E+003, -9.7612E+002]
2	[1.8095E+003, 2.6091E+003]	[1.8162E+003, 2.6025E+003]
3	[1.3467E+004, 1.9786E+004]	[1.3467E+004, 1.9786E+004]
4	[2.5387E+003, 4.0747E+003]	[2.5584E+003, 4.0550E+003]
5	[-2.1275E+000, -1.7755E+000]	[-2.0521E+000, -1.8508E+000]
6	[5.1531E+000, 6.5377E+000]	[5.1529E+000, 6.5379E+000]

Für $S_{k;1}$ und $S_{k;2}$ erhält man:

Nr.	$S_{k;1}$	$S_{k;2}$
1	[-1.4979E+003, -9.7220E+002]	[-1.4952E+003, -9.8694E+002]
2	[1.8095E+003, 2.6091E+003]	[1.8430E+003, 2.6025E+003]
3	[1.3467E+004, 1.9786E+004]	[1.3619E+004, 1.9786E+004]
4	[2.5387E+003, 4.0747E+003]	[2.6195E+003, 4.0550E+003]
5	[-2.1275E+000, -1.7755E+000]	[-2.0499E+000, -1.9322E+000]
6	[5.1532E+000, 6.5376E+000]	[5.1647E+000, 6.5357E+000]

In den betrachteten Beispielen gilt mit Ausnahme des ersten Beispiels jeweils $S_{k;1} \subseteq S_{m;1}$ und $S_{k;2} \subseteq S_{m;2}$. Ferner liefert $S_{k;2}$ in allen betrachteten Beispielen eine genauere Einschließung als $S_{k;1}$, d. h. $S_{k;2} \subseteq S_{k;1}$.

Wir werden die komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung im folgenden Kapitel in den Algorithmen zur globalen Optimierung verwenden.

Kapitel 5

Anwendung in der globalen Optimierung

In diesem Kapitel wollen wir die zuvor eingeführte Arithmetik zur automatischen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung zur globalen Optimierung nichtdifferenzierbarer Funktionen anwenden. Ratz [38] verwendet Steigungstupel erster Ordnung, um in einem Branch-and-Bound-Algorithmus einen sogenannten "Pruning"-Schritt (engl.: to prune - abschneiden) durchzuführen. Wir nutzen nun unsere zusätzlichen Informationen aus dem Steigungstupel zweiter Ordnung (3.4) aus, um einen "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung zu entwickeln.

Zunächst gehen wir auf die Grundlagen von Branch-and-Bound-Verfahren in der globalen Optimierung ein. Anschließend führen wir den neuen "Pruning"-Schritt für Funktionen einer Variablen ein, bevor wir schließlich den Algorithmus auf Funktionen mehrerer Variablen übertragen.

5.1 Grundlagen der globalen Optimierung

Gegeben sei eine stetige Funktion $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Gesucht ist auf einem Intervall $[x] \subseteq D$ das Minimum

$$f^* := \min_{x \in [x]} f(x)$$

sowie die zugehörigen Minimalstellen $x^* \in [x]$. Von Interesse sind also nicht lokale, sondern globale Minimalstellen.

Die Idee von Branch-and-Bound-Verfahren ist die folgende: Wir betrachten eine Liste von Intervallen, die möglicherweise globale Minimalstellen von f enthalten. Aus dieser Liste wird nun ein bestimmtes Intervall entnommen und darauf verschiedene Tests angewendet. Ergibt einer dieser Tests, dass das Intervall keine globale Minimalstelle x^* von f enthält, so wird es gelöscht. Andernfalls wird das Intervall, z. B.

durch Bisektion, in Teilintervalle zerlegt, die wieder in die Liste eingefügt werden. Der Algorithmus endet, wenn die Liste nur noch aus Intervallen besteht, die die globale(n) Minimalstelle(n) hinreichend genau einschließen. Im Algorithmus sollen keine Minimalstellen "verloren" gehen, d. h. dass alle globalen Minimalstellen von f in einem Intervall aus der Liste enthalten sind. Die Intervallrechnung ist ein hervorragend geeignetes Hilfsmittel, um bei der Durchführung eines solchen Verfahrens auf einem Rechner diese Forderung zu erfüllen.

Einführungen in diese Thematik findet man in [16], [20] und [36]. Darüber hinaus findet man in [32] einen Überblick über weitere Verfahren in der globalen Optimierung, insbesondere auch der globalen Optimierung mit Nebenbedingungen.

5.1.1 Grundlegender Algorithmus

In unserem grundlegenden Branch-and-Bound-Algorithmus verwenden wir eine reelle Zahl \tilde{f} sowie zwei verkettete Listen, die Arbeitsliste \mathcal{L} und die Ergebnisliste \mathcal{Q} . \tilde{f} soll zu jedem Zeitpunkt im Algorithmus eine obere Schranke des globalen Minimums von f auf $[x]$ sein. Die Elemente der Liste \mathcal{L} sind Paare der Form $([y], \underline{fy})$ mit einem Intervall $[y] \in \mathbb{IR}^n$ und einer reellen Zahl \underline{fy} mit

$$\underline{fy} \leq \min_{y \in [y]} f(y).$$

Zur Initialisierung des Algorithmus wird zunächst eine Einschließung $f_{[x]}$ des Wertebereichs von f auf $[x]$ berechnet. Als erstes Listenelement von \mathcal{L} kann somit das Paar $([x], \inf f_{[x]})$ verwendet werden. \mathcal{Q} wird als leere Liste initialisiert. Außerdem setzen wir $\tilde{f} := \sup f_{[x]}$, da $\sup f_{[x]}$ eine obere Schranke des Minimums von f auf $[x]$ ist. Alternativ kann auch eine obere Schranke \overline{fc} für den Funktionswert von f an einer Stelle $c \in [x]$ berechnet und $\tilde{f} := \overline{fc}$ gesetzt werden. Wird $f_{[x]}$ mit Hilfe von automatischer Berechnung eines Steigungstupels zweiter Ordnung bestimmt, so wird automatisch auch ein solches \overline{fc} mitberechnet.

Der Algorithmus verläuft wie folgt:

Führe folgende Schritte durch, solange die Arbeitsliste \mathcal{L} nicht leer ist:

1. Verwende das momentan erste Element $([y], \underline{fy})$ der Arbeitsliste \mathcal{L} und streiche es aus der Liste heraus.
2. Teile das Intervall $[y]$, z. B. durch Bisektion, in zwei Intervalle $[y^{(1)}]$ und $[y^{(2)}]$.
3. Berechne Einschließungen des Wertebereichs von f auf $[y^{(1)}]$ bzw. $[y^{(2)}]$ und erzeuge die Paare $([y^{(1)}], \inf f_{[y^{(1)}]})$ sowie $([y^{(2)}], \inf f_{[y^{(2)}]})$.
4. Berechne eine Einschließung $f_{[c_1]}$ des Funktionswerts von f an der Stelle $c_1 := \text{mid } [y^{(1)}]$. Falls $\sup f_{[c_1]} < \tilde{f}$, so setze $\tilde{f} := \sup f_{[c_1]}$. Führe den gleichen Schritt für $c_2 := \text{mid } [y^{(2)}]$ durch.

5. Führe verschiedene Tests für $[y^{(1)}]$ und $[y^{(2)}]$ durch. Wenn dabei nachgewiesen wird, dass eines der Intervalle keine globale Minimalstelle von f enthält, so lösche das entsprechende Paar $([y^{(i)}], \inf f_{[y^{(i)}]})$. Sollte für eines der Intervalle nachgewiesen werden, dass eine globale Minimalstelle von f nur in einem bestimmten Teilintervall vorhanden sein kann, so ersetze dieses Intervall $[y^{(i)}]$ durch das entsprechende Teilintervall.
6. Füge die beiden Paare, sofern sie nicht zuvor gelöscht wurden, jeweils wieder in eine Liste ein, und zwar in \mathcal{Q} , falls gewisse Genauigkeitsbedingungen erfüllt sind, oder andernfalls in \mathcal{L} .
7. Streiche alle Paare $([y], \underline{fy})$ mit $\underline{fy} > \tilde{f}$ aus \mathcal{L} , da sie keine globalen Minimalstellen von f auf $[x]$ enthalten können.

5.1.2 Listenverwaltung

Die Paare $([y], \underline{fy})$ in der verketteten Liste werden nach steigendem Wert \underline{fy} angeordnet. Als zweites Kriterium dient das Alter des Listenelements. Wird ein Paar $([y], \underline{fy})$ neu in die Liste eingesetzt, so wird es vor dem ersten Paar $([z], \underline{fz})$ mit $\underline{fy} < \underline{fz}$, aber nach allen Paaren $([z], \underline{fz})$ mit $\underline{fy} \geq \underline{fz}$ eingefügt. Durch diese Anordnung wird Schritt 7 in obigem Algorithmus wesentlich vereinfacht. Gilt nämlich für ein Element der Liste $\underline{fy} > \tilde{f}$, so können auch alle folgenden Paare in der Liste gelöscht werden. Außerdem erhält man durch die Listenanordnung zu jedem Zeitpunkt auf einfache Weise eine Einschließung des globalen Minimums f^* , und zwar mit Hilfe von \tilde{f} sowie der jeweils ersten Listenelemente von \mathcal{L} und \mathcal{Q} .

Am Ende des Algorithmus, d. h. wenn die Arbeitsliste \mathcal{L} keine Elemente mehr enthält, werden aus \mathcal{Q} noch alle Paare $([y], \underline{fy})$ mit $\underline{fy} > \tilde{f}$ gelöscht. Mit Hilfe des ersten Elements $([y], \underline{fy})$ der Liste \mathcal{Q} erhält man die Einschließung $[\underline{fy}, \tilde{f}]$ des globalen Minimums f^* von f auf $[x]$. Die Vereinigung aller Intervalle, die in der Ergebnisliste \mathcal{Q} vorhanden sind, enthält alle globalen Minimalstellen von f auf $[x]$.

5.1.3 Tests zur Beschleunigung

Zur Beschleunigung des obigen Algorithmus werden in Schritt 5 verschiedene Tests durchgeführt, mit deren Hilfe das untersuchte Intervall $[y]$ gelöscht oder verkleinert werden kann, ohne eine globale Minimalstelle von f zu verlieren. Wir geben im Folgenden verschiedene Tests an.

Wertebereichstest

Es sei $[\underline{fy}, \overline{fy}]$ eine Einschließung des Wertebereichs von f auf dem zu untersuchenden Intervall $[y]$. Gilt $\underline{fy} > \tilde{f}$, so kann $[y]$ keine Minimalstelle von f enthalten und

kann somit gelöscht werden. Eine Einschließung des Wertebereichs kann man beispielsweise mit Hilfe von (1.5), Bemerkung 1.3.22 oder Bemerkung 1.3.25 erhalten.

Monotonietest

Es sei f stetig differenzierbar und $[g]$ eine Einschließung des Gradienten $\text{grad} f$ auf dem zu untersuchenden Intervall $[y]$. Gilt für eine Komponente $[g]_i$ von $[g]$, dass $0 \notin [g]_i$, so kann f aus Monotoniegründen nur auf einem Randstück von $[y]$ eine Minimalstelle besitzen. Liegt dieses Randstück im Inneren von $[x]$, so kann das Intervall $[y]$ komplett gelöscht werden, da es keine globale Minimalstelle von f auf $[x]$ enthalten kann.

Konkavitätstest und Newton-Schritt

Mit Hilfe einer Einschließung der Hessematrix von f auf $[y]$ können zur Eliminierung bzw. zur Verkleinerung von $[y]$ der Konkavitätstest (der eigentlich ein Test auf Nicht-Konvexität ist) sowie ein Intervall-Newton-Schritt durchgeführt werden (siehe z. B. [36]). Da wir diese Tests im Folgenden nicht weiter benötigen, gehen wir hier nicht näher darauf ein.

5.2 "Pruning"-Schritte für Funktionen einer Variablen

Im Branch-and-Bound-Algorithmus zur globalen Optimierung können zusätzlich zu den in Abschnitt 5.1.3 beschriebenen Tests noch sogenannte "Pruning"-Schritte verwendet werden. Dabei soll nachgewiesen werden, dass in einem bestimmten Teil des zu untersuchenden Intervalls $[y]$ keine globale Minimalstelle von f liegen kann. Folglich braucht dieser Teil von $[y]$ nicht weiter betrachtet zu werden. Wir setzen in diesem Abschnitt voraus, dass f eine reellwertige Funktion einer Variablen ist.

5.2.1 Auf der Mittelwertform basierender "Pruning"-Schritt

Es sei $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $c \in [y] \subseteq D$ beliebig, aber fest. Ist $\delta f(x; c)$ eine Steigungsfunktion erster Ordnung von f bezüglich c , so ist nach (1.4)

$$f(x) = f(c) + \delta f(x; c) \cdot (x - c), \quad x \in D.$$

Mit einer Intervallsteigung $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c gilt also

$$f(x) \in f(c) + [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}] \cdot (x - c) \quad \text{für alle } x \in [y]. \quad (5.1)$$

Folglich wird für jedes $x \in [y]$ der Funktionswert $f(x)$ durch die beiden Geraden

$$g(x) := f(c) + \underline{\delta f} \cdot (x - c) \quad (5.2)$$

und

$$h(x) := f(c) + \overline{\delta f} \cdot (x - c) \tag{5.3}$$

begrenzt, wie in Abbildung 5.1 für $[y] = [-3, 1]$ und $c = -1$ skizziert wird.

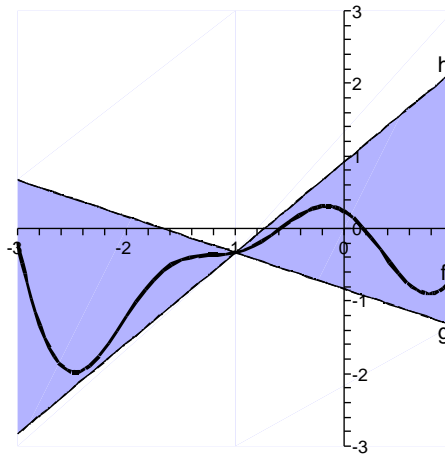


Abbildung 5.1: Einschließung von $f(x)$ durch die Geraden g und h

Die Idee des "Pruning"-Schritts ist nun wie folgt [38, 39]: Mit Hilfe von \tilde{f} , der im Branch-and-Bound-Algorithmus zu jedem Zeitpunkt gegebenen oberen Schranke von f^* , soll auf einem Teil von $[y]$ die Existenz einer globalen Minimalstelle ausgeschlossen werden. Dazu wird verwendet, dass die beiden Geraden g und h für jedes $x \in [y]$ den Funktionswert $f(x)$ einschließen. Ist in der Situation von Abb. 5.1 beispielsweise $\tilde{f} = -1$ bekannt, so zeigt Abb. 5.2, dass globale Minimalstellen von f nur in den Teilintervallen $[-3, p]$ und $[q, 1]$ enthalten sein können, nicht aber in (p, q) .

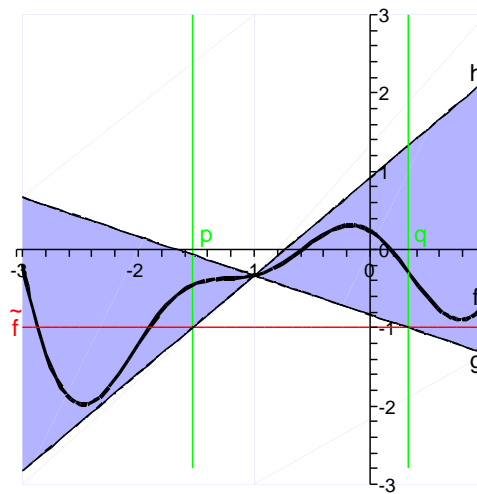


Abbildung 5.2: Idee des "Pruning"-Schritts

Eine detaillierte mathematische Beschreibung des "Pruning"-Schritts sowie eine Unterscheidung aller möglichen Fälle folgt in Abschnitt 5.2.3.

5.2.2 "Pruning"-Schritt für stetig differenzierbare Funktionen

Auf Basis der zuvor erläuterten Idee führen Sotiropoulos und Grapsa [48] für stetig differenzierbares f einen "Pruning"-Schritt auf folgende Weise durch. Zunächst wird zur Durchführung des Monotonietests eine Einschließung $f'([y])$ von f' auf $[y]$ berechnet. Falls $0 \in f'([y])$ ist, so wird ein "Pruning"-Schritt durchgeführt. Dazu wird $f'([y])$ wie in (5.1) als Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ verwendet. Zusätzlich zu (5.1) gilt, dass die Eigenschaft

$$f(x) \in f(c) + f'([y]) \cdot (x - c) \quad \text{für alle } x \in [y] \quad (5.4)$$

für beliebiges $c \in [y]$ erfüllt ist. Für c kann daher ein nach Baumann [4] optimaler Punkt $\hat{c} \in [y]$ gewählt werden, für den

$$\min \left(f(\hat{c}) + f'([y]) \cdot ([y] - \hat{c}) \right) \geq \min \left(f(c) + f'([y]) \cdot ([y] - c) \right)$$

für alle $c \in [y]$ gilt.

Vinko, Lagouanelle und Csentes [51] verwenden $f'([y])$, um zusätzlich von den Rändern des betrachteten Intervalls ausgehend einen Teil des Intervalls abzuschneiden, in dem keine globale Minimalstelle vorhanden sein kann. Auch dieses sogenannte "Kite"-Verfahren besitzt einen optimalen Stützpunkt $\tilde{c} \in [y]$ hinsichtlich einer maximalen unteren Schranke der Wertebereichseinschließung von f . Dieses \tilde{c} unterscheidet sich aber im Allgemeinen vom obigen Baumann-Punkt \hat{c} .

5.2.3 "Pruning"-Schritt für nichtdifferenzierbare Funktionen

Für eine nichtdifferenzierbare stetige Funktion f können im Algorithmus zur globalen Optimierung weder der Monotonietest noch ein Konkavitätstest oder ein Newton-Schritt durchgeführt werden. Umso wichtiger ist der "Pruning"-Schritt zur Beschleunigung des Algorithmus. Mit der Idee aus Abschnitt 5.2.1 gibt Ratz [38, 39] einen "Pruning"-Schritt erster Ordnung für nichtdifferenzierbare Funktionen an. Da die dabei benötigte Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c im Allgemeinen von der Wahl von $c \in [y]$ abhängt, kann im Gegensatz zur Situation in Abschnitt 5.2.2 nicht unmittelbar ein "optimaler" Punkt \tilde{c} gefunden werden.

Die folgenden Sätze aus [38, 39] geben an, wie ein "Pruning"-Schritt erster Ordnung durchgeführt werden kann.

Satz 5.2.1 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[y] = [y, \bar{y}]$ und $c \in [y]$. Weiter sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\underline{\delta f} > 0$. Dann gilt für

$$p := c + (\underline{y} - c) \cdot \underline{\delta f} / \overline{\delta f}$$

sowohl

$$\underline{y} \leq p \leq c$$

als auch

$$\min_{x \in [\underline{y}]} f(x) = \min_{x \in [\underline{y}, p]} f(x).$$

Ferner ist

$$\min_{x \in [\underline{y}, p]} f(x) < f(y)$$

für alle y mit $p < y \leq \bar{y}$.

Beweis: siehe [38].

□

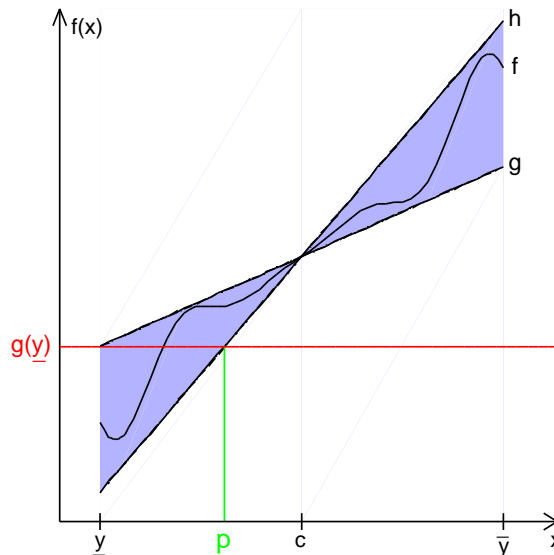


Abbildung 5.3: Graphische Darstellung von Satz 5.2.1

Die Aussage von Satz 5.2.1 ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Wie im Schaubild ersichtlich, ist $g(\underline{y})$ eine obere Schranke des globalen Minimums f^* von f .

Ist wie im oben beschriebenen Grundalgorithmus zur globalen Optimierung schon eine obere Schranke \tilde{f} von f^* bekannt, so kann diese Information zusätzlich verwendet werden. Dies zeigt der folgende Satz.

Satz 5.2.2 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \bar{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\underline{\delta f} > 0$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$p := c + m / \overline{\delta f}$$

mit

$$m := \min \left\{ \tilde{f} - f(c), (\underline{y} - c) \cdot \underline{\delta f} \right\}$$

sowohl

$$p \leq c$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in (p, \bar{y}], \quad \text{falls } \underline{y} \leq p,$$

$$\min_{x \in [\underline{y}]} f(x) > f^*, \quad \text{falls } p < \underline{y}.$$

Beweis: siehe [38].

□

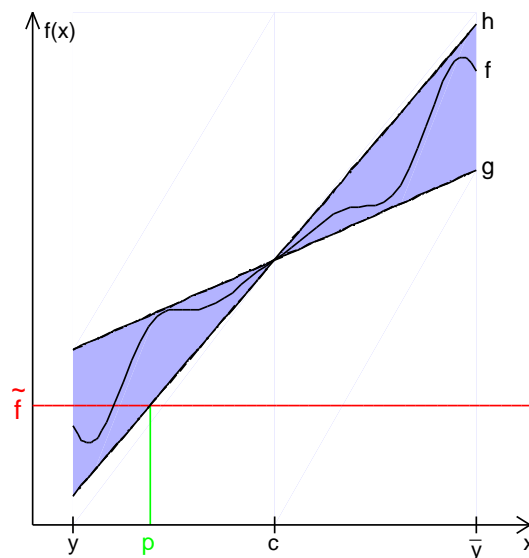


Abbildung 5.4: Graphische Darstellung von Satz 5.2.2

Unter den Voraussetzungen von Satz 5.2.2 gilt also: Falls $\underline{y} \leq p$ ist, so kann die Suche nach globalen Minimalstellen von f auf $[x]$ vom betrachteten Intervall $[y]$ auf das Teilintervall $[\underline{y}, p]$ eingeschränkt werden, und $\min \left\{ \tilde{f}, g(\underline{y}) \right\}$ ist eine obere Schranke des globalen Minimums. Falls $p < \underline{y}$, so kann $[y]$ keine globalen Minimalstellen von f auf $[x]$ enthalten.

Im Fall $\delta f([\underline{y}]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ mit $\overline{\delta f} < 0$ können die Überlegungen von Satz 5.2.2 wie folgt auf der anderen Seite des Intervalls $[y]$ angewendet werden.

Satz 5.2.3 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \bar{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\bar{\delta f} < 0$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$q := c + m / \underline{\delta f}$$

mit

$$m := \min \left\{ \tilde{f} - f(c), (\bar{y} - c) \cdot \bar{\delta f} \right\}$$

sowohl

$$c \leq q$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in [\underline{y}, q), \quad \text{falls } q \leq \bar{y},$$

$$\min_{x \in [y]} f(x) > f^*, \quad \text{falls } \bar{y} < q.$$

Beweis: siehe [38]. □

Auch im Fall $0 \in \delta f([y]; c)$ kann ein "Pruning"-Schritt durchgeführt werden.

Satz 5.2.4 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \bar{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $0 \in [\underline{\delta f}, \bar{\delta f}]$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$f(c) > \tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$p := \begin{cases} c + (\tilde{f} - f(c)) / \bar{\delta f} & \text{falls } \bar{\delta f} \neq 0 \\ -\infty & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$q := \begin{cases} c + (\tilde{f} - f(c)) / \underline{\delta f} & \text{falls } \underline{\delta f} \neq 0 \\ +\infty & \text{sonst,} \end{cases}$$

und

$$\mathcal{Z} := (p, q) \cap [y]$$

sowohl

$$p < c < q$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in \mathcal{Z}.$$

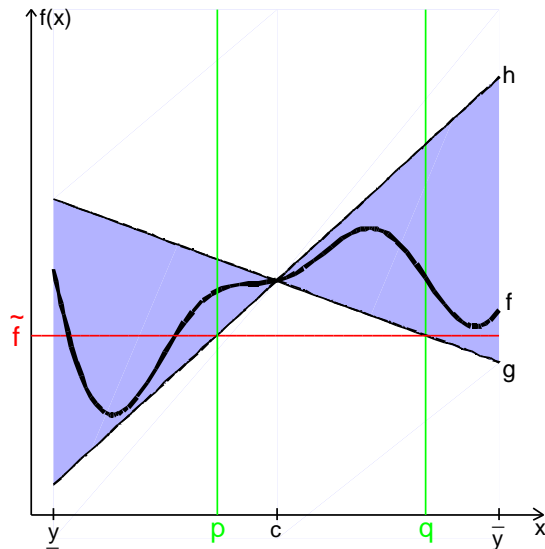


Abbildung 5.5: Graphische Darstellung von Satz 5.2.4

Beweis: siehe [38].

□

Unter den Voraussetzungen von Satz 5.2.4 gilt also, dass die Menge \mathcal{Z} keine globalen Minimalstellen von f enthalten kann. Im Algorithmus zur globalen Optimierung können wir $[y]$ folglich durch

$$\begin{aligned} & [\underline{y}, p] \cup [q, \bar{y}], & \text{falls } \underline{y} \leq p \text{ und } q \leq \bar{y}, \\ & [\underline{y}, p], & \text{falls } \underline{y} \leq p \text{ und } q > \bar{y}, \\ & [q, \bar{y}], & \text{falls } \underline{y} > p \text{ und } q \leq \bar{y}, \end{aligned}$$

ersetzen, ohne eine globale Minimalstelle von f zu verlieren. Falls $\underline{y} > p$ und $q > \bar{y}$, dann enthält $[y]$ keine globale Minimalstelle und braucht nicht weiter untersucht zu werden.

Durchführung des "Pruning"-Schritts auf einem Rechner

Bei der Durchführung des "Pruning"-Schritts auf einem Rechner hat man im Allgemeinen nicht den exakten Funktionswert $f(c)$ zur Verfügung, sondern nur eine Einschließung $f(c) \in [f_c] = [\underline{f}_c, \overline{f}_c]$. Folglich können wir zur Einschließung der Funktionswerte von f auf $[y]$ nicht die beiden Geraden g und h aus (5.2) bzw. (5.3) benutzen. Stattdessen verwenden wir

$$g_l(x) := \overline{f}_c + \underline{\delta f} \cdot (x - c), \quad x \leq c, \quad (5.5)$$

$$g_r(x) := \underline{fc} + \underline{\delta f} \cdot (x - c), \quad x \geq c, \tag{5.6}$$

$$h_l(x) := \underline{fc} + \overline{\delta f} \cdot (x - c), \quad x \leq c, \tag{5.7}$$

sowie

$$h_r(x) := \overline{fc} + \overline{\delta f} \cdot (x - c), \quad x \geq c. \tag{5.8}$$

In der Situation von Satz 5.2.1 werden also zur Berechnung des Punktes p die Halbgeraden $g_l(x)$ und $h_l(x)$ verwendet, wie in Abbildung 5.6 verdeutlicht wird.

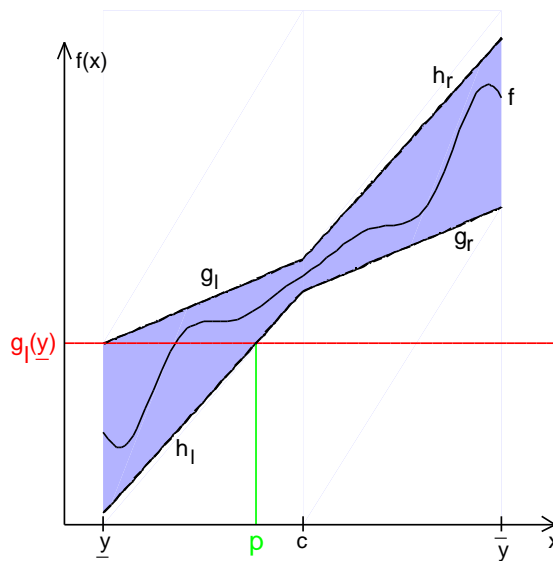


Abbildung 5.6: Einschließung von f mit Hilfe von (5.5)-(5.8)

Entsprechend müssen die Sätze 5.2.1-5.2.4 für den Fall $f(c) \in [f_c] = [\underline{fc}, \overline{fc}]$ angepasst werden. Wir erhalten die folgenden vier Sätze, die jeweils in [38] bewiesen werden.

Satz 5.2.5 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[y]$ und $c \in [y]$. Weiter sei $f(c) \in [f_c] = [\underline{fc}, \overline{fc}]$, und $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ sei eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\underline{\delta f} > 0$. Dann gilt für

$$p := \min \left\{ c, c + ((\underline{y} - c) \cdot \underline{\delta f} + \text{diam}[f_c]) / \overline{\delta f} \right\}$$

sowohl

$$\underline{y} \leq p \leq c$$

als auch

$$\min_{x \in [y]} f(x) = \min_{x \in [\underline{y}, p]} f(x).$$

Ferner ist

$$\min_{x \in [\underline{y}, p]} f(x) < f(\underline{y})$$

für alle \underline{y} mit $p < \underline{y} \leq \bar{y}$.

Satz 5.2.6 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $f(c) \in [f_c] = [\underline{f_c}, \overline{f_c}]$, es sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\underline{\delta f} > 0$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$p := c + (m + \text{diam}[f_c]) / \overline{\delta f}$$

mit

$$m := \min \left\{ -\text{diam}[f_c], \tilde{f} - \overline{f_c}, (\underline{y} - c) \cdot \underline{\delta f} \right\}$$

sowohl

$$p \leq c$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in (p, \bar{y}], \quad \text{falls } \underline{y} \leq p,$$

$$\min_{x \in [y]} f(x) > f^*, \quad \text{falls } p < \underline{y}.$$

Satz 5.2.7 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $f(c) \in [f_c] = [\underline{f_c}, \overline{f_c}]$, es sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $\overline{\delta f} < 0$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$q := c + (m + \text{diam}[f_c]) / \underline{\delta f}$$

mit

$$m := \min \left\{ -\text{diam}[f_c], \tilde{f} - \overline{f_c}, (\bar{y} - c) \cdot \overline{\delta f} \right\}$$

sowohl

$$c \leq q$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in [y, q), \quad \text{falls } q \leq \bar{y},$$

$$\min_{x \in [y]} f(x) > f^*, \quad \text{falls } \bar{y} < q.$$

Satz 5.2.8 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [y, \bar{y}] \subseteq [x]$. Weiter sei $f(c) \in [f_c] = [\underline{f}c, \overline{f}c]$, es sei $\delta f([y]; c) = [\underline{\delta}f, \overline{\delta}f]$ eine Intervallsteigung erster Ordnung von f auf $[y]$ bezüglich c mit $0 \in [\underline{\delta}f, \overline{\delta}f]$, und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\underline{f}c > \tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Dann gilt für

$$p := \begin{cases} c + (\tilde{f} - \underline{f}c) / \overline{\delta}f & \text{falls } \overline{\delta}f \neq 0 \\ -\infty & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$q := \begin{cases} c + (\tilde{f} - \underline{f}c) / \underline{\delta}f & \text{falls } \underline{\delta}f \neq 0 \\ +\infty & \text{sonst,} \end{cases}$$

und

$$\mathcal{Z} := (p, q) \cap [y]$$

sowohl

$$p < c < q$$

als auch

$$f(x) > f^*, \quad x \in \mathcal{Z}.$$

Bemerkung 5.2.9 Mit Hilfe der Sätze 5.2.5-5.2.8 kann also die Suche nach globalen Minimalstellen vom Intervall $[y]$ auf die (evtl. leeren) Teilintervalle $[y^{(1)}] \subseteq [y, c]$ und $[y^{(2)}] \subseteq [c, \bar{y}]$ eingeschränkt werden.

Bemerkung 5.2.10 Bei der Bestimmung von p und q auf einem Rechner müssen auch mögliche Rundungsfehler berücksichtigt werden, um keine globalen Minimalstellen zu verlieren. Daher muss auf einem Rechner in den Sätzen 5.2.5 - 5.2.8 jeweils eine obere Schranke von p bzw. eine untere Schranke von q bestimmt werden. Dies kann durch Verwendung von Intervallrechnung oder gerichteten Rundungen gewährleistet werden.

Bemerkung 5.2.11 Gilt in der Situation von Satz 5.2.6

$$\min \left\{ \tilde{f} - \overline{f}c, (y - c) \cdot \underline{\delta}f \right\} = (y - c) \cdot \underline{\delta}f,$$

so folgt mit (5.5)

$$g_l(y) = \overline{f}c + (y - c) \cdot \underline{\delta}f \leq \tilde{f}.$$

Da auch $g_l(y)$ eine obere Schranke des globalen Minimums von f ist, kann \tilde{f} durch $g_l(y)$ ersetzt werden.

Entsprechend folgt in der Situation von Satz 5.2.7 aus

$$\min \left\{ \tilde{f} - \overline{f}c, (\bar{y} - c) \cdot \overline{\delta}f \right\} = (\bar{y} - c) \cdot \overline{\delta}f,$$

das \tilde{f} durch

$$h_r(\bar{y}) = \overline{fc} + (\bar{y} - c) \cdot \overline{\delta f} \leq \tilde{f}$$

ersetzt werden kann.

5.2.4 Ein "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung

Wie zuvor sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$ und $c \in [y] = [y, \bar{y}] \subseteq [x]$ beliebig, aber fest. Wir gehen nun davon aus, dass wir zum Beispiel mit Hilfe der automatischen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung eine Einschließung der Form

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}] \cdot (x - c) + [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}] \cdot (x - c)^2 \quad \text{für alle } x \in [y] \quad (5.9)$$

gegeben haben. Ferner sei $f(c)$ im Intervall $[\underline{fc}, \overline{fc}]$ enthalten. Im Gegensatz zu (5.5)-(5.8), wo der Wertebereich auf $[y]$ durch vier Geradenstücke eingeschlossen wird, schließt (5.9) diesen Wertebereich durch vier Parabelstücke ein.

Lemma 5.2.12 Unter der Voraussetzung (5.9) mit $f(c) \in [\underline{fc}, \overline{fc}]$ gilt

$$f(x) \geq \underline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 =: g_1(x) \quad \text{für } \underline{y} \leq x \leq c, \quad (5.10)$$

$$f(x) \leq \overline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (x - c) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 =: g_2(x) \quad \text{für } \underline{y} \leq x \leq c, \quad (5.11)$$

$$f(x) \geq \underline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 =: g_3(x) \quad \text{für } c \leq x \leq \bar{y}, \quad (5.12)$$

$$f(x) \leq \overline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 =: g_4(x) \quad \text{für } c \leq x \leq \bar{y}. \quad (5.13)$$

Beweis: Klar. □

Die Aussage von Lemma 5.2.12 ist in Abbildung 5.7 dargestellt.

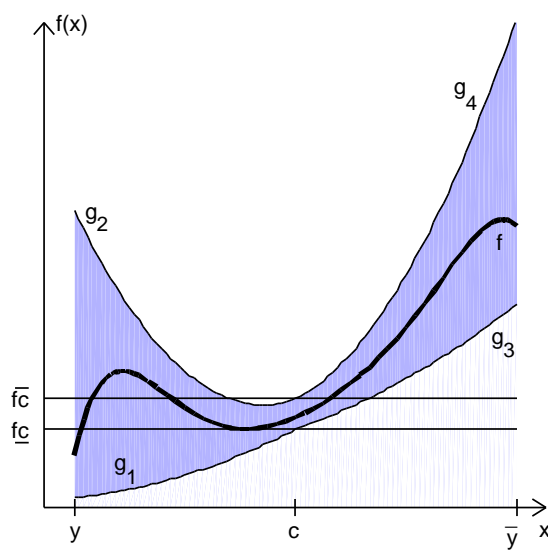


Abbildung 5.7: Graphische Darstellung von Lemma 5.2.12

Mit Hilfe dieser Parabelstücke können wir nun einen "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung formulieren. Dabei verwenden wir die in folgender Definition eingeführten Bezeichnungen.

Definition 5.2.13 Für die beiden quadratischen Gleichungen

$$\tilde{f} = \underline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad (5.14)$$

und

$$\tilde{f} = \underline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad (5.15)$$

definieren wir die Diskriminanten

$$D_p := \left(\frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} \right)^2 - \frac{(\underline{fc} - \tilde{f})}{\underline{\delta_2 f}} = \left(\overline{\delta fc}^2 - 4 \underline{\delta_2 f} (\underline{fc} - \tilde{f}) \right) / (4 \underline{\delta_2 f}^2) \quad (5.16)$$

sowie

$$D_q := \left(\frac{\underline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} \right)^2 - \frac{(\underline{fc} - \tilde{f})}{\underline{\delta_2 f}} = \left(\underline{\delta fc}^2 - 4 \underline{\delta_2 f} (\underline{fc} - \tilde{f}) \right) / (4 \underline{\delta_2 f}^2). \quad (5.17)$$

Satz 5.2.14 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$, $c \in [y] = [\underline{y}, \overline{y}] \subseteq [x]$ und $f(c) \in [\underline{fc}, \overline{fc}]$.

Ferner seien $[\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}]$ und $[\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$ Intervalle mit

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}] \cdot (x - c) + [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}] \cdot (x - c)^2 \quad \text{für alle } x \in [y], \quad (5.18)$$

und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x). \quad (5.19)$$

Falls $\underline{\delta_2 f} < 0$ ist, dann gilt mit

$$p := \left\{ \begin{array}{ll} \min \left\{ c, c - \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_p}, c - \frac{\overline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\}, & \text{falls } D_p > 0, \\ \min \left\{ c, c - \frac{\overline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\}, & \text{sonst,} \end{array} \right\} \quad (5.20)$$

$$q := \left\{ \begin{array}{ll} \max \left\{ c, c - \frac{\underline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} + \sqrt{D_q}, c - \frac{\underline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\}, & \text{falls } D_q > 0, \\ \max \left\{ c, c - \frac{\underline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\}, & \text{sonst,} \end{array} \right\} \quad (5.21)$$

und

$$\mathcal{Z} := \begin{cases} \emptyset, & \text{falls } p = q = c, \\ (p, q) \cap [y], & \text{sonst,} \end{cases}$$

dass

$$f(x) > f^*, \quad x \in \mathcal{Z}.$$

Beweis:

Nach Lemma 5.2.12 ist für $\underline{y} \leq x \leq c$

$$f(x) \geq \underline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2. \quad (5.22)$$

Für $D_p > 0$ hat die quadratische Gleichung (5.14) die Lösungen

$$p_1 := c - \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_p} \quad (5.23)$$

und

$$p_2 := c - \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} + \sqrt{D_p}. \quad (5.24)$$

Wegen $\underline{\delta_2 f} < 0$ gilt somit

$$f(x) > \tilde{f} \geq f^* \quad \text{für alle } x \in (p_1, p_2) \cap [\underline{y}, c]. \quad (5.25)$$

Wir unterscheiden nun 4 Fälle:

(i) Falls $D_p > 0$, $p_2 > c$ und $\tilde{f} \leq \underline{fc}$, so folgt

$$\sqrt{D_p} \geq \left| \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} \right|$$

und damit aus (5.23)

$$\min \left\{ p_1, c - \frac{\overline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\} = p_1 \leq c.$$

Also gilt nach (5.25)

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (p, p_2) \cap [\underline{y}, c]$$

mit p aus (5.20).

(ii) Falls $D_p > 0$, $p_2 > c$ und $\tilde{f} > \underline{fc}$, so ist

$$\sqrt{D_p} < \left| \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} \right|$$

und somit nach (5.24) $\overline{\delta fc} > 0$. Damit gilt

$$p = \min \left\{ c, c - \frac{\overline{\delta fc}}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_p}, c - \frac{\overline{\delta fc}}{\underline{\delta_2 f}} \right\} = c < p_1$$

und folglich nach (5.25)

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (p, p_2) \cap [\underline{y}, c] = \emptyset.$$

(iii) Falls $D_p > 0$ und $p_2 \leq c$, so muss nach (5.24) $\overline{\delta f c} < 0$ sein. Wegen $\underline{\delta_2 f} < 0$ gilt daher

$$f(c) + \overline{\delta f c} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 > f(c)$$

für alle

$$x \in \left(c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}}, c \right) \cap [\underline{y}, c]. \quad (5.26)$$

Auf Grund von (5.18) gilt somit

$$f(x) > f(c) \geq f^*$$

für alle x aus (5.26). Mit

$$c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}} < p_2 \leq c$$

folgt aus (5.25), dass

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (p, c) \cap [\underline{y}, c]. \quad (5.27)$$

Wegen $\overline{\delta f c} < 0$ ist auch $\underline{\delta f c} < 0$. Damit kann $q > c$ für q aus (5.21) nur dann gelten, wenn

$$\sqrt{D_q} > \frac{\delta f c}{2 \delta_2 f}$$

und folglich $\underline{f c} > \tilde{f}$ ist. Also folgt im Fall $q > c$ in Verschärfung von (5.27)

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (p, c] \cap [\underline{y}, c]. \quad (5.28)$$

(iv) Im Fall $D_p \leq 0$ ist für

$$\min \left\{ c, c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}} \right\} = c$$

nichts weiter zu zeigen. Falls

$$\min \left\{ c, c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}} \right\} = c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}} < c,$$

so ist $\overline{\delta f c} < 0$. Analog zu (iii) folgt dann (5.27) bzw. (5.28).

Entsprechend gehen wir für $x \in [c, \bar{y}]$ vor.

Nach Lemma 5.2.12 gilt für alle $x \in [c, \bar{y}]$

$$f(x) \geq \underline{f c} + \underline{\delta f c} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2.$$

Für $D_q > 0$ hat die quadratische Gleichung (5.15) die Lösungen

$$q_1 := c - \frac{\delta f c}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_q} \quad (5.29)$$

und

$$q_2 := c - \frac{\delta f c}{2 \underline{\delta_2 f}} + \sqrt{D_q}. \quad (5.30)$$

Wegen $\underline{\delta_2 f} < 0$ ist somit

$$f(x) > \tilde{f} \geq f^* \quad \text{für alle } x \in (q_1, q_2) \cap [c, \bar{y}].$$

Im Fall $D_q > 0$ und $q_1 < c$ erhalten wir analog zu den obigen Fällen (i) und (ii)

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (q_1, q) \cap [c, \bar{y}]$$

mit q aus (5.21). Analog zu (iii) gilt im Fall $D_q > 0$ und $q_1 \geq c$

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (c, q) \cap [c, \bar{y}],$$

und falls zusätzlich $p < c$ ist, so folgt verschärfend

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in [c, q) \cap [c, \bar{y}].$$

Ist $D_q \leq 0$ und

$$\max \left\{ c, c - \frac{\delta f c}{\underline{\delta_2 f}} \right\} = c - \frac{\delta f c}{\underline{\delta_2 f}} > c,$$

so erhalten wir analog zu (iv)

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in (c, q) \cap [c, \bar{y}]$$

bzw. falls zusätzlich $p < c$ ist

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in [c, q) \cap [c, \bar{y}].$$

Insgesamt gilt also, sofern $p < c$ oder $q > c$, dass

$$f(x) > f^*, \quad x \in (p, q) \cap [y],$$

ist. □

Korollar 5.2.15 Unter den Voraussetzungen von Satz 5.2.14 gilt also:

Jedes $x^* \in [y]$, das globale Minimalstelle von f auf $[x]$ ist, muss in

$$(-\infty, p] \cap [y, c]$$

oder in

$$[c, \bar{y}] \cap [q, \infty)$$

enthalten sein. Falls $p < \underline{y}$ und $q > \bar{y}$, dann kann $[y]$ keine globale Minimalstelle von f auf $[x]$ enthalten.

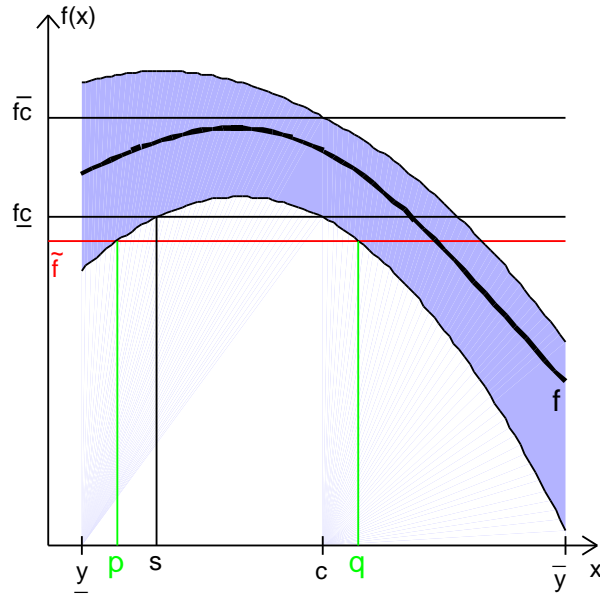


Abbildung 5.8: Graphische Darstellung von Satz 5.2.14

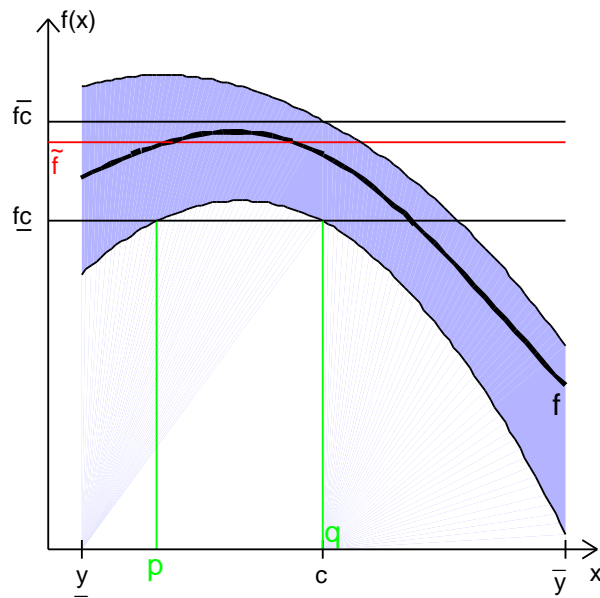


Abbildung 5.9: Satz 5.2.14 im Fall $D_p > 0$, $p = c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}}$, $D_q < 0$

In Abbildung 5.8 ist die Aussage von Satz 5.2.14 für den Fall

$$D_p > 0, \quad p = c - \frac{\overline{\delta f c}}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_p}, \quad D_q > 0, \quad q = c - \frac{\delta f c}{2 \overline{\delta_2 f}} + \sqrt{D_q}$$

dargestellt. Im Schaubild ist dabei

$$s := c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}} > p.$$

Abbildung 5.9 zeigt den Fall

$$D_p > 0, \quad p = c - \frac{\overline{\delta f c}}{\underline{\delta_2 f}}, \quad D_q < 0.$$

Für $x \in (p, q)$ gilt in den Abbildungen 5.8 und 5.9 jeweils $f(x) > f^*$.

Entsprechend können die weiteren Fälle dargestellt werden.

Satz 5.2.16 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$, $c \in [y] = [\underline{y}, \overline{y}] \subseteq [x]$ und $f(c) \in [\underline{f c}, \overline{f c}]$.

Ferner seien $[\underline{\delta f c}, \overline{\delta f c}]$ und $[\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$ Intervalle mit

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta f c}, \overline{\delta f c}] \cdot (x - c) + [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}] \cdot (x - c)^2 \quad \text{für alle } x \in [y], \quad (5.31)$$

und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x). \quad (5.32)$$

Falls $\underline{\delta_2 f} = 0$ ist, dann gilt mit

$$p := \left\{ \begin{array}{ll} c + (\tilde{f} - \underline{f c}) / \overline{\delta f c}, & \text{falls } \overline{\delta f c} > 0 \text{ und } \tilde{f} < \underline{f c}, \\ -\infty, & \text{falls } \overline{\delta f c} < 0, \\ -\infty, & \text{falls } \overline{\delta f c} = 0 \text{ und } \tilde{f} < \underline{f c}, \\ c, & \text{falls } \overline{\delta f c} \geq 0 \text{ und } \tilde{f} \geq \underline{f c}, \end{array} \right\} \quad (5.33)$$

$$q := \left\{ \begin{array}{ll} c + (\tilde{f} - \underline{f c}) / \underline{\delta f c}, & \text{falls } \underline{\delta f c} < 0 \text{ und } \tilde{f} < \underline{f c}, \\ +\infty, & \text{falls } \underline{\delta f c} > 0, \\ +\infty, & \text{falls } \underline{\delta f c} = 0 \text{ und } \tilde{f} < \underline{f c}, \\ c, & \text{falls } \underline{\delta f c} \leq 0 \text{ und } \tilde{f} \geq \underline{f c}, \end{array} \right\} \quad (5.34)$$

und

$$\mathcal{Z} := \left\{ \begin{array}{ll} \emptyset, & \text{falls } p = q = c, \\ (p, q) \cap [y], & \text{sonst,} \end{array} \right.$$

dass

$$f(x) > f^*, \quad x \in \mathcal{Z}.$$

Beweis:

Für alle $x \in [\underline{y}, c]$ gilt wegen $\delta_2 f = 0$

$$f(x) \geq f(c) + \overline{\delta f c} \cdot (x - c) \geq \underline{f c} + \overline{\delta f c} \cdot (x - c). \quad (5.35)$$

(i) Falls $\overline{\delta f c} > 0$ und $\tilde{f} < \underline{f c}$ ist, so gilt nach (5.35)

$$f(x) \geq \underline{f c} + \overline{\delta f c} \cdot (x - c) > \tilde{f} \geq f^*$$

für alle $x \in \left(c + (\tilde{f} - \underline{f c}) / \overline{\delta f c}, c \right]$.

(ii) Falls $\overline{\delta f c} < 0$ ist, dann folgt aus (5.35), dass

$$f(x) > f(c) \geq f^*$$

für alle $x \in [\underline{y}, c)$ gilt. Ist zusätzlich $q > c$, so ist wegen $\underline{\delta f c} \leq \overline{\delta f c} < 0$ und (5.34)

$$\underline{f c} > \tilde{f}$$

und damit

$$f(x) > f^* \quad \text{für alle } x \in [\underline{y}, c].$$

(iii) Falls $\overline{\delta f c} = 0$ und $\tilde{f} < \underline{f c}$ ist, so folgt nach (5.35)

$$f(x) \geq \underline{f c} > \tilde{f} \geq f^*$$

für alle $x \in [\underline{y}, c]$.

Analog werden die Fälle für q behandelt. Insgesamt folgt damit, sofern $p < c$ oder $q > c$, dass

$$f(x) > \tilde{f} \geq f^*, \quad x \in (p, q) \cap [y],$$

gilt. □

Korollar 5.2.17 Unter den Voraussetzungen von Satz 5.2.16 gilt also:

Jedes $x^* \in [y]$, das globale Minimalstelle von f auf $[x]$ ist, muss in

$$(-\infty, p] \cap [\underline{y}, c]$$

oder in

$$[c, \bar{y}] \cap [q, \infty)$$

enthalten sein. Falls $p < \underline{y}$ und $q > \bar{y}$ ist, dann kann $[y]$ keine globale Minimalstelle von f auf $[x]$ enthalten.

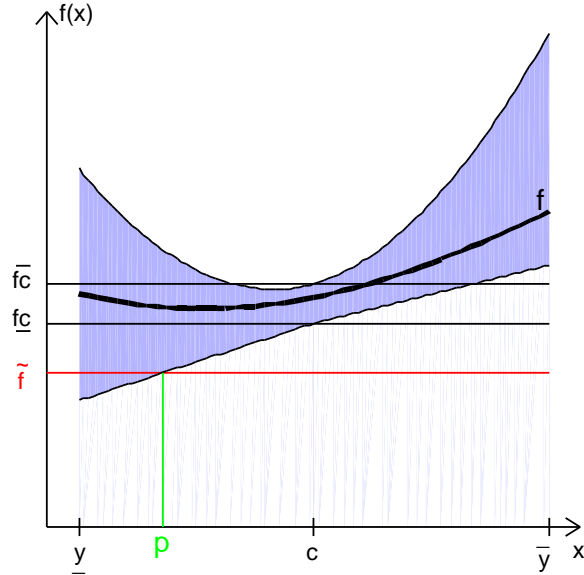


Abbildung 5.10: Graphische Darstellung von Satz 5.2.16

Die Aussage von Satz 5.2.16 ist in Abbildung 5.10 für den Fall

$$0 < \underline{\delta f c} \leq \overline{\delta f c} \text{ und } \tilde{f} < \underline{f c}$$

dargestellt. Die Suche nach globalen Minimalstellen von f kann von $[\underline{y}, \bar{y}]$ auf $[\underline{y}, p]$ eingeschränkt werden.

Satz 5.2.18 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$, $c \in [y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$ und $f(c) \in [\underline{f c}, \overline{f c}]$.

Ferner seien $[\underline{\delta f c}, \overline{\delta f c}]$ und $[\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$ Intervalle mit

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta f c}, \overline{\delta f c}] \cdot (x - c) + [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}] \cdot (x - c)^2 \text{ für alle } x \in [y], \quad (5.36)$$

und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ mit

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x). \quad (5.37)$$

Falls $\underline{\delta_2 f} > 0$ ist, dann gilt mit

$$p_1 := \begin{cases} c - \frac{\overline{\delta f c}}{2 \underline{\delta_2 f}} - \sqrt{D_p}, & \text{falls } D_p \geq 0, \\ \underline{y} - 1, & \text{falls } D_p < 0, \end{cases}$$

$$p_2 := \begin{cases} c - \frac{\overline{\delta f c}}{2 \underline{\delta_2 f}} + \sqrt{D_p}, & \text{falls } D_p \geq 0, \\ \underline{y} - 1, & \text{falls } D_p < 0, \end{cases}$$

$$q_1 := \begin{cases} c - \frac{\delta f c}{2 \delta_2 f} - \sqrt{D_q}, & \text{falls } D_q \geq 0, \\ \bar{y} + 1, & \text{falls } D_q < 0, \end{cases}$$

$$q_2 := \begin{cases} c - \frac{\delta f c}{2 \delta_2 f} + \sqrt{D_q}, & \text{falls } D_q \geq 0, \\ \bar{y} + 1, & \text{falls } D_q < 0, \end{cases}$$

und

$$\mathcal{Z} := \left([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c] \right) \cup \left([q_1, q_2] \cap [c, \bar{y}] \right),$$

dass

$$f(x) > f^*, \quad x \in [y] \setminus \mathcal{Z}.$$

Beweis:

Es sei zunächst $x \leq c$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \underline{f}c + \overline{\delta f}c \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 &> \tilde{f} \\ \Leftrightarrow \left(x - c + \overline{\delta f}c / (2 \underline{\delta_2 f}) \right)^2 &> \left(\frac{\overline{\delta f}c}{2 \underline{\delta_2 f}} \right)^2 + \frac{(\tilde{f} - \underline{f}c)}{\underline{\delta_2 f}} \\ &= D_p. \end{aligned}$$

Falls $D_p < 0$ ist, so folgt nach (5.10), dass

$$f(x) > \tilde{f} \quad \text{für alle } x \in [\underline{y}, c] = [\underline{y}, c] \setminus \emptyset = [\underline{y}, c] \setminus ([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c]).$$

Falls andererseits $D_p \geq 0$ ist, so folgt

$$\begin{aligned} \underline{f}c + \overline{\delta f}c \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 &> \tilde{f}, \quad x \in [\underline{y}, c] \\ \Leftrightarrow x \notin [p_1, p_2] \text{ und } x \in [\underline{y}, c] \\ \Leftrightarrow x \in [\underline{y}, c] \setminus ([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c]) \end{aligned}$$

und damit auch in diesem Fall

$$f(x) > \tilde{f} \quad \text{für alle } x \in [\underline{y}, c] \setminus ([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c]). \quad (5.38)$$

Analog lässt sich für $x \geq c$ zeigen, dass

$$f(x) > \tilde{f} \quad \text{für alle } x \in [c, \bar{y}] \setminus ([q_1, q_2] \cap [c, \bar{y}]). \quad (5.39)$$

Insgesamt folgt aus (5.38) und (5.39), dass

$$f(x) > f^*, \quad x \in [y] \setminus \mathcal{Z},$$

mit

$$\mathcal{Z} = \left([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c] \right) \cup \left([q_1, q_2] \cap [c, \bar{y}] \right)$$

ist. □

Korollar 5.2.19 Unter den Voraussetzungen von Satz 5.2.18 gilt:

Jedes $x^* \in [y]$, das globale Minimalstelle von f auf $[x]$ ist, muss in

$$([p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c]) \text{ oder in } ([q_1, q_2] \cap [c, \bar{y}])$$

enthalten sein. Falls

$$[p_1, p_2] \cap [\underline{y}, c] = \emptyset \quad (5.40)$$

und

$$[q_1, q_2] \cap [c, \bar{y}] = \emptyset \quad (5.41)$$

gilt, dann kann $[y]$ keine globale Minimalstelle von f auf $[x]$ enthalten. Für $D_p < 0$ und $D_q < 0$ sind (5.40) und (5.41) erfüllt.

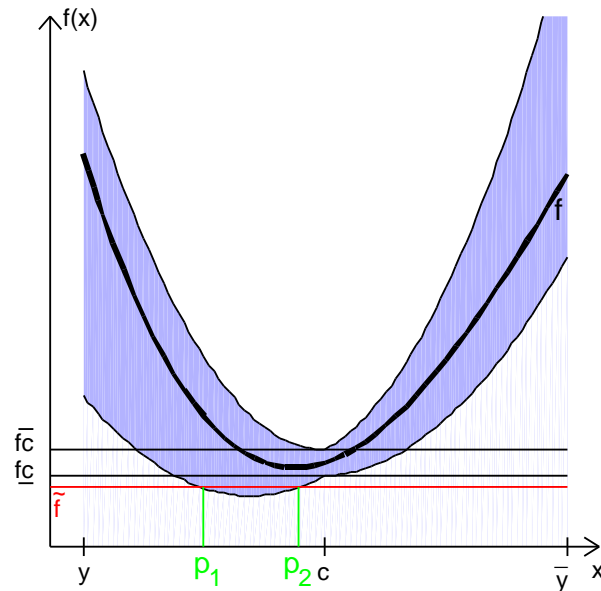


Abbildung 5.11: Graphische Darstellung von Satz 5.2.18

In Abbildung 5.11 ist Satz 5.2.18 für den Fall

$$D_p \geq 0 \quad \text{und} \quad D_q < 0$$

dargestellt. Die Suche nach globalen Minimalstellen von f kann von $[\underline{y}, \bar{y}]$ auf $[p_1, p_2]$ eingeschränkt werden.

Abbildung 5.12 zeigt die Aussage von Satz 5.2.18 für den Fall

$$D_p \geq 0, D_q \geq 0 \quad \text{und} \quad p_2 > c, q_1 < c.$$

Das Schaubild zeigt, dass die Suche nach globalen Minimalstellen der Funktion f von $[\underline{y}, \bar{y}]$ auf $[p_1, q_2]$ eingeschränkt werden kann.

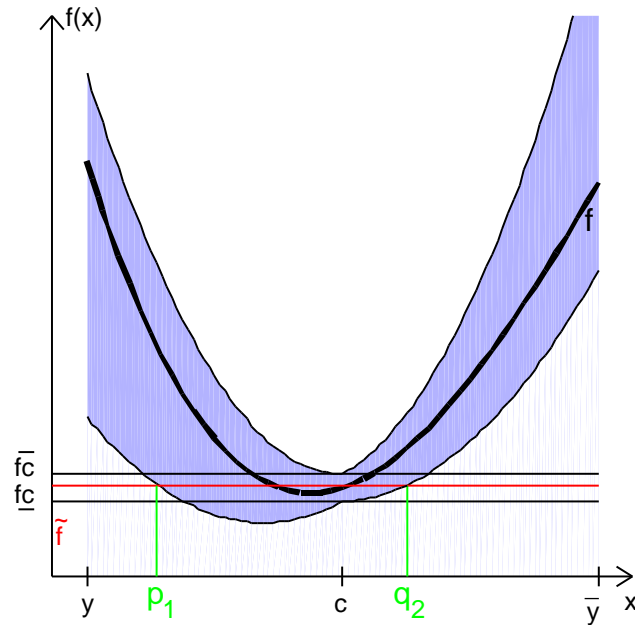


Abbildung 5.12: Graphische Darstellung von Satz 5.2.18

Entsprechend können die weiteren Fälle dargestellt werden.

Mit Hilfe der Einschließung (5.9) bzw. der Parabelstücke (5.10)-(5.13) kann nicht nur ein "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung durchgeführt werden. Vielmehr kann auch eine Anpassung von \tilde{f} vorgenommen werden sowie eine untere Schranke \underline{f}_y für den Wertebereich von f auf $[y]$ gewonnen werden. Dies wird in den folgenden beiden Sätzen erläutert.

Satz 5.2.20 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$, $c \in [y] = [y, \bar{y}] \subseteq [x]$ und $f(c) \in [\underline{f}c, \overline{f}c]$. Ferner seien $[\underline{\delta}f c, \overline{\delta}f c]$ und $[\underline{\delta}_2 f, \overline{\delta}_2 f]$ Intervalle mit

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta}f c, \overline{\delta}f c] \cdot (x - c) + [\underline{\delta}_2 f, \overline{\delta}_2 f] \cdot (x - c)^2 \quad \text{für alle } x \in [y],$$

und es sei $\tilde{f} \in \mathbb{R}$ eine obere Schranke von f^* , d. h.

$$\tilde{f} \geq f^* = \min_{x \in [x]} f(x).$$

Außerdem definieren wir

$$a_l := \underline{f}c + \underline{\delta}f c \cdot (\underline{y} - c) + \underline{\delta}_2 f \cdot (\underline{y} - c)^2,$$

$$a_r := \overline{f}c + \overline{\delta}f c \cdot (\bar{y} - c) + \overline{\delta}_2 f \cdot (\bar{y} - c)^2,$$

$$p_l := \begin{cases} \overline{fc} - \frac{1}{4} (\underline{\delta fc})^2 / \overline{\delta_2 f}, & \text{falls } \overline{\delta_2 f} > 0 \text{ und } c - \frac{1}{2} \underline{\delta fc} / \overline{\delta_2 f} \in [\underline{y}, c], \\ +\infty, & \text{sonst,} \end{cases}$$

und

$$p_r := \begin{cases} \overline{fc} - \frac{1}{4} (\overline{\delta fc})^2 / \overline{\delta_2 f}, & \text{falls } \overline{\delta_2 f} > 0 \text{ und } c - \frac{1}{2} \overline{\delta fc} / \overline{\delta_2 f} \in [c, \overline{y}], \\ +\infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Falls $\overline{\delta_2 f} \leq 0$ ist, dann gilt

$$f^* \leq \min \{ a_l, a_r, \overline{fc}, \tilde{f} \}.$$

Falls $\overline{\delta_2 f} > 0$ ist, dann gilt

$$f^* \leq \begin{cases} \min \{ p_l, a_l, \overline{fc}, \tilde{f} \}, & \text{falls } \underline{\delta fc} > 0, \\ \min \{ p_r, a_r, \overline{fc}, \tilde{f} \}, & \text{falls } \overline{\delta fc} < 0, \\ \min \{ \overline{fc}, \tilde{f} \}, & \text{falls } 0 \in [\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}]. \end{cases}$$

Beweis:

Nach Lemma 5.2.12 gilt

$$f(x) \leq \overline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (x - c) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad \text{für } \underline{y} \leq x \leq c, \quad (5.42)$$

und

$$f(x) \leq \overline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \overline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad \text{für } c \leq x \leq \overline{y}. \quad (5.43)$$

Da

$$f^* \leq f(x)$$

für alle $x \in [y]$ gelten muss, folgt die Behauptung, indem man in (5.42) und (5.43) die Minima bestimmt. \square

Bemerkung 5.2.21 Offensichtlich ist die in Satz 5.2.20 berechnete obere Schranke von f^* immer kleiner oder gleich als f . Folglich kann \tilde{f} im Algorithmus zur globalen Optimierung mit diesem Wert aktualisiert werden.

Satz 5.2.22 Es sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf $[x]$, $c \in [y] = [\underline{y}, \overline{y}] \subseteq [x]$ und $f(c) \in [\underline{fc}, \overline{fc}]$. Ferner seien $[\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}]$ und $[\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]$ Intervalle mit

$$f(x) - f(c) \in [\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}] \cdot (x - c) + [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}] \cdot (x - c)^2 \quad \text{für alle } x \in [y].$$

Außerdem definieren wir

$$b_l := \underline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (\underline{y} - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (\underline{y} - c)^2,$$

$$b_r := \underline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (\overline{y} - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (\overline{y} - c)^2,$$

$$m_l := \begin{cases} \underline{fc} - \frac{1}{4} (\overline{\delta fc})^2 / \underline{\delta_2 f}, & \text{falls } \underline{\delta_2 f} > 0 \text{ und } c - \frac{1}{2} \overline{\delta fc} / \underline{\delta_2 f} \in [\underline{y}, c], \\ +\infty, & \text{sonst,} \end{cases}$$

und

$$m_r := \begin{cases} \underline{fc} - \frac{1}{4} (\underline{\delta fc})^2 / \underline{\delta_2 f}, & \text{falls } \underline{\delta_2 f} > 0 \text{ und } c - \frac{1}{2} \underline{\delta fc} / \underline{\delta_2 f} \in [c, \overline{y}], \\ +\infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann gilt für alle $x \in [y]$

$$f(x) \geq \begin{cases} \min\{b_l, b_r\}, & \text{falls } \underline{\delta_2 f} \leq 0, \\ \min\{m_l, m_r, b_l, b_r\}, & \text{falls } \underline{\delta_2 f} > 0. \end{cases}$$

Beweis:

Nach Lemma 5.2.12 gilt

$$f(x) \geq \underline{fc} + \overline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad \text{für } \underline{y} \leq x \leq c \quad (5.44)$$

und

$$f(x) \geq \underline{fc} + \underline{\delta fc} \cdot (x - c) + \underline{\delta_2 f} \cdot (x - c)^2 \quad \text{für } c \leq x \leq \overline{y}. \quad (5.45)$$

Durch Berechnung der Minima in (5.44) und (5.45) folgt die Behauptung. \square

5.2.5 Algorithmus

Zur Anwendung des "Pruning"-Schritts zweiter Ordnung passen wir den Algorithmus aus Abschnitt 5.1.1 an und erhalten folgende Vorgehensweise.

Führe folgende Schritte durch, solange die Arbeitsliste \mathcal{L} nicht leer ist:

1. Verwende das momentan erste Element $([y], fy)$ der Arbeitsliste \mathcal{L} und streiche es aus der Liste heraus.

2. Setze $c = \text{mid}[y]$ und berechne mit Hilfe der automatischen Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung ein Steigungstupel

$$(f_{[y]}, [f\underline{c}, \overline{f}c], [\underline{\delta f}c, \overline{\delta f}c], [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}], [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}])$$

zweiter Ordnung von f auf dem Intervall $[y]$ bezüglich c .

3. Führe mit Hilfe der Sätze 5.2.6-5.2.8 einen "Pruning"-Schritt erster Ordnung auf $[y]$ durch. Dadurch kann $[y]$ nach Bemerkung 5.2.9 durch die (evtl. leeren) Teilintervalle $[y^{(1)}] \subseteq [\underline{y}, c]$ und $[y^{(2)}] \subseteq [c, \overline{y}]$ ersetzt werden. Im Fall $0 \in [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}]$ und $\tilde{f} \geq \underline{f}c$ kann Satz 5.2.8 nicht angewendet werden, man setze in diesem Fall $[y^{(1)}] = [\underline{y}, c]$ und $[y^{(2)}] = [c, \overline{y}]$.
4. Führe mit Hilfe der Sätze 5.2.14-5.2.18 einen "Pruning"-Schritt zweiter Ordnung auf $[y]$ durch. Dadurch kann die Suche nach globalen Minimalstellen im Intervall $[y]$ auf (evtl. leere) Teilintervalle von $[y]$ eingeschränkt werden.
5. Berechne den (evtl. leeren) Schnitt von $[y^{(1)}]$ mit der Vereinigung der in Schritt 4 erhaltenen Intervalle und ebenso den Schnitt von $[y^{(2)}]$ mit der Vereinigung der in Schritt 4 erhaltenen Intervalle. Bilde mit den nichtleeren entstandenen Schnittintervallen $[z^{(i)}]$ die neuen Paare $([z^{(i)}], \underline{f}y)$.
6. Führe für alle Paare $([z^{(i)}], \underline{f}y)$ jeweils die Schritte 7-10 durch.
7. Setze $c = \text{mid}[z^{(i)}]$ und berechne mit Hilfe der automatischen Berechnung von Steigungstupeln ein Steigungstupel

$$(f_{[z^{(i)}]}, [f\underline{c}, \overline{f}c], [\underline{\delta f}c, \overline{\delta f}c], [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}], [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}]) \quad (5.46)$$

zweiter Ordnung von f auf dem Intervall $[z^{(i)}]$ bezüglich c .

8. Verwende das Steigungstupel zweiter Ordnung (5.46), um eine Einschließung $[fz^{(i)}, \overline{f}z^{(i)}]$ des Wertebereichs von f auf $[z^{(i)}]$ zu berechnen und aktualisiere damit $\underline{f}y$. Verwende Satz 5.2.22, um die untere Schranke $\underline{f}z^{(i)}$ evtl. noch zu verbessern.
9. Aktualisiere \tilde{f} . Verwende dazu die in 7. gewonnene Einschließung $[f\underline{c}, \overline{f}c]$ von $f(c)$, Bemerkung 5.2.11 sowie Satz 5.2.20.
10. Falls $\tilde{f} < \underline{f}z^{(i)}$ ist, dann lösche das Paar $([z^{(i)}], \underline{f}z^{(i)})$. Falls $\text{diam}_{\text{rel}}[z^{(i)}] \leq \epsilon$ oder falls $\text{diam}_{\text{rel}}[fz^{(i)}, \overline{f}z^{(i)}] \leq \epsilon$ ist, so füge das Paar $([z^{(i)}], \underline{f}z^{(i)})$ in die Ergebnisliste \mathcal{Q} ein, andernfalls in \mathcal{L} . Dabei ist $\epsilon > 0$ die vorgegebene relative Genauigkeit.
11. Streiche alle Paare $([y], \underline{f}y)$ mit $\underline{f}y > \tilde{f}$ aus \mathcal{L} , da sie keine Minimalstellen von f enthalten können.

Bemerkung 5.2.23 Die Listenverwaltung wird wie in Abschnitt 5.1.2 beschrieben gehandhabt.

Satz 5.2.24 Der obige Algorithmus besitzt folgende Eigenschaften:

- a) Der Algorithmus terminiert.
 b) Ist $([y], \underline{fy})$ nach Ablauf des Algorithmus das erste Element der Ergebnisliste \mathcal{Q} , so gilt für das globale Minimum f^* von f

$$f^* \in [\underline{fy}, \tilde{f}].$$

- c) Für jede globale Minimalstelle x^* von f auf $[x]$ gilt nach Ablauf des Algorithmus

$$x^* \in \bigcup_{([y], \underline{fy}) \in \mathcal{Q}} [y].$$

Beweis:

- a) Der Algorithmus terminiert, da für die in Schritt 5 gebildeten Intervalle $[z^{(i)}]$

$$\text{diam} [z^{(i)}] \leq \max \left\{ \text{diam} [y^{(1)}], \text{diam} [y^{(2)}] \right\} \leq \frac{1}{2} \cdot \text{diam} [y] \quad (5.47)$$

gilt und ein Paar $([y], \underline{fy})$ mit $\text{diam}_{\text{rel}} [y] \leq \epsilon$ in \mathcal{Q} eingefügt wird.

- b) Die Aussage gilt auf Grund der Listenanordnung nach steigenden \underline{fy} .
 c) Die Aussage gilt, da in den "Pruning"-Schritten erster und zweiter Ordnung sowie in Schritt 11 des Algorithmus keine Teilintervalle gelöscht werden, die globale Minimalstellen enthalten.

□

Bemerkung 5.2.25 Damit der Algorithmus auch bei der Durchführung auf einem Rechner mit Gleitkomma-Arithmetik terminiert, muss die vorgegebene relative Genauigkeit ϵ größer als die Maschinengenauigkeit gewählt werden. Denn dann gilt in Schritt 5 des Algorithmus

$$\text{diam} [z^{(i)}] \leq \text{diam} [y] - 1 \text{ ulp},$$

wobei 1 ulp (= unit in the last place, siehe [12]) den Abstand von $\min_{y \in [y]} |y|$ zur nächstgrößeren Gleitkommazahl bezeichne.

5.2.6 Beispiele

Zum Vergleich des Algorithmus aus Abschnitt 5.2.5 mit dem Programm von Ratz [38] untersuchen wir die folgenden Funktionen:

$$\begin{aligned}
 f_1(x) &= (x + \sin x) \cdot \exp(-x^2) \\
 f_2(x) &= -\sum_{k=1}^{10} k \cdot \sin((k+1)x + k) \\
 f_3(x) &= 5 - \sum_{k=1}^{10} k \cdot |\cos((k+1)x + k)| \\
 f_4(x) &= \min\left(\left|\cos\left(\frac{x}{2}\pi\right)\right| - 3\sin\left(\frac{x}{10}\pi\right), 50 \cdot |x-1| - 3\right) \\
 f_5(x) &= |x-1| \cdot (1 + 10 \cdot |\sin(x+1)|) + 1 \\
 f_6(x) &= x^4 - 10x^3 + 35x^2 - 50x + 24 \\
 f_7(x) &= 24x^4 - 142x^3 + 303x^2 - 276x + 93 \\
 f_8(x) &= \min(f_6(x), f_7(x)) \\
 f_9(x) &= \min(|f_6(x)|, |f_7(x)|) \\
 f_{10}(x) &= -4x^5 - 35x^3 + 150x^2 - 66x - 20\exp(-x) + 4\sin x + 44 \\
 f_{11}(x) &= \text{ite}(x, f_{10}(x), f_8(x)) \\
 f_{12}(x) &= \sum_{k=1}^{100} \exp\left(k \cdot \min\left(-\frac{x^2}{|x|+2} + k|x|, \sin^2 x\right)\right) / (x^2 + 1) \\
 f_{13}(x) &= \sum_{k=1}^{100} \left| \exp\left(\min\left(\min\left(-\frac{x^2}{|x|+2} + k|x|, \sin^2 x\right), \right.\right.\right. \\
 &\quad \left.\left.\left. x^5 - 40(\exp(-|x|))^2 + \frac{1}{2}x^2\right)\right)\right| \cdot \frac{\sin x}{x^2 + 1} \\
 f_{14}(x) &= \sum_{k=1}^5 \left(k \cdot |\cos((k+1)x + k)| + 5\right)
 \end{aligned}$$

Von diesen Funktionen werden jeweils Einschließungen des globalen Minimums sowie der Minimalstellen auf dem Intervall $[x] = [-10, 10]$ gesucht. Die vorgegebene Genauigkeit sei dabei jeweils $\epsilon = 10^{-10}$. In den folgenden beiden Tabellen sind die Anzahl der Steigungstupelberechnungen erster bzw. zweiter Ordnung, die maximale Listenlänge der Arbeitsliste \mathcal{L} sowie die Laufzeit in Sekunden auf dem Rechner gegenübergestellt. Die Berechnungen wurden mit Hilfe von Pascal-XSC-Programmen auf einem Rechner mit 2 Athlon MP 1800+ Prozessoren, 1 GB Hauptspeicher und dem Betriebssystem Suse 9.3 durchgeführt. Programmcodes liegen der Arbeit bei bzw. sind im Internet unter <http://iamlasun8.mathematik.uni-karlsruhe.de/~ae26/software/> erhältlich.

Ratz				neuer Algorithmus (Kap. 5.2.5)			
Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit	Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit
f1	55	4	0,003	f1	19	3	0,003
f2	242	32	0,040	f2	125	23	0,043
f3	427	42	0,099	f3	195	31	0,097
f4	28	3	0,003	f4	22	3	0,005
f5	25	3	0,001	f5	18	3	0,003
f6	369	18	0,044	f6	40	3	0,011
f7	295	14	0,037	f7	30	4	0,008
f8	516	35	0,108	f8	94	8	0,041
f9	386	47	0,085	f9	154	23	0,076
f10	9	2	0,001	f10	7	2	0,002
f11	528	35	0,171	f11	99	8	0,067
f12	105	7	0,753	f12	47	7	0,670
f13	65	4	0,997	f13	27	3	0,825
f14	225	31	0,032	f14	151	24	0,051

Man erkennt, dass mit dem neuen Algorithmus die Anzahl der Steigungstupelberechnungen deutlich geringer ist. Die Berechnung eines einzelnen Steigungstupels ist dafür allerdings aufwändiger als im Algorithmus von Ratz, da im Algorithmus von Ratz jeweils Steigungstupel erster Ordnung betrachtet werden, im neuen Algorithmus hingegen Steigungstupel zweiter Ordnung. Dadurch kann schließlich die Gesamtlaufzeit mit dem neuen Algorithmus höher sein als mit dem Algorithmus von Ratz (z. B. für f_2 , f_4 , f_5 und f_{14}), sie kann aber auch deutlich geringer sein.

5.3 Anwendung auf Funktionen mehrerer Variablen

Für Funktionen mehrerer Variablen haben wir eine automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung in Abschnitt 4.1 eingeführt und ferner eine komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung in Abschnitt 4.2 beschrieben. Wie in [38, Kap. 6.1] diskutiert wäre die Verwendung eines Steigungstupels (4.1) aus Abschnitt 4.1 zur Durchführung eines "Pruning"-Schritts problematisch. Denn dabei wäre die Bestimmung einer Teilmenge des betrachteten Intervalls $[x] \subseteq \mathbb{R}^n$, die keine globale Minimalstelle enthält, sehr aufwändig und im Allgemeinen kein Intervallvektor.

Analog zu [38] benutzen wir daher die komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung zur Durchführung eines "Pruning"-Schritts. Damit können wir den "Pruning"-Schritt auf die in den Abschnitten 5.2.3 und 5.2.4 betrachteten Fälle zurückführen und den in Abschnitt 5.2.5 beschriebenen Algorithmus auf Funktionen mehrerer Variablen übertragen. Insofern ist die komponentenweise Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung hervorragend für die globale Optimierung geeignet.

5.3.1 Zurückführung auf Funktionen einer Variablen

Gegeben sei die stetige Funktion $u : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, und $i \in \{1, \dots, n\}$ sowie $(x_0)_i \in [x]_i$ seien fest. Ferner sei \mathcal{G}_i wie in (4.5) definiert. Mit dem Vorgehen aus Abschnitt 4.2 kann ein Steigungstupel $\mathcal{U} = (U_x, U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U)$ zweiter Ordnung von u auf $[x]$ bezüglich der Komponente i berechnet werden. Insbesondere gilt dann

$$g((x_0)_i) \in U_{x_0},$$

$$g(x_i) - g((x_0)_i) \in \delta U \cdot (x_i - (x_0)_i)$$

und

$$g(x_i) - g((x_0)_i) \in \delta U_{x_0} \cdot (x_i - (x_0)_i) + \delta_2 U \cdot (x_i - (x_0)_i)^2$$

für alle $x_i \in [x]_i$ und alle $g \in \mathcal{G}_i$. Daraus folgt für alle $x = (x_1, \dots, x_n) \in [x]$

$$\begin{aligned} u(x_1, \dots, x_n) &\in g((x_0)_i) + \delta U \cdot (x_i - (x_0)_i) \\ &\subseteq U_{x_0} + \delta U \cdot (x_i - (x_0)_i) \end{aligned} \quad (5.48)$$

sowie

$$u(x_1, \dots, x_n) \in U_{x_0} + \delta U_{x_0} \cdot (x_i - (x_0)_i) + \delta_2 U \cdot (x_i - (x_0)_i)^2, \quad (5.49)$$

wobei $U_{x_0}, \delta U_{x_0}, \delta U, \delta_2 U \in \mathbb{IR}$ sind.

Mit (5.48) und (5.49) können folglich im Algorithmus zur globalen Optimierung die "Pruning"-Schritte aus den Abschnitten 5.2.3 und 5.2.4 angewendet werden. Diese bewirken, dass der Intervallvektor $[x]$ in der i -ten Komponente verkleinert bzw. geteilt wird.

5.3.2 Algorithmus

Wir übertragen den Algorithmus aus Abschnitt 5.2.5 auf eine Funktion $f : [x] \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mehrerer Variablen.

Wie zuvor verwenden wir eine Arbeitsliste \mathcal{L} und eine Ergebnisliste \mathcal{Q} . Die Elemente der Liste \mathcal{L} sind Paare der Form $([y], \underline{fy})$ mit einem Intervallvektor $[y] = ([y]_1, \dots, [y]_n)^T \in \mathbb{IR}^n$ und einer reellen Zahl \underline{fy} mit

$$\underline{fy} \leq \min_{y \in [y]} f(y).$$

Die reelle Zahl \tilde{f} ist zu jedem Zeitpunkt des Algorithmus eine obere Schranke des globalen Minimums von f auf $[x]$.

Zur Initialisierung des Algorithmus wird eine Einschließung $f_{[x]}$ des Wertebereichs von f auf $[x]$ berechnet und das Paar $([x], \inf f_{[x]})$ als erstes Listenelement von \mathcal{L} verwendet. \mathcal{Q} wird als leere Liste initialisiert. Außerdem setzen wir $\tilde{f} := \sup f_{[x]}$.

Führe die folgenden Schritte durch, solange die Arbeitsliste \mathcal{L} nicht leer ist:

1. Verwende das momentan erste Element $([y], \underline{fy})$ der Arbeitsliste \mathcal{L} und streiche es aus der Liste heraus. Setze $m := 1$.
2. Berechne einen Vektor $t = (t_1, \dots, t_n)$ mit $t_i \in \{1, \dots, n\}$ und $t_i \neq t_j$ für $i \neq j$ so, dass $\text{diam}[y]_{t_k} \geq \text{diam}[y]_{t_{k+1}}$ für $k = 1, \dots, n-1$ ist, d. h. wir sortieren nach den Durchmessern der Intervalle in den Komponenten von $[y]$.
3. Führe für $k = 1$ (1) n die Schritte 4 bis 5 durch.
4. Setze $c = \text{mid}[y]_k$ und berechne mit Hilfe der komponentenweisen Berechnung von Steigungstupeln ein Steigungstupel

$$\mathcal{F}_k = (f_{[y]}, [\underline{fc}, \overline{fc}], [\underline{\delta fc}, \overline{\delta fc}], [\underline{\delta f}, \overline{\delta f}], [\underline{\delta_2 f}, \overline{\delta_2 f}])$$

zweiter Ordnung von f auf dem Intervall $[y]$ bezüglich der Komponente t_k . Berechne damit eine Wertebereichseinschließung $[\underline{fy}, \overline{fy}]$ von f auf $[y]$ und verwende Satz 5.2.22, um die untere Schranke \underline{fy} evtl. noch zu verbessern. Aktualisiere \tilde{f} mit Hilfe von Bemerkung 5.2.11 sowie Satz 5.2.20. Falls $\underline{fy} \geq \tilde{f}$ ist, dann gehe zu Schritt 7, da $[y]$ keine globale Minimalstelle enthalten kann.

5. Führe für $[y]_{t_k}$ wie im Algorithmus aus Abschnitt 5.2.5 einen "Pruning"-Schritt erster und zweiter Ordnung durch.
 - a) Entstehen dadurch nur leere Schnittintervalle $[z^{(i)}]$, so setze $m := m - 1$ und gehe zu Schritt 7.
 - b) Entsteht genau ein Schnittintervall, das wir mit $[z^{(1)}]$ bezeichnen, so setze $[y]_{t_k} := [z^{(1)}]$.
 - c) Entstehen zwei Schnittintervalle $[z^{(1)}]$ und $[z^{(2)}]$, so setze zunächst $[y^{(m)}] := [y]$, die t_k -te Komponente $[y^{(m)}]_{t_k} := [z^{(2)}]$ sowie $m := m + 1$. Setze anschließend $[y]_{t_k} := [z^{(1)}]$.
6. Setze $[y^{(m)}] := [y]$.
7. Da in Schritt 5 jeweils höchstens ein neuer Intervallvektor $[y^{(i)}]$ entstehen kann, erhält man aus den Schritten 3-6 insgesamt m Intervallvektoren $[y^{(i)}]$, wobei m zwischen 0 und $n + 1$ liegt. Durch die Eigenschaften der "Pruning"-Schritte muss jede globale Minimalstelle $x^* \in [y]$ in einem der Intervallvektoren $[y^{(i)}]$, $i = 1, \dots, m$, enthalten sein. Führe für alle $[y^{(i)}]$, $i = 1, \dots, m$, jeweils die Schritte 8-10 durch.
8. Setze $c = \text{mid}[y^{(i)}]$ und berechne mit Hilfe von Bemerkung 4.2.5, d. h. durch den Schnitt von (4.9)-(4.11), eine Einschließung $[\underline{fy^{(i)}}, \overline{fy^{(i)}}]$ des Wertebereichs von f auf $[y^{(i)}]$. Bilde das Paar $([y^{(i)}], \underline{fy^{(i)}})$.
9. Verwende die bei der Berechnung in 8. gewonnene Einschließung $[\underline{fc}, \overline{fc}]$ von $f(c)$, um \tilde{f} evtl. zu verbessern.

10. Falls $\tilde{f} < \underline{fy}^{(i)}$ ist, dann lösche das Paar $([y^{(i)}], \underline{fy}^{(i)})$. Falls

$$\max_{j=1,\dots,n} \text{diam}_{\text{rel}} [y^{(i)}]_j \leq \epsilon$$

oder falls $\text{diam}_{\text{rel}} [\underline{fy}^{(i)}, \overline{fy}^{(i)}] \leq \epsilon$ ist, so füge das Paar $([y^{(i)}], \underline{fy}^{(i)})$ in die Ergebnisliste \mathcal{Q} ein, andernfalls in \mathcal{L} .

11. Streiche alle Paare $([y], \underline{fy})$ mit $\underline{fy} > \tilde{f}$ aus \mathcal{L} , da sie keine Minimalstellen von f enthalten können.

5.3.3 Beispiele

Wir vergleichen nun den Algorithmus aus Abschnitt 5.3.2 mit dem Programm von Ratz [38]. Dazu untersuchen wir die folgenden Beispielfunktionen auf $[x] \subseteq \mathbb{R}^n$ mit der jeweils angegebenen relativen Genauigkeit ϵ . Die Beispiele gehen größtenteils auf [28], [38], [44], [49] und [52] zurück.

1. Die Funktion von Beale: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-4.5, 4.5]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = (1.5 - x_1 + x_1x_2)^2 + (2.25 - x_1 + x_1x_2^2)^2 + (2.625 - x_1 + x_1x_2^3)^2.$$

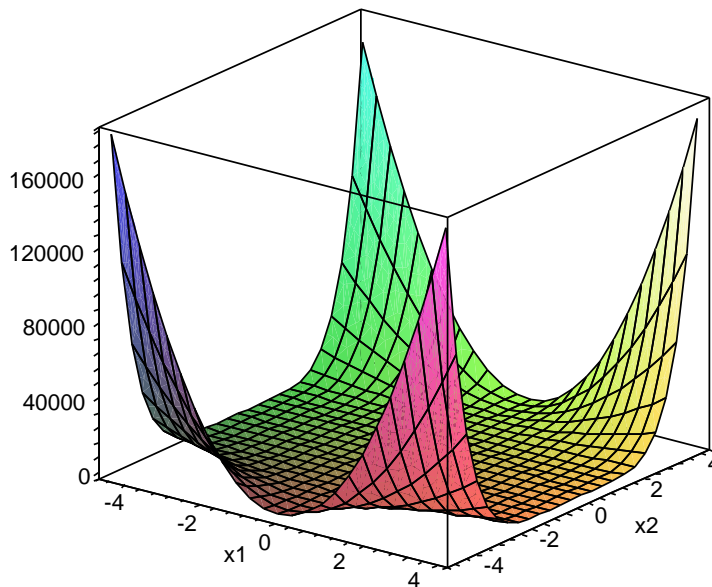


Abbildung 5.13: Die Funktion von Beale

2. Die Funktion von Branin : $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = ([-5, 10], [0, 15])^T$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \left(\frac{5}{\pi}x_1 - \frac{5.1}{4\pi^2}x_1^2 + x_2 - 6 \right)^2 + 10 \left(1 - \frac{1}{8\pi} \right) \cos x_1 + 10.$$

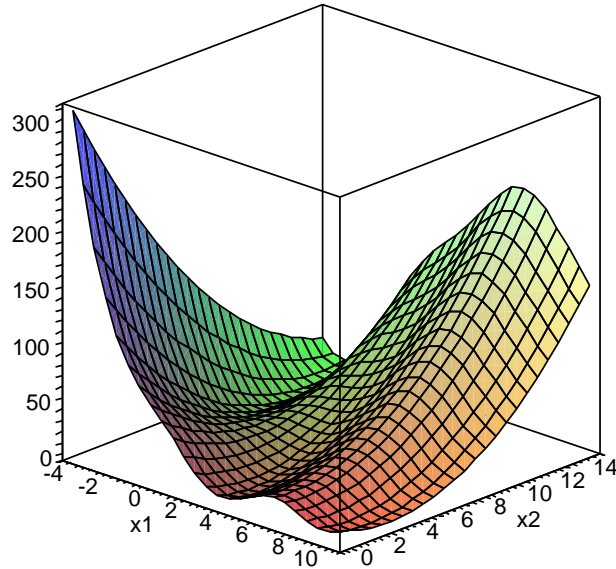


Abbildung 5.14: Die Funktion von Branin

3. Die Funktion von Rosenbrock: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2.$$

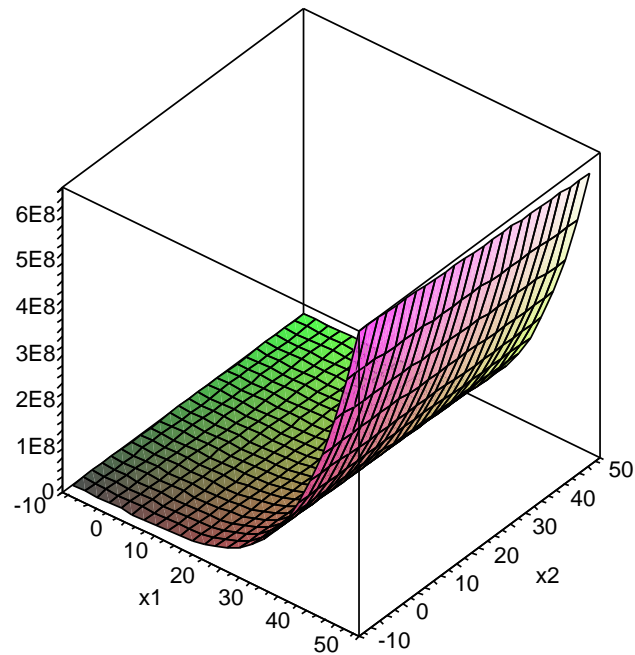


Abbildung 5.15: Die Funktion von Rosenbrock

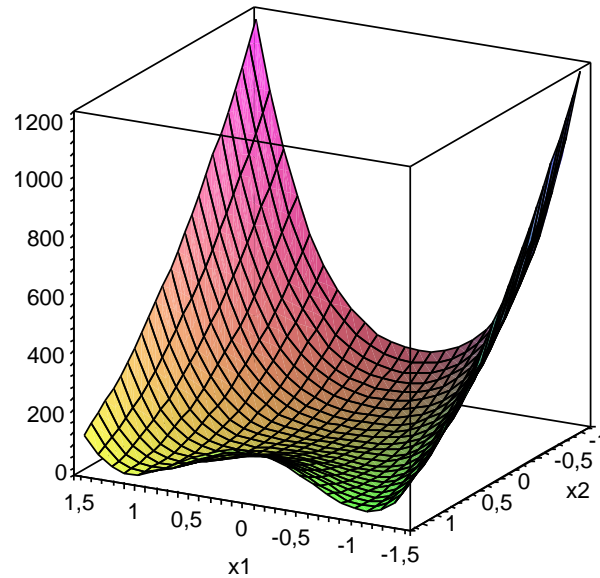


Abbildung 5.16: Die Funktion von Rosenbrock

4. Die verallgem. Funktion von Rosenbrock, Dim. 5: $f : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-5.12, 5.12]^5$, $\epsilon = 10^{-10}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^4 \left(100 (x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right).$$

5. Die Funktion G5 von Griewank: $f : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-50, 60]^5$, $\epsilon = 10^{-3}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 \frac{x_i^2}{400} - \prod_{i=1}^5 \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1.$$

6. Die Funktion G7 von Griewank: $f : \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-50, 60]^7$, $\epsilon = 10^{-3}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^7 \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^7 \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1.$$

7. Die Funktion L3 von Levy: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 i \cos((i-1)x_1 + i) \cdot \sum_{j=1}^5 j \cos((j+1)x_2 + j).$$

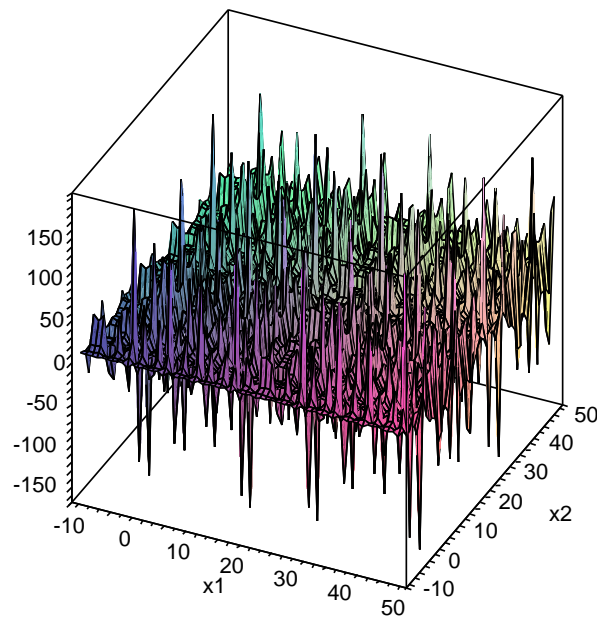


Abbildung 5.17: Die Funktion L3 von Levy

8. Die Funktion L5 von Levy: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 i \cos((i-1)x_1 + i) \cdot \sum_{j=1}^5 j \cos((j+1)x_2 + j) + (x_1 + 1.42513)^2 + (x_2 + 0.80032)^2.$$

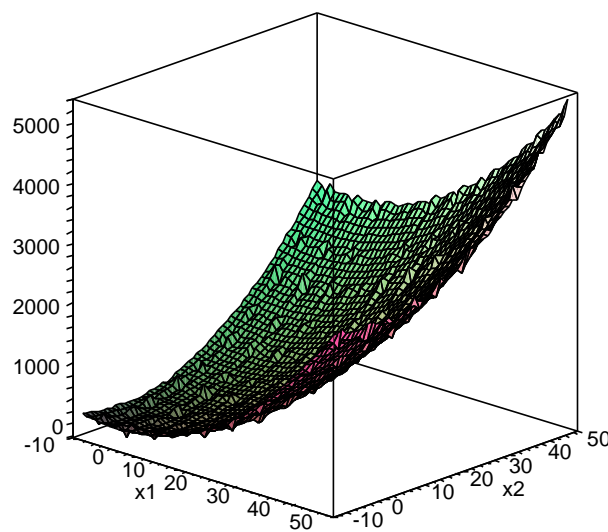


Abbildung 5.18: Die Funktion L5 von Levy

9. Eine Variante der Funktion L5 von Levy: $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^3$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 i \cos((i-1)x_1 + i) \cdot \sum_{j=1}^5 j \cos((j+1)x_2 + j) \\ + (x_1 + 1.42513)^2 + (x_2 + 0.80032)^2 + (x_3 - 1)^2.$$

10. Die Funktion L8 von Levy: $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^3$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \left. \begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n-1} (y_i - 1)^2 (1 + 10 \sin^2(\pi y_{i+1})) + \sin^2(\pi y_1) + (y_n - 1)^2 \\ & \text{mit } n = 3 \text{ und } y_i = 1 + (x_i - 1)/4, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \right\} \quad (5.50)$$

11. Die Funktion L9 von Levy: $f : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^4$, $\epsilon = 10^{-12}$ sowie (5.50) mit $n = 4$.

12. Die Funktion L10 von Levy: $f : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^5$, $\epsilon = 10^{-12}$ sowie (5.50) mit $n = 5$.

13. Die Funktion L11 von Levy: $f : \mathbb{R}^8 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^8$, $\epsilon = 10^{-8}$ sowie (5.50) mit $n = 8$.

14. Die Funktion L12 von Levy: $f : \mathbb{R}^{10} \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^{10}$, $\epsilon = 10^{-8}$ sowie (5.50) mit $n = 10$.

15. Die Funktion L13 von Levy: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \left. \begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - 1)^2 (1 + \sin^2(3\pi x_{i+1})) \\ & + (x_n - 1)^2 (1 + \sin^2(2\pi x_n)) + \sin^2(3\pi x_1) \end{aligned} \right\} \quad (5.51)$$

mit $n = 2$.

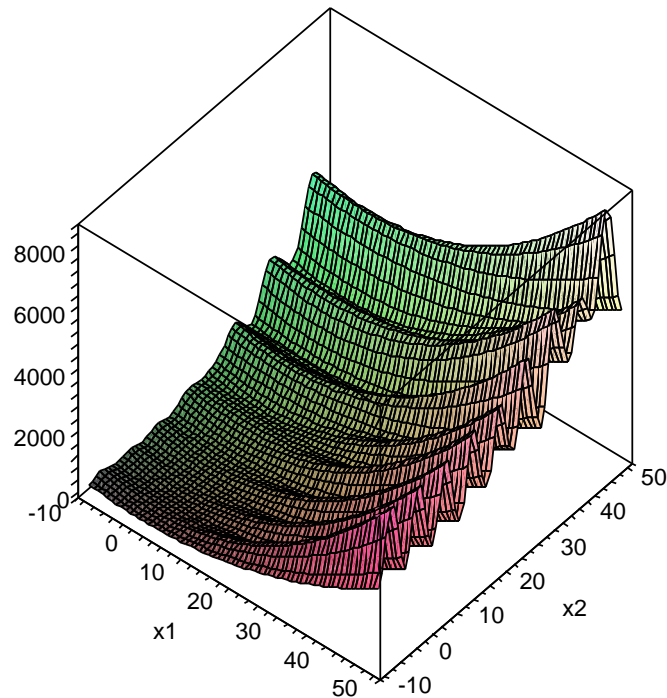


Abbildung 5.19: Die Funktion L13 von Levy

16. Die Funktion L14 von Levy: $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^3$, $\epsilon = 10^{-12}$ sowie (5.51) mit $n = 3$.
17. Die Funktion L15 von Levy: $f : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^4$, $\epsilon = 10^{-12}$ sowie (5.51) mit $n = 4$.
18. Die Funktion L16 von Levy: $f : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^5$, $\epsilon = 10^{-12}$ sowie (5.51) mit $n = 5$.
19. Die Funktion L18 von Levy: $f : \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^7$, $\epsilon = 10^{-8}$ sowie (5.51) mit $n = 7$.
20. Die Funktion von Goldstein und Price: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \left(1 + (x_1 + x_2 + 1)^2 (19 - 14x_1 + 3x_1^2 - 14x_2 + 6x_1x_2 + 3x_2^2) \right) \cdot \left(30 + (2x_1 - 3x_2)^2 (18 - 32x_1 + 12x_1^2 + 48x_2 - 36x_1x_2 + 27x_2^2) \right).$$

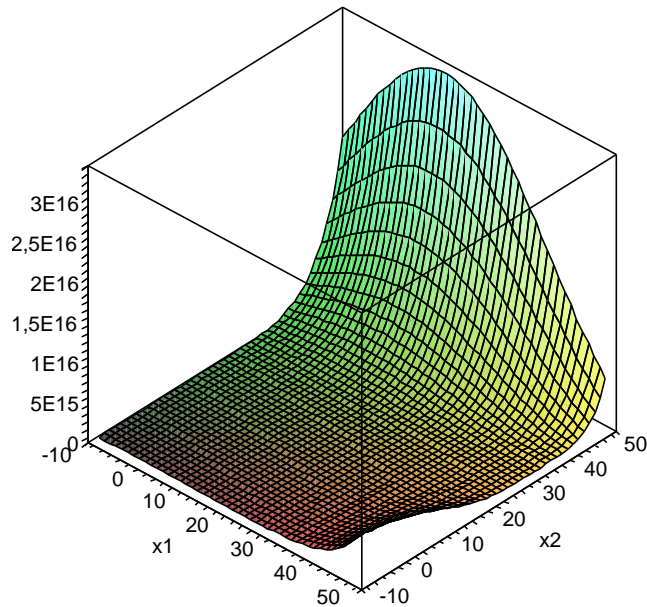


Abbildung 5.20: Die Funktion von Goldstein und Price

21. Die "Six-Hump Camel-Back" - Funktion: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = 4x_1^2 - 2.1x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4.$$

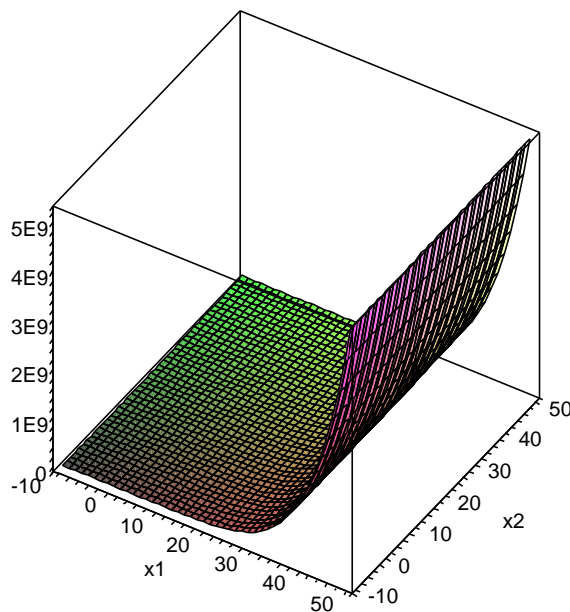


Abbildung 5.21: Die "Six-Hump Camel-Back" - Funktion

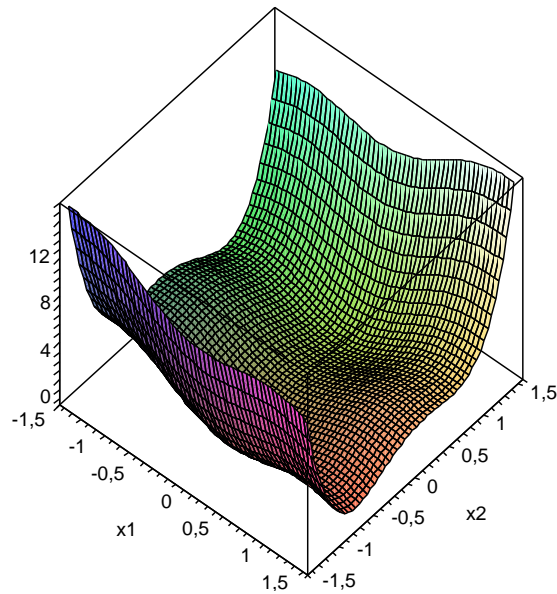


Abbildung 5.22: Die "Six-Hump Camel-Back" - Funktion

22. Die Funktion SC32 von Schwefel: $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-1.89, 1.89]^3$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=2}^3 \left((x_1 - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right).$$

23. Die Funktion R4 von Ratz: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-3, 3]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sin(x_1^2 + 2x_2^2) \cdot \exp(-x_1^2 - x_2^2).$$

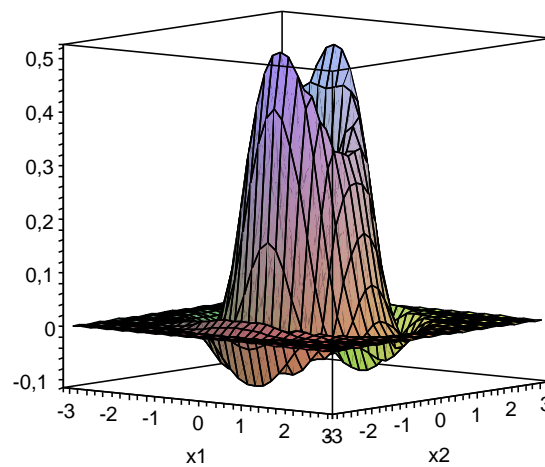


Abbildung 5.23: Die Funktion R4 von Ratz

24. Eine Variante der Testfunktion von Shubert aus [38], Kap. 5.7.1: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,
 $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 i \sin((i+1)x_1 + i) \cos x_2.$$

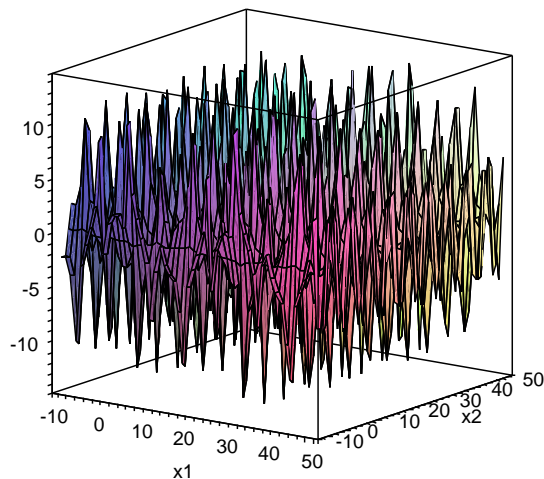


Abbildung 5.24: Die Funktion aus Beispiel 24.

25. Beispiel 6.18 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = |y_1 - 1| (1 + 10 |\sin(\pi y_2)|) + |\sin(\pi y_1)| + |y_2 - 1|$$

mit $y_i = 1 + (x_i - 1)/4$, $i = 1, 2$.

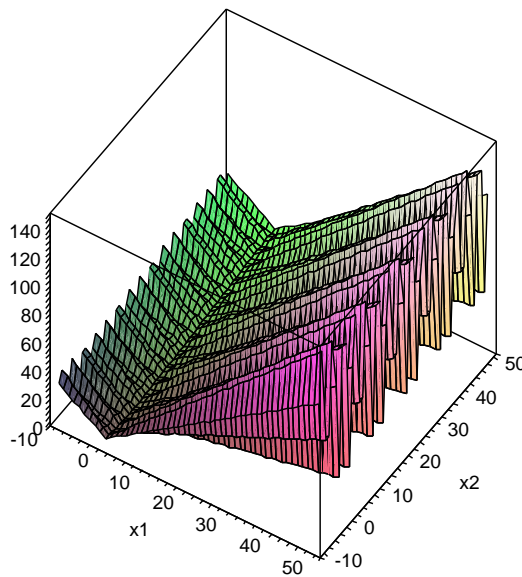


Abbildung 5.25: Beispiel 6.18 aus [38]

26. Beispiel 6.19 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = ([-100, 100], [0.02, 100])^T$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = 10 |x_1 - 1| \left| \sin\left(\frac{1}{x_2}\right) \right| + (x_2 + 2) \cdot |x_1 - 1 + 2x_2|.$$

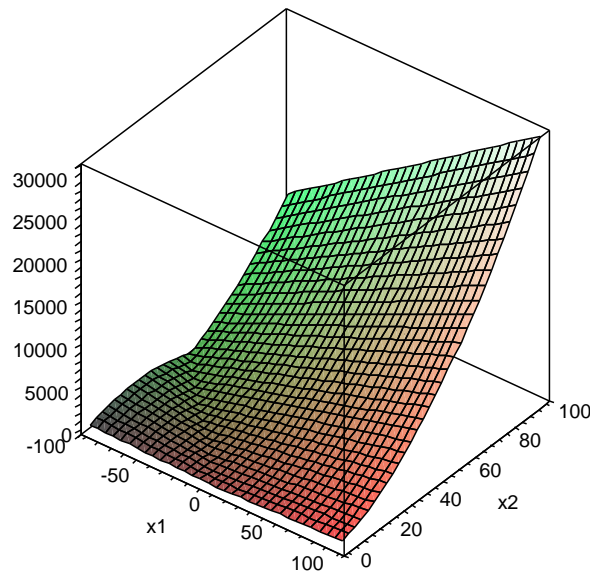


Abbildung 5.26: Beispiel 6.19 aus [38]

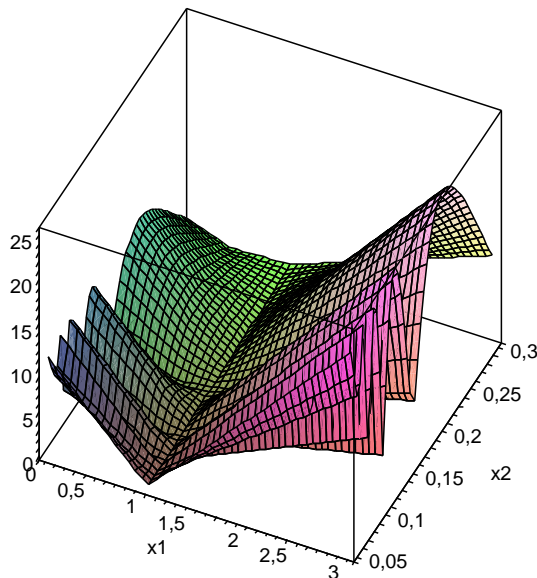


Abbildung 5.27: Beispiel 6.19 aus [38]

27. Beispiel 6.20 aus [38]: $f : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-4, 4]^4$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = |x_1 + 10x_2| + 5|x_3 - x_4| + |x_2 - 2x_3| + 10|x_1 - x_4|.$$

28. Beispiel 6.21 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = |x_1 - 1| + |x_2 - 1| + |\cos(18x_1 - 18)| + |\cos(18x_2 - 18)| + 1.$$

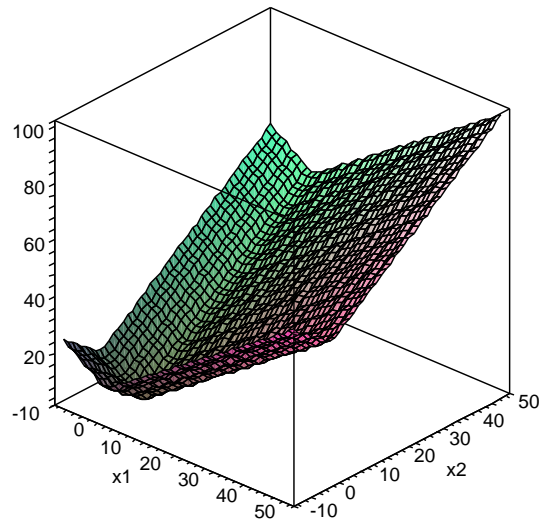


Abbildung 5.28: Beispiel 6.21 aus [38]

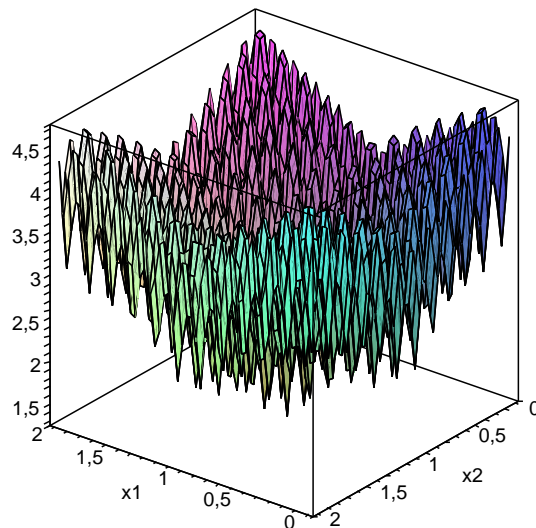


Abbildung 5.29: Beispiel 6.21 aus [38]

29. Beispiel 6.22 aus [38]: $f : \mathbb{R}^9 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^9$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^8 |x_i - 1| (1 + |\sin(3\pi x_{i+1})|) + |x_9 - 1| (1 + |\sin(2\pi x_9)|) + |\sin(3\pi x_1)| + 1.$$

30. Beispiel 6.23 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-100, 100]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \frac{|x_1| + |x_2 - 2|}{200} + \left| \cos(x_1) \cos\left(\frac{x_2 - 2}{\sqrt{2}}\right) \right| + 2.$$

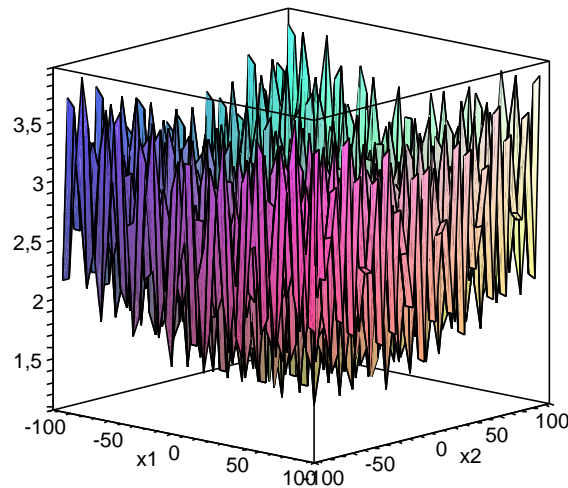


Abbildung 5.30: Beispiel 6.23 aus [38]

31. Beispiel 6.24 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [0, 1]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = -\min \left\{ |6x_1x_2(x_1 - 1)(x_2 - 1)|, |2x_1 \sin(2\pi x_1)|, |2 \sin(\pi x_1) \sin(4\pi x_2)| \right\} - 1.$$

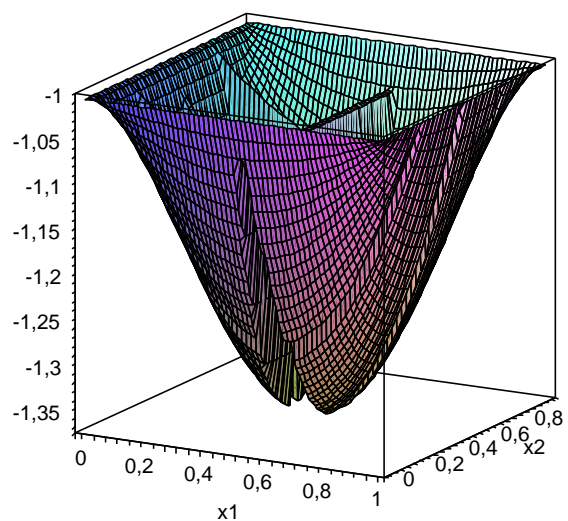


Abbildung 5.31: Beispiel 6.24 aus [38]

32. Beispiel 6.25 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 50]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = -\min \left\{ \left| 3 \sin \left(\pi \left(\frac{x_1 - x_2^2}{4} - 2 \right) \right) \right|, \left| \sin \left(\pi \left(\frac{x_2}{4} + 0.5 \right) \right) \right|, \right. \\ \left| \sin \left(5\pi \left(\frac{x_2 - x_1^2}{4} - 1.5 \right) \right) \right|, \left| \cos \left(\pi \left(1 - \frac{x_1}{4} \right) \right) \right|, \\ \left. \left| \cos \left(\frac{5\pi x_1 x_2}{4} \right) \right| - \left| \frac{x_1}{4} \right| - \left| \frac{x_2}{4} \right| \right\} - 1.$$

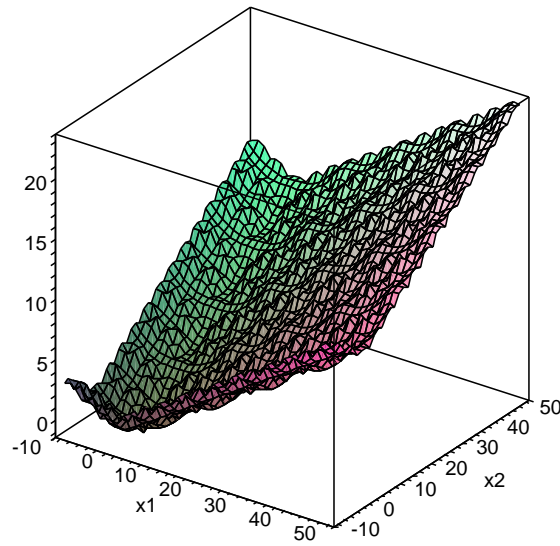


Abbildung 5.32: Beispiel 6.25 aus [38]

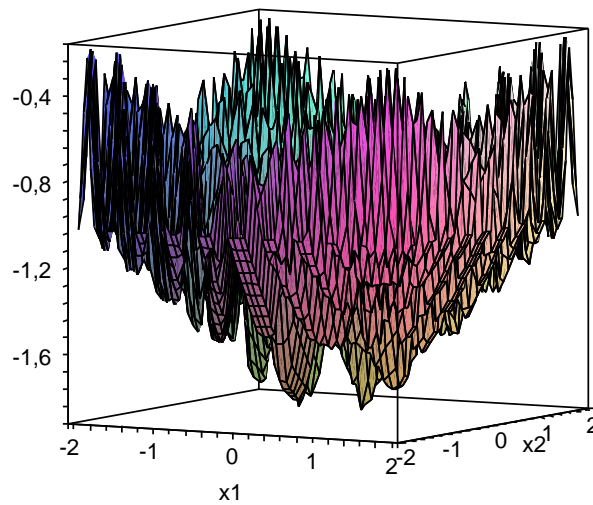


Abbildung 5.33: Beispiel 6.25 aus [38]

33. Beispiel 6.26 aus [38]: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [0, 10]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \min \left\{ |\cos(2x_1)| + |\cos(2x_2)| - 3 \sin\left(\frac{\pi x_1}{10}\right) - 2 \sin\left(\frac{\pi x_2}{10}\right), \right. \\ \left. 50|x_1 - 1| + 50|x_2 - 1| - 5 \right\}.$$

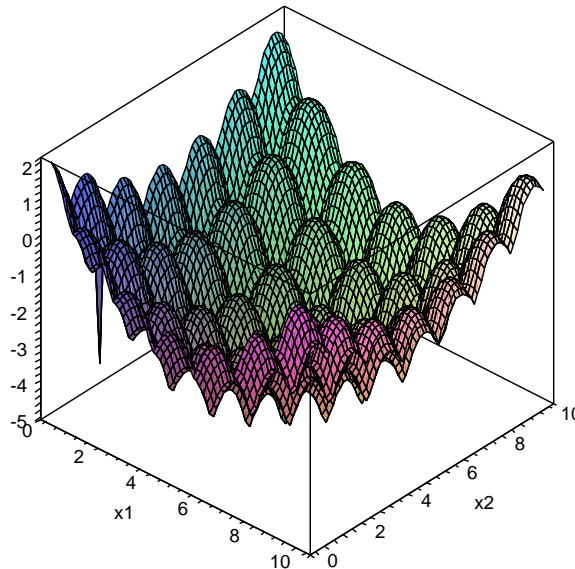


Abbildung 5.34: Beispiel 6.26 aus [38]

34. Die Funktion von Henriksen, Madsen, Dim2: $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 10]^2$, $\epsilon = 10^{-6}$,

$$f(x) = - \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^5 j \sin((j+1)x_i + j).$$

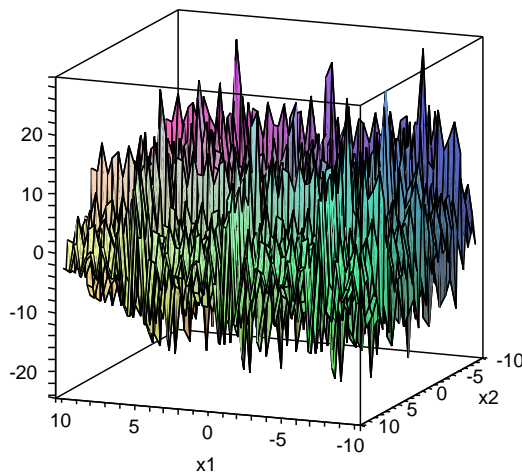


Abbildung 5.35: Die Funktion von Henriksen, Madsen, Dim2

35. Die Funktion von Henriksen, Madsen, Dim3: $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-10, 10]^3$, $\epsilon = 10^{-6}$,

$$f(x) = - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^5 j \sin((j+1)x_i + j).$$

36. Die Funktion aus dem SIAM 10x10-Digit-Challenge (siehe [5], Seite 93):
 $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-1, 1]^2$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \exp(\sin(50x_1)) + \sin(60 \exp x_2) + \sin(70 \sin x_1) \\ + \sin(\sin(80x_2)) - \sin(10(x_1 + x_2)) + (x_1^2 + x_2^2)/4.$$

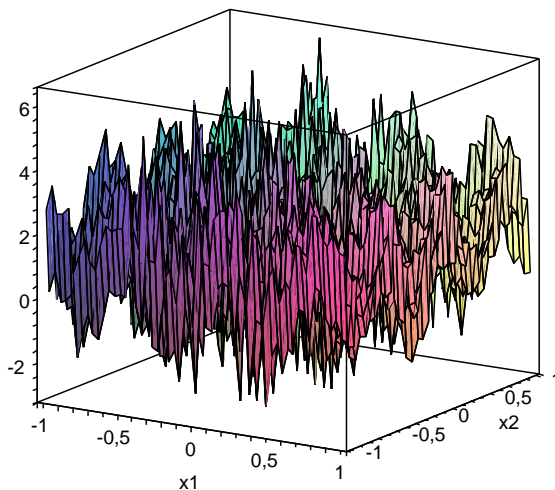


Abbildung 5.36: Die Funktion aus dem SIAM 10x10-Digit Challenge

37. Variation von Beispiel 36 (siehe [5], Seite 121): $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $[x] = [-1, 1]^3$, $\epsilon = 10^{-12}$,

$$f(x) = \exp(\sin(50x_1)) + \sin(60 \exp x_2) \sin(60x_3) + \sin(70 \sin x_1) \cos(10x_3) \\ + \sin(\sin(80x_2)) - \sin(10(x_1 + x_3)) + (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)/4.$$

In den folgenden beiden Tabellen sind die Anzahl der Steigungstupelberechnungen erster bzw. zweiter Ordnung, die maximale Listenlänge der Arbeitsliste \mathcal{L} sowie die Laufzeit auf dem Rechner in Minuten und Sekunden gegenübergestellt. Die Berechnungen wurden mit Hilfe von Pascal-XSC-Programmen auf einem Rechner mit 2 Athlon MP 1800+ Prozessoren und 1 GB Hauptspeicher unter dem Betriebssystem Suse 9.3 durchgeführt. Programmcodes liegen der Arbeit bei bzw. sind im Internet unter <http://iamlasun8.mathematik.uni-karlsruhe.de/~ae26/software/> erhältlich.

Ratz				neuer Algorithmus (Kap. 5.2.5)			
Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit	Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit
f1	2278	39	0:00,296	f1	1640	28	0:00,386
f2	2108	27	0:00,179	f2	1000	18	0:00,153
f3	925	19	0:00,058	f3	876	28	0:00,108
f4	14057	177	0:02,334	f4	20870	350	0:06,036
f5	1822	57	0:00,275	f5	1972	57	0:00,480
f6	4990	156	0:00,962	f6	12615	160	0:04,115
f7	135851	1557	0:57,389	f7	84183	797	0:32,647
f8	1748	49	0:00,339	f8	1276	50	0:00,402
f9	12437	105	0:02,540	f9	7588	99	0:02,365
f10	830	9	0:00,183	f10	1044	16	0:00,361
f11	1088	13	0:00,278	f11	1102	13	0:00,409
f12	5985	56	0:02,310	f12	2342	29	0:01,073
f13	10450	60	0:05,335	f13	5972	52	0:03,775
f14	433181	1047	8:29,590	f14	19226	87	0:16,105
f15	314	10	0:00,031	f15	252	8	0:00,050
f16	726	18	0:00,088	f16	788	13	0:00,183
f17	1824	28	0:00,275	f17	1066	21	0:00,268
f18	2804	39	0:00,482	f18	2008	30	0:00,581
f19	5764	66	0:01,239	f19	5284	56	0:01,815
f20	367455	11437	8:45,928	f20	348989	11083	8:40,859
f21	3002	54	0:00,539	f21	1593	19	0:00,553
f22	11808	271	0:01,394	f22	1204	15	0:00,196
f23	4116	75	0:00,315	f23	1778	37	0:00,305
f24	88398	1072	0:27,096	f24	36081	556	0:11,448
f25	306	6	0:00,040	f25	202	4	0:00,048
f26	2948	81	0:00,286	f26	2304	58	0:00,425
f27	5935	20	0:00,351	f27	6610	21	0:00,702
f28	761	19	0:00,069	f28	484	11	0:00,092
f29	25337	137	0:08,348	f29	3997	134	0:01,574
f30	428	26	0:00,039	f30	340	20	0:00,061
f31	11131	119	0:01,397	f31	11516	128	0:02,489
f32	670	13	0:00,139	f32	700	11	0:00,233
f33	436	15	0:00,057	f33	348	12	0:00,079
f34	8761	240	0:01,692	f34	5450	212	0:01,565
f35	238268	6559	3:04,000	f35	115487	3766	1:12,374
f36	2524	71	0:00,288	f36	1894	60	0:00,450
f37	24595	537	0:03,654	f37	17481	445	0:04,670

Die Ergebnisse zeigen, dass der neue Algorithmus meist weniger Berechnungen von Steigungstupeln benötigt und außerdem die maximale Listenlänge meist geringer als im Algorithmus von Ratz ist. Da im neuen Algorithmus Steigungstupel zweiter Ordnung berechnet werden, im Algorithmus von Ratz hingegen Steigungstupel erster Ordnung, ist die Berechnung eines Steigungstupels im neuen Algorithmus aufwändiger, so dass sich hinsichtlich der Laufzeiten ein gemischtes Bild ergibt. In einigen Beispielen wird der neue Algorithmus auf dem Rechner langsamer durchgeführt, in manchen Beispielen aber auch deutlich schneller.

Bei einigen Beispielen, z. B. bei $f4$, $f6$ und $f14$, treten große Unterschiede in den Laufzeiten auf. Diese werden dadurch verursacht, dass in diesen Beispielen das globale Minimum $f^* = 0$ ist. Daher müssen die Intervallvektoren aus der Liste unter Umständen sehr oft unterteilt werden, bis die vorgegebene relative Genauigkeit erfüllt ist. So können im ungünstigen Fall in der Nähe des globalen Minimums Intervallvektoren entstehen, die erst nach vielen Unterteilungen aus der Liste gestrichen werden können, so dass die Laufzeit stark ansteigt. In günstigeren Fällen kann im Algorithmus ein Intervallvektor $[y]$ entstehen, für dessen Mittelpunkt x_0 der Funktionswert $f(x_0)$ sehr nahe am globalen Minimum liegt, so dass viele Intervallvektoren mit Hilfe des Wertebereichstests aus der Liste gelöscht werden können.

Die auftretenden Effekte hängen stark davon ab, wie der Start-Intervallvektor $[x]$ gewählt wird. Wir untersuchen daher die Funktion $f4$, d. h. die verallgem. Funktion von Rosenbrock, $f: \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$, mit

$$f(x) = \sum_{i=1}^4 \left(100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right),$$

auf unterschiedlichen Start-Intervallvektoren, und zwar

1. $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^5$, $[x]_i = [-5.12, 5.12]$, $i = 1, \dots, 5$,
2. $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^5$, $[x]_i = [-6, 6]$, $i = 1, \dots, 5$,
3. $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^5$, $[x]_i = [-2.5, 2.5]$, $i = 1, \dots, 5$,
4. $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^5$, $[x]_i = [-3, 4]$, $i = 1, \dots, 5$,
5. $[x] \in \mathbb{I}\mathbb{R}^5$, $[x]_i = [-1, 2]$, $i = 1, \dots, 5$,
6. $[x] = \left([-2, 2], [-1.5, 2.5], [-3, 3], [0, 3], [-1, 1.5] \right)^T$,
7. $[x] = \left([-3, 6], [-6, 2], [-4, 3], [-5, 3], [-2, 6] \right)^T$,
8. $[x] = \left([-3, 6], [-6, 2], [-4, 3], [-5, 1], [-2, 6] \right)^T$,
9. $[x] = \left([-1.5, 3.2], [0.12, 1.5], [-2.1, 2.7], [-2, 2], [-1, 5.12] \right)^T$,
10. $[x] = \left([-1.5, 3.2], [0.12, 1.5], [-2.1, 2.7], [-2, 2], [-1.5, 5.12] \right)^T$.

Die vorgegebene Genauigkeit soll jeweils $\epsilon = 10^{-10}$ sein. Die Ergebnisse sind in folgender Tabelle dargestellt.

Ratz				neuer Algorithmus (Kap. 5.2.5)			
Nr.	Steig.	max. LL	Laufzeit	Nr.	Steig.	max. LL	Laufzeit
1	14057	177	0:02,331	1	20870	350	0:06,048
2	15045	144	0:02,479	2	12110	160	0:03,091
3	20603	258	0:03,696	3	16420	206	0:04,446
4	24459	290	0:04,361	4	35879	576	0:11,523
5	21376	412	0:03,896	5	17889	250	0:04,798
6	23761	285	0:03,988	6	24244	196	0:06,396
7	13116	152	0:01,858	7	11025	177	0:02,584
8	22974	351	0:04,097	8	7296	128	0:01,736
9	31433	509	0:05,889	9	74315	1561	0:29,746
10	253419	6869	3:03,800	10	21954	247	0:05,890

Die Tabelle zeigt deutlich, dass die Anzahl der berechneten Steigungstupel bzw. die Laufzeit für die verschiedenen Start-Intervallvektoren völlig unterschiedlich ist.

Im Folgenden betrachten wir die obigen Beispiele $f1$ - $f37$ noch einmal und verhindern dabei die zuvor aufgetretenen Effekte, indem wir in jedem Beispiel den Funktionswert um 1 erhöhen, d. h. wir setzen jeweils $\tilde{f}(x) := f(x) + 1$. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle dargestellt.

In der folgenden Tabelle erkennen wir, dass bei einigen Funktionen, deren globales Minimum zuvor $f^* = 0$ war, durch die Transformation $\tilde{f}(x) := f(x) + 1$ die zuvor aufgetretenen Schwierigkeiten deutlich verringert wurden. In Beispiel $\tilde{f}27$ ist $x^* = (0, 0, 0, 0)$ die globale Minimalstelle, so dass in diesem Beispiel bezüglich der relativen Genauigkeit der Einschließungen von x^* ein ähnlicher Effekt wie zuvor auftritt. Bei den anderen Funktionen ist die Anzahl der Steigungstupelberechnungen sowie die Laufzeit nahezu unverändert zu den obigen Beispielen. Insgesamt benötigt der neue Algorithmus in den meisten Fällen weniger Berechnungen von Steigungstupeln als der Algorithmus von Ratz, und auch die maximale Listenlänge ist meist geringer. Hinsichtlich der Laufzeiten ergibt sich auch hier ein gemischtes Bild. In einigen Beispielen ist die Laufzeit des neuen Algorithmus geringer als die des Algorithmus von Ratz, teilweise sogar sehr deutlich.

Ratz				neuer Algorithmus (Kap. 5.2.5)			
Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit	Bsp.	Steig.	max. LL	Laufzeit
f1	2042	39	0:00,268	f1	1622	28	0:00,390
f2	2004	27	0:00,174	f2	938	18	0:00,145
f3	642	19	0:00,040	f3	668	28	0:00,080
f4	11190	107	0:01,738	f4	11296	137	0:02,774
f5	1907	57	0:00,288	f5	1155	57	0:00,274
f6	6549	156	0:01,263	f6	4047	160	0:01,198
f7	135905	1557	0:59,274	f7	84199	797	0:32,970
f8	1748	49	0:00,342	f8	1276	50	0:00,408
f9	12437	105	0:02,541	f9	7588	99	0:02,394
f10	429	9	0:00,080	f10	381	8	0:00,105
f11	950	13	0:00,230	f11	740	13	0:00,250
f12	1480	21	0:00,426	f12	1087	21	0:00,421
f13	7645	52	0:03,461	f13	4852	52	0:02,837
f14	16932	89	0:09,670	f14	11060	87	0:08,154
f15	224	10	0:00,022	f15	166	8	0:00,031
f16	504	18	0:00,058	f16	416	13	0:00,084
f17	1128	28	0:00,156	f17	938	21	0:00,224
f18	2193	39	0:00,357	f18	1847	30	0:00,509
f19	4030	66	0:00,802	f19	5192	56	0:01,729
f20	367447	11437	8:54,960	f20	348967	11083	8:34,427
f21	3258	54	0:00,604	f21	1771	19	0:00,633
f22	1256	19	0:00,102	f22	838	15	0:00,125
f23	3890	75	0:00,309	f23	1670	37	0:00,291
f24	88598	1072	0:28,135	f24	36309	560	0:11,668
f25	306	6	0:00,040	f25	202	4	0:00,050
f26	2948	81	0:00,296	f26	2304	58	0:00,438
f27	5930	20	0:00,367	f27	55379	2060	0:28,115
f28	763	19	0:00,069	f28	484	11	0:00,092
f29	25337	137	0:08,330	f29	3997	134	0:01,592
f30	428	26	0:00,041	f30	336	20	0:00,061
f31	11131	119	0:01,424	f31	11603	128	0:02,546
f32	700	13	0:00,146	f32	732	11	0:00,249
f33	436	15	0:00,058	f33	348	12	0:00,079
f34	8781	240	0:01,724	f34	5450	212	0:01,594
f35	238616	6559	3:08,290	f35	115592	3766	1:12,450
f36	2548	71	0:00,298	f36	1906	60	0:00,464
f37	24733	537	0:03,760	f37	17535	445	0:04,762

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir die automatische Berechnung von Steigungstupeln beschrieben und diese zur Einschließung von Wertebereichen sowie zur verifizierten globalen Optimierung genutzt. Wir haben in Kapitel 2 gezeigt, wie für eine genügend oft differenzierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die automatische Berechnung von Intervallsteigungen n -ter Ordnung bezüglich der Punkte x_0, \dots, x_{n-1} durchgeführt werden kann, wobei die x_i sowohl gleich als auch unterschiedlich sein dürfen.

Für eine nichtdifferenzierbare stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und ein gegebenes $x_0 \in [x]$ existiert im Allgemeinen keine Intervallsteigung zweiter Ordnung auf $[x]$ bezüglich x_0 . Dennoch haben wir in Kapitel 3 gezeigt, wie wir für eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ durch automatische Berechnung ein Steigungstupel zweiter Ordnung auf $[x]$ bezüglich x_0 erhalten, woraus wir Einschließungen des Wertebereichs von f gewinnen. Dazu muss f durch einen Ausdruck gegeben sein, und die intervallmäßige Auswertung $f([x])$ sowie die "Grenz-Intervallsteigung" $\delta f_{\text{lim}}([x_0])$ müssen existieren. Ist f zweimal stetig differenzierbar, so liefert das berechnete Steigungstupel nach Bemerkung 3.1.9 eine Intervallsteigung zweiter Ordnung von f auf $[x]$ bezüglich x_0 . Die Wertebereichseinschließung (3.40), die wir mit Hilfe von Steigungstupeln zweiter Ordnung erhalten, haben wir in Abschnitt 3.2.3 mit den Wertebereichseinschließungen (3.39), (3.41) und (3.42) verglichen.

Damit verallgemeinern die Methoden aus Kapitel 3 das Vorgehen von Ratz [38] und erweitern die Arbeiten von Shen/Wolfe [46] und Kolev [21]. Insbesondere haben einige Aussagen aus Kapitel 3 auch Einfluss auf die automatische Berechnung von Steigungstupeln erster Ordnung. So haben wir in Abschnitt 3.1.3 für abschnittsweise konvexe bzw. konkave Funktionen wie z. B. $\sinh(x)$ Formeln aus [38] verallgemeinert. Ferner haben wir für stetige Funktionen, die abschnittsweise mit Hilfe einer if-then-else-Vorschrift gegeben sind, eine bisher in der Literatur angegebene Formel korrigiert.

In Abschnitt 4 haben wir beschrieben, wie die Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung auf Funktionen mehrerer Variablen übertragen werden kann. Als Anwendung haben wir in Abschnitt 5 die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung in einem Algorithmus zur verifizierten globalen Optimierung verwendet, und zwar zur Durchführung eines "Pruning"-Schritts zweiter Ordnung. Den neuen Algorithmus haben wir mit dem Algorithmus aus [38] hinsichtlich der Anzahl

der Steigungstupelberechnungen und der Laufzeit auf dem Rechner verglichen.

Die Pascal-XSC-Quellcodes sämtlicher Programme, mit denen die Beispiele aus dieser Arbeit gerechnet wurden, liegen der Arbeit bei bzw. sind im Internet unter <http://iamlasun8.mathematik.uni-karlsruhe.de/~ae26/software/> erhältlich. Einen aktuellen Pascal-XSC-Compiler stellt die Arbeitsgruppe "Wissenschaftliches Rechnen / Softwaretechnologie" der Universität Wuppertal unter <http://www.xsc.de> bereit.

Der vorgestellte Algorithmus kann möglicherweise dadurch verbessert werden, dass in Schritt 2 des Algorithmus aus Abschnitt 5.3.2 andere Kriterien für die Sortierung verwendet werden. Im Fall von differenzierbaren Funktionen und automatischer Differentiation wurden solche Kriterien beispielsweise in [37] zur Auswahl einer Bisektionsrichtung diskutiert. Für die verifizierte globale Optimierung mit Hilfe von Steigungstupeln zweiter Ordnung stehen solche Untersuchungen noch aus. Ferner könnte erforscht werden, ob mit einer anderen Summationsreihenfolge in (4.8) eine bessere Wertebereichseinschließung gewonnen werden kann bzw. nach welchen Kriterien diese Reihenfolge gewählt werden soll. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit liegt darin, im Algorithmus die automatische Berechnung von Steigungstupeln erst für hinreichend kleine Intervallvektoren einzusetzen und bei größeren Intervallvektoren $[y]$ die Wertebereichseinschließung der Funktion f auf $[y]$ mit Hilfe von intervallmäßiger Auswertung zu gewinnen (vgl. [50]).

Gegenstand künftiger Untersuchungen kann ferner sein, wie die automatische Berechnung von Steigungstupeln zweiter Ordnung effizient mit anderen Optimierungsmethoden, z. B. lokaler Optimierung, kombiniert werden kann und wie sie sich zur verifizierten globalen Optimierung unter Nebenbedingungen einsetzen lässt.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Alefeld und J. Herzberger: Introduction to Interval Computations; Academic Press, New York (1983).
- [2] G. Alefeld, F. A. Potra, Z. Shen: On the Existence Theorems of Kantorovich, Moore and Miranda; in Computing Supplementum 15, "Topics in Numerical Analysis" (Eds. G. Alefeld, X. Chen), Springer Verlag (2001), 21-28.
- [3] G. Alefeld, A. Frommer, G. Heindl, J. Mayer: On the existence theorems of Kantorovich, Miranda and Borsuk; Electronic Transactions on Numerical Analysis (ETNA) 17 (2004), 102-111.
- [4] E. Baumann: Optimal centered forms; BIT 28 (1988), 80-87.
- [5] F. Bornemann, D. Laurie, S. Wagon, J. Waldvogel: Vom Lösen numerischer Probleme; Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (2006).
- [6] F. H. Clarke: Optimization and Nonsmooth Analysis; John Wiley & Sons, New York (1983).
- [7] P. Deuffhard, A. Hohmann: Numerische Mathematik I; de Gruyter Verlag, Berlin, 2. Auflage (1993).
- [8] H.-C. Fischer: Schnelle automatische Differentiation, Einschließungsmethoden und Anwendungen; Dissertation, Universität Karlsruhe (1990).
- [9] A. Frommer, B. Lang und M. Schnurr: A comparison of the Moore and Miranda existence tests; Computing 72 (2004), 349-354.
- [10] A. Frommer, B. Lang: Existence Tests for Solutions of Nonlinear Equations Using Borsuk's Theorem; SIAM J. Numer. Anal. 43 (3) (2005), 1348-1361.
- [11] A. Griewank: Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation; Number 19 in Frontiers in Appl. Math., SIAM, Philadelphia (2000).
- [12] R. Hammer, M. Hocks, U. Kulisch und D. Ratz: Numerical Toolbox for Verified Computing I; Springer-Verlag, Berlin (1993).

-
- [13] E. R. Hansen: Interval forms of Newton's method; *Computing* 20 (1978), 153-163.
- [14] E. R. Hansen: Global Optimization Using Interval Analysis - The One-Dimensional Case; *Journal of Optimization Theory and Applications* 29 (1979), 331-344.
- [15] E. R. Hansen: Global Optimization Using Interval Analysis - The Multi-Dimensional Case; *Numerische Mathematik* 34 (1980), 247-270.
- [16] E. R. Hansen, G. W. Walster: *Global Optimization Using Interval Analysis: Second Edition, Revised and Expanded*; Marcel Dekker, Inc., New York (2004).
- [17] H. Heuser: *Lehrbuch der Analysis Teil 2*; B.G.Teubner Verlag Stuttgart, 9. Auflage (1995), 246-280.
- [18] K. Ichida, Y. Fujii: An Interval Arithmetic Method for Global Optimization; *Computing* 23 (1979), 85-97.
- [19] R. Klatte, U. Kulisch, M. Neaga, Ch. Ullrich und D. Ratz: *PASCAL-XSC - Language Description with Examples*; Springer-Verlag, Berlin (1992).
- [20] R. B. Kearfott: *Rigorous Global Search: Continuous Problems*, Kluwer Academic Publishers, Boston (1996).
- [21] L. Kolev: Use of Interval Slopes for the Irrational Part of Factorable Functions; *Reliable Computing* 3 (1997), 83-93.
- [22] R. Krawczyk und A. Neumaier: Interval Slopes for Rational Functions and Associated Centered Forms; *SIAM J. Numer. Anal.* 22 (1985), 604-616.
- [23] U. Kulisch, W. L. Miranker: *Computer Arithmetic in Theory and Practice*; Academic Press, New York (1981).
- [24] J. Mayer: A generalized theorem of Miranda and the theorem of Newton-Kantorovich; *Numer. Funct. Anal. and Optimiz.*, 23 (3&4) (2002), 333-357.
- [25] C. Miranda: Un' osservazione su un teorema di Brouwer; *Bolletino Unione Matematica Italiana* (1940), 5-7.
- [26] R. E. Moore: A test for existence of solutions to nonlinear systems; *SIAM J. Numer. Analysis* (1977), 611-615.
- [27] R. E. Moore und J. B. Kioustelidis: A simple test for accuracy of approximate solutions to nonlinear (or linear) systems; *SIAM J. Numer. Analysis* 17 (1980), 521-529.
- [28] J. J. Moré, B. S. Garbow und K. E. Hilstrom: *Testing Unconstrained Optimization Software*; *ACM Transaction of Mathematical Software* 7 (1981), 17-41.

-
- [29] H. Muñoz und R. B. Kearfott: Slope Intervals, Generalized Gradients, Semigradients, Slant Derivatives, and Csets; *Reliable Computing* 10 (3) (2004), 163-193.
- [30] A. Neumaier: *Interval Methods for Systems of Equations*; Cambridge University Press, Cambridge (1990).
- [31] A. Neumaier, Z. Shen: The Krawczyk Operator and Kantorovich's Theorem; *Journal of Math. Anal. and Appl.* 149 (1990), 437-443.
- [32] A. Neumaier: Complete Search in Continuous Global Optimization and Constraint Satisfaction; in *Acta Numerica 2004* (A. Iserles, ed.), Cambridge University Press (2004), 271-369.
- [33] L. B. Rall: *Computational Solution of Nonlinear Operator Equations*; John Wiley, New York (1969).
- [34] L. B. Rall: A comparison of the existence theorems of Kantorovich and Moore, *SIAM J. Numer. Analysis* 17 (1980), 148-161.
- [35] L. B. Rall: *Automatic Differentiation, Techniques and Applications*; Lecture Notes in Computer Science, No. 120, Springer Verlag, Berlin (1981).
- [36] D. Ratz: *Automatische Ergebnisverifikation bei globalen Optimierungsproblemen*; Dissertation, Universität Karlsruhe (1992).
- [37] D. Ratz, T. Csendes: On the Selection of Subdivision Directions in Interval Branch-and-Bound Methods for Global Optimization; *Journal of Global Optimization* 7 (1995), 183-207.
- [38] D. Ratz: *Automatic Slope Computation and its Application in Nonsmooth Global Optimization*; Shaker Verlag, Aachen (1998).
- [39] D. Ratz: A Nonsmooth Global Optimization Technique Using Slopes - The One-Dimensional Case; *Journal of Global Optimization* 14 (1999), 365-393.
- [40] U. Schäfer: On computer-assisted proofs for solutions of linear complementarity problems; *Journal of Comput. and Applied Math.*, Vol. 199, No. 1 (2007), 257-262.
- [41] U. Schäfer, M. Schnurr: A comparison of simple tests for accuracy of approximate solutions to nonlinear systems with uncertain data; *Journal of Industrial and Management Optimization*, Vol. 2, No. 4 (2006), 425-434.
- [42] M. Schnurr: *Die Sätze von Kantorovich, Moore und Miranda*; Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (2002).
- [43] M. Schnurr: On the Proofs of Some Statements Concerning the Theorems of Kantorovich, Moore, and Miranda; *Reliable Computing* 11 (2005), 77-85.

- [44] H. Schwefel: Numerical Optimization of Computer Models; Wiley, New York (1981).
- [45] Z. Shen, M. A. Wolfe: A note on the comparison of the Kantorovich and Moore theorems; Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Appl., 15 (1990), 229-232.
- [46] Z. Shen, M. A. Wolfe: On Interval Enclosures Using Slope Arithmetic; Appl. Math. Comput. 39 (1990), 89-105.
- [47] S. Skelboe: Computation of Rational Interval Functions; BIT 4 (1974), 87-95.
- [48] D.G. Sotiropoulos and T.N. Grapsa: A branch-and-prune method for global optimization: The univariate case; In: Scientific Computing, Validated Numerics, Interval Methods, W. Krämer and J.W.v. Gudenberg, eds, Kluwer, Boston (2001), 215-226.
- [49] A. Törn, A. Žilinskas: Global Optimization; Lecture Notes in Computer Science, No 350, Springer-Verlag, Berlin (1989).
- [50] B. Tóth, T. Csendes: Empirical investigation of the convergence speed of inclusion functions; Reliable Computing 11 (2005), 253-273.
- [51] T. Vinko, J.-L. Lagouanelle, T. Csendes: A new inclusion function for global optimization: Kite - the one dimensional case; Journal of Global Optimization 30 (2004), 435-456.
- [52] A. Wiethoff: Verifizierte globale Optimierung auf Parallelrechnern; Dissertation, Universität Karlsruhe (1997).

ISBN: 978-3-86644-192-7

www.uvka.de