



Technische Universität Ilmenau

Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften

Fachgebiet Optimierung / Fachgebiet Stochastik

Berechnung von Fréchet-Mittelwerten auf Sphären

Masterarbeit zur Erlangung des akademischen Grades Master of Science

Johannes Wieditz

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof. Dr. rer. nat. habil. Gabriele Eichfelder

Jun.-Prof. Dr. rer. nat. Thomas Hotz

Ilmenau, 05. Januar 2017

Zusammenfassung

Die Minimierung von Abständen zu einer gegebenen Menge von Punkten ist eine wichtige Aufgabe in der Logistik. Gerade bei mehreren gegebenen Punkten besteht dabei ein Zielkonflikt zwischen den gegebenen Daten, wenn ein kürzerer Abstand zu einem Punkt eine längere Distanz zu einem anderen zur Folge hat. Daher geht man oftmals dazu über, den mittleren Abstand zu allen gegebenen Punkten zu minimieren. Mathematisch wird diese Problemstellung durch die Ermittlung von sogenannten Fréchet-Mittelwerten modelliert, deren explizite Berechnung sich als schwierig erweisen kann. Diese Abschlussarbeit befasst sich mit einem Verfahren zur Approximation von Fréchet-Mittelwerten auf dem Einheitskreis und der Einheitssphäre. Hierzu benutzen wir einen modifizierten Branch-and-Bound-Algorithmus. Die benötigten unteren Schranken und Unterteilungsvorschriften werden dazu hergeleitet und erstere mit einem bekannten Ansatz aus dem Bereich der Lipschitz-Optimierung verglichen. Die konstruierten Verfahren werden anschließend unter numerischen Gesichtspunkten untersucht, gegenübergestellt und abschließend an Anwendungsbeispielen getestet.

Abstract

Minimizing distances from a given set of points is a key focus in logistics. Particularly in the case of several given points, a target conflict occurs between the given data if a shorter distance to one point results in a longer distance to another. Therefore, one often minimizes the mean distance to all given points. Mathematically, this problem is modeled by identifying so-called Fréchet means whose explicit computation may prove difficult. This thesis is concerned with a method for approximating Fréchet means on the unit circle and the unit sphere. To this end, we use a modified branch and bound method. For this, the required lower bounds and subdivision rules are derived, and the former are compared to a known approach in the field of Lipschitz optimization. The constructed methods are then examined from a numerical perspective, compared and finally applied to concrete examples.

Inhaltsverzeichnis

Notationen	IV
1 Einleitung	1
2 Grundlagen der globalen Optimierung und Fréchet-Mittelwerte	4
2.1 Branch-and-Bound-Verfahren	5
2.2 Fréchet-Funktion und intrinsische Mittelwerte	10
2.3 Unterschätzer mit Lipschitz-Konstante	18
3 Intrinsische Abstände auf Sphären	23
3.1 Eigenschaften der Bogenlänge auf dem Einheitskreis	24
3.2 Sphärische Geometrie auf der Einheitskugel	26
3.2.1 Großkreise und Kugeldreiecke	26
3.2.2 Untere Schranke durch geometrische Konstruktion	30
4 Branch-and-Bound-Verfahren auf Sphären	42
4.1 Branch-and-Bound-Algorithmus zur Ermittlung aller globalen Minima	42
4.2 Branch-Vorschriften auf metrischen Räumen	45
4.2.1 Branch-Vorschrift für den Einheitskreis	46
4.2.2 Branch-Vorschrift für die Einheitskugel	46
4.3 Branch-and-Bound-Verfahren mit unteren Schranken aus geometrischer Konstruktion	48
4.3.1 Branch-and-Bound-Verfahren für den Einheitskreis	48
4.3.2 Branch-and-Bound-Verfahren für die Einheitskugel	49
4.4 Konvergenz und Exaktheit	50
5 Testinstanzen und Anwendung	53
5.1 Definition der Testinstanzen	53
5.1.1 Testinstanzen auf dem Einheitskreis	53
5.1.2 Testinstanzen auf der Kugeloberfläche	54
5.2 Erzeugung der Eingangsdaten	55
5.3 Implementierungsdetails und numerische Aspekte	58

5.4	Numerische Umsetzung der Testinstanzen	60
5.4.1	Numerik für Instanzen auf dem Einheitskreis	60
5.4.2	Numerik für Instanzen auf der Kugeloberfläche	63
5.5	Anwendungsbeispiel – Magnetische Remanenz	66
5.6	Anwendungsbeispiel – Bau eines Verteilungszentrums	69
6	Fazit und Ausblick	71
A	Anhang	73
	Literaturverzeichnis	83

Notationen

Mengen, metrische Räume und Vektorräume

\mathbb{N}	die natürlichen Zahlen $\{1, 2, 3, \dots\}$
\mathbb{Z}	die ganzen Zahlen $\{0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\}$
\mathbb{R}	die reellen Zahlen
\mathbb{R}^n	$\{(v^1, \dots, v^n) \mid v^i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, n\}$ der Vektorraum aller reellwertigen n -Tupel, $n \in \mathbb{N}$
\mathbb{R}_+^n	$\{(v^1, \dots, v^n) \in \mathbb{R}^n \mid v^i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n\}$ der nichtnegative Orthant des \mathbb{R}^n , $n \in \mathbb{N}$
$\mathbb{R}^{n \times m}$	$\{(a^{ij}) \mid a^{ij} \in \mathbb{R}, 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$ der Raum der $n \times m$ -Matrizen mit reellen Einträgen, $n, m \in \mathbb{N}$
$(a, b) / [a, b]$	das offene/ abgeschlossene Intervall von a bis b für $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a \leq b$
$\text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$..	$\{v \in \mathbb{R}^n \mid v = \sum_{i=1}^k \lambda_i v_i, \lambda_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, k\}$ der von den Vektoren $v_1, v_2, \dots, v_k \in \mathbb{R}^n$ aufgespannte lineare Unterraum, $k \in \mathbb{N}$
$\text{cone}\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$..	$\{v \in \mathbb{R}^n \mid v = \sum_{i=1}^k \lambda_i v_i, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, k\}$ der von den Vektoren $v_1, v_2, \dots, v_k \in \mathbb{R}^n$ erzeugte konvexe Kegel, $k \in \mathbb{N}$
$\text{argmin}_{m \in M} f(m)$	die Menge der Minimierer einer Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$
$\text{argmax}_{m \in M} f(m)$	die Menge der Maximierer einer Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbb{B}_\varepsilon(x)$	der offene Ball um x mit Radius ε
$\text{diam}(X)$	der Durchmesser einer Teilmenge $X \subseteq M$ eines metrischen Raumes (M, d)
$\text{int } X$	das topologische Innere einer Teilmenge $X \subseteq M$ eines metrischen Raumes (M, d)
\mathbb{S}^n	$\{v \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \ v\ = 1\}$ die n -dimensionale Einheitssphäre, kurz: n -Sphäre

Vektoren und Matrizen im euklidischen Raum

$\langle \cdot, \cdot \rangle$	das Standardskalarprodukt im \mathbb{R}^n
$\ v\ $	die euklidische Norm eines Vektors $v \in \mathbb{R}^n$
v^\top	der transponierte Vektor von $v \in \mathbb{R}^n$
e_i	der i -te kanonische Einheitsvektor des \mathbb{R}^n für $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, $n \in \mathbb{N}$
0_n	der Nullvektor des \mathbb{R}^n , $n \in \mathbb{N}$
I_n	die Einheitsmatrix der Ordnung $n \in \mathbb{N}$
A^\top	die zu $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ transponierte Matrix
A^{-1}	die zu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ inverse Matrix

Verschiedenes

$\operatorname{sgn} x$	das Vorzeichen einer reellen Zahl $x \in \mathbb{R}$ mit $\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} \frac{x}{ x }, & x \neq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$
$\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$	die (multivariate) Normalverteilung mit Erwartungswert $\mu \in \mathbb{R}^n$ und Kovarianzmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $n \in \mathbb{N}$
\mathbb{P}	ein Wahrscheinlichkeitsmaß
\mathbb{P}_X	die Verteilung einer Zufallsvariable X unter einem Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P}

1 Einleitung

Daten in Form von Richtungen, Winkeln oder Achsen sind Gegenstand der zirkulären Statistik. Diese findet Anwendung in vielen Bereichen der Naturwissenschaften, zum Beispiel in der Geographie, aber auch außerhalb, etwa im Transportwesen. Üblicherweise werden die Daten als Punkte einer Sphäre festen Radius angegeben. Um die Position eines Punktes eindeutig festzulegen, genügt dann die Angabe von Winkeln. Handelt es sich beispielsweise um Positionsangaben auf der Erde, welche zumeist als perfekte Kugel modelliert wird, so werden dazu üblicherweise Längen- und Breitengrade angegeben. Dies sind Winkel, die der Punkt zu gewissen Referenzebenen einschließt. Sie lassen sich mathematisch einfach in sogenannte Winkelkoordinaten umrechnen.

Sind die Städte x_1, x_2, \dots, x_n gegeben, so stellt sich beim Bau eines Verteilungszentrums v die Frage nach dem besten Standort für ein solches. Ein Kriterium für die Güte könnte neben niedrigen Grundstückspreisen und guter Anbindung an die örtliche Infrastruktur beispielsweise die mittlere Entfernung zu allen gegebenen Städten sein. In diesem Fall ist das Optimierungsproblem

$$\min \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d(x_i, v), \quad (1.1)$$

zu lösen, wobei v ein Punkt auf der Erdoberfläche sei und d einen geeigneten Abstands begriff für je zwei Punkte auf der Erdkugel in Form einer Metrik formalisiere. Sind die Winkelkoordinaten der Städte x_i , $i = 1, 2, \dots, n$, und des Standorts von v bekannt, so lässt sich deren Entfernung durch die Bogenlänge einfach bestimmen. Mathematisch bezeichnet man einen Minimierer des Problems (1.1) als *sphärischen Median* oder auch *Fréchet-1-Mittelwert* (da der Abstand in *erster* Potenz auftritt). Das Finden von Lösungen des Problems (1.1) in etwas allgemeinerer Form ist Gegenstand dieser Arbeit.

Die Ermittlung allgemeiner Fréchet- p -Mittelwerte gestaltet sich gemeinhin als schwierig, da es sich bei dem Problem (1.1) im Allgemeinen um ein nichtkonvexes Problem handelt. Um diese Aussage zu begründen, lässt sich das Problem aus mehreren Perspektiven betrachten,

welche wir im Folgenden kurz darstellen wollen. Es sei dazu (M, d) ein metrischer Raum und

$$\hat{F}_n : M \rightarrow \mathbb{R}, \quad \hat{F}_n(m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_i, m), \quad (1.2)$$

die sogenannte *Fréchet-Funktion* zu gegebenen Punkten $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$ und einer gegebenen nichtnegativen reellen Zahl $p \in \mathbb{R}_+$. Ein Fréchet- p -Mittelwert ist dann ein Minimierer der Fréchet-Funktion. Fassen wir \hat{F}_n als Funktion von $\mathbb{R}^{k+1} \rightarrow \mathbb{R}$ auf und suchen deren Minima, so ist in dem für uns interessanten Fall, dass die zulässige Menge eine Sphäre ist, im obigen Beispiel die Oberfläche der Erdkugel, diese keine konvexe Teilmenge des \mathbb{R}^{k+1} . Beispielsweise liegt die direkte Verbindungsstrecke zwischen Nord- und Südpol im Erdinneren und nicht auf der Erdoberfläche. Alternativ können wir \hat{F}_n als Funktion von der k -Sphäre \mathbb{S}^k als Mannigfaltigkeit nach \mathbb{R} auffassen. Als solche ist die Zielfunktion jedoch nicht konvex (in der Definition nach [ATV13, Definition 2.1]), da die einzigen konvexen Funktionen über kompakten Riemannschen Mannigfaltigkeiten, die konstanten Funktionen sind [ATV13, Theorem 2.2]. Dies trifft für die Fréchet-Funktion jedoch mitnichten zu.

Darüber hinaus gilt es zu beachten, dass die Zielfunktion $\hat{F}_n : \mathbb{S}^k \rightarrow \mathbb{R}$ im Allgemeinen eine nur stückweise differenzierbare Funktion ist und wir ausschließlich an globalen Minimalstellen der Fréchet-Funktion interessiert sind. Dies sind Gegebenheiten, die bei der Wahl eines Optimierungsverfahrens beachtet werden müssen.

Ein Möglichkeit zur Lösung des Problems (1.1) wird in [AM14] vorgestellt. Dort wird auf die Methode des *Simulated Annealing*, einem probabilistischen Optimierungsverfahren, zurückgegriffen. Da wir im Rahmen dieser Arbeit einen deterministischen Ansatz wählen wollen, verfolgen wir diesen Zugang jedoch nicht weiter.

Ist die zulässige Menge der Einheitskreis \mathbb{S}^1 , so ist ein Algorithmus bekannt, der die Menge der Fréchet- p -Mittelwerte explizit berechnet. Dieser wird in [HH15] vorgestellt. Ein Gradientenabstiegsverfahren auf Einheitssphären \mathbb{S}^k höherer Dimension wurde in [ATV13] für den Fall hergeleitet, dass die gegebenen Punkte x_1, x_2, \dots, x_n sich lediglich auf einer Halbsphäre befinden. Ein allgemeines, deterministisches Verfahren zur Bestimmung der globalen Minima von

$$\min_{m \in M} \hat{F}_n(m) \quad (1.3)$$

über einem metrischen Raum (M, d) ist bisher nicht bekannt und wird für den Fall, dass die zulässige Menge M die k -dimensionale Einheitssphäre ist, $k = 1, 2$, in dieser Arbeit vorgestellt.

Da gebräuchliche deterministische Optimierungsverfahren, wie etwa Gradientenabstiegsverfahren oder SQP-Methoden, in der Regel globale Informationen der Ableitung(en) der Zielfunktion ausnutzen und auf konvexen zulässigen Mengen arbeiten, sind diese für unsere Problemstellung ungeeignet. Branch-and-Bound-Verfahren können hingegen auch ohne diese Voraussetzungen formuliert werden. Wir werden daher einen solchen Algorithmus zur Bestimmung der Fréchet-Mittelwerte auf der Einheitssphäre \mathbb{S}^2 anwenden. Dazu wählen wir zunächst einen sehr allgemeinen Zugang und betrachten Fréchet-Funktionen über allgemeinen metrischen Räumen. Im Laufe der Arbeit wenden wir uns zur besseren Illustration unserer Vorgehensweise zunächst dem Beispiel des Einheitskreises \mathbb{S}^1 zu. Anschließend konstruieren wir ein Branch-and-Bound-Verfahren für die zweidimensionale Einheitssphäre. Dieses soll dabei auf einen möglichst genauen Unterschätzer zurückgreifen. Die Ausgabe des Algorithmus soll eine Menge A sein, deren Elemente die Eigenschaft besitzen, dass ihre Funktionswerte nur geringfügig vom Minimalwert abweichen und zu jeder Minimallösung von (1.3) sich in einer kleinen Umgebung ein Element aus A befindet.

In Kapitel 2 stellen wir zunächst einige grundlegende Begriffe der globalen Optimierung, die Grundidee hinter Branch-and-Bound-Verfahren, sowie das im Fokus stehende Optimierungsproblem vor. Anschließend konstruieren wir mit einer aus [HP95] und [Pin96] bekannten, elementaren Methode einen Unterschätzer, welcher uns dazu motiviert, bessere untere Schranken der Zielfunktion mittels eines geometrischen Ansatzes herzuleiten.

Die dazu nötigen Hilfsmittel der sphärischen Geometrie und Trigonometrie stellen wir in Kapitel 3 vor. Hier werden außerdem für die Beispiele des Einheitskreises und der Einheitssphäre \mathbb{S}^2 untere Schranken des Minimalwertes der Fréchet-Funktion hergeleitet, die für den Fall, dass lediglich ein Datenpunkt gegeben ist ($n = 1$), scharf sind.

Kapitel 4 führt zuerst einen modifizierten Branch-and-Bound-Algorithmus ein, der es uns bei Kenntnis von unteren Schranken für den Minimalwert und einer Branch-Vorschrift ermöglicht, eine Approximation der Menge aller Fréchet-Mittelwerte zu berechnen. Für die Beispiele der Einheitssphären der Dimension eins und zwei stellen wir anschließend Möglichkeiten zur Unterteilung der zulässigen Menge vor und formulieren abschließend für beide Beispiele je ein Branch-and-Bound-Verfahren. Dies stellt das unserer Kenntnis nach erste deterministische Verfahren zur Bestimmung aller Fréchet-Mittelwerte auf der ganzen Einheitssphäre \mathbb{S}^2 dar.

Die konstruierten Algorithmen werden in Kapitel 5 für verschiedene, aus mathematischer Sicht interessante Beispiele, sowie für zwei Anwendungsbeispiele getestet und bewertet. Dabei gehen wir außerdem auf numerische Aspekte der Implementation ein.

In Kapitel 6 fassen wir die Ergebnisse dieser Arbeit abschließend zusammen und geben einen Ausblick auf potentielle, weiterführende Untersuchungen.

2 Grundlagen der globalen Optimierung und Fréchet-Mittelwerte

In diesem Kapitel tragen wir die wesentlichen, für diese Arbeit relevanten Definitionen, Begriffe, sowie einige bekannte Resultate zusammen. Ferner erklären wir die Idee eines Branch-and-Bound-Verfahrens und dessen Funktionsweise in seinen grundlegenden Zügen. Abschließend stellen wir das zentrale Optimierungsproblem dieser Arbeit, sowie einen ersten Ansatz zur Konstruktion einer unteren Schranke der Zielfunktion vor.

Dazu gehen wir davon aus, dass ein metrischer Raum (M, d) über einer nichtleeren Menge M , sowie eine Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben sei. Wir betrachten das folgende Optimierungsproblem

$$\min_{m \in M} f(m), \tag{2.1}$$

und suchen Optimallösungen für das Problem (2.1).

Definition 2.1 (lokales/ globales Minimum) Ein Punkt $\bar{m} \in M$ heißt

- (a) *(globale) Minimalstelle* bzw. *(globale) Minimallösung* für (2.1), falls $f(\bar{m}) \leq f(m)$ für alle $m \in M$ gilt;
- (b) *lokale Minimalstelle* bzw. *lokale Minimallösung* für (2.1), falls es ein $\varepsilon > 0$ gibt, sodass $f(\bar{m}) \leq f(m)$ für alle $x \in \mathbb{B}_\varepsilon(\bar{m}) \cap M$ gilt.

Wir nehmen für diesen Abschnitt zunächst an, dass

$$\operatorname{argmin}_{m \in M} f(m) \neq \emptyset$$

gilt. Dabei bezeichne $\operatorname{argmin}_{m \in M} f(m)$ die Menge der Minimalstellen von f auf M , welche wir im Falle der Eindeutigkeit des Minimierers mit diesem identifizieren. In Abschnitt 2.2 zeigen wir, dass das in dieser Arbeit betrachtete Optimierungsproblem stets eine Minimallösung besitzt.

Im Rahmen dieser Arbeit interessieren wir uns hauptsächlich für globale Minimalstellen eines konkreten Optimierungsproblems, welches wir im nachfolgenden Abschnitt 2.2 vorstellen.

Die Ermittlung von globalen Optimalstellen kann sich als schwierig erweisen. Handelt es sich bei dem betrachteten Problem um ein nichtkonvexes Optimierungsproblem über $M = \mathbb{R}^k$, so ist die Bestimmung von Minimallösungen mit lokalen Verfahren wie etwa Gradientenabstiegsverfahren problematisch. Diese finden im Allgemeinen nur lokale Minimalstellen, welche nicht notwendigerweise auch globale Minimalstellen sind. Wir wenden uns daher anderen Lösungsansätzen zu.

2.1 Branch-and-Bound-Verfahren

Ein bekanntes Verfahren, welches für ein gegebenes Problem der Form (2.1) globale Minimalstellen bestimmt, ist das *Branch-and-Bound-Verfahren*. Dieses wollen wir im folgenden Abschnitt näher betrachten. Die grundlegende Vorgehensweise ist dabei die folgende:

Gegeben sei ein Optimierungsproblem der Form (2.1). Die Menge M wird mittels einer Vorschrift in Teilmengen unterteilt (*Branch*). Ziel ist es, mit geeigneten unteren Schranken der Zielfunktion viele dieser Teilmengen, die keine Minima enthalten können, aus dem Suchbereich auszuschließen (*Bound*) und so den Suchbereich möglichst klein zu halten.

Die für einen Branch-and-Bound-Algorithmus benötigten unteren Schranken oder allgemeiner Unterschätzer der Zielfunktion, können von vielfältiger Gestalt sein. Die folgende Definition soll daher diese Begriffe formalisieren.

Definition 2.2 (Unterschätzer, untere Schranke) Es sei $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion und $N \subseteq M$ eine nichtleere Teilmenge. Gilt für die Funktion $g : N \rightarrow \mathbb{R}$ die Relation $g(m) \leq f(m)$ für alle $m \in N$, so heißt g *Unterschätzer* von f auf N . Eine reelle Zahl h mit der Eigenschaft $h \leq f(m)$ für alle $m \in N$ nennen wir *untere Schranke* von f auf N .

Entsprechend definieren wir *Oberschätzer* bzw. *obere Schranken*, falls die Bedingung $g(m) \geq f(m)$ bzw. $h \geq f(m)$ für alle $m \in N$ erfüllt ist.

Bemerkung 2.3 Man kann untere Schranken als konstante Unterschätzer auffassen. Der Begriff des Unterschätzers ist demnach allgemeiner. Eine analoge Aussage gilt für obere Schranken und Oberschätzer. Die Verwendung von Unterschätzern ist im Bereich der globalen Optimierung ein sehr verbreitetes Konzept, welches auch wir im Rahmen dieses Kapitels benötigen. Da wir im Laufe dieser Arbeit lediglich eine Konstante (den Minimalwert der Zielfunktion) unterschätzen, werden sich später untere Schranken zumeist als ausreichend erweisen.

Ist für die Funktion f ein Unterschätzer bekannt, so kann das folgende Kriterium angewendet werden, um Teile des Suchbereiches auszuschließen:

Lemma 2.4 (Verwerfen von Gebieten) *Es sei $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion und $g : N \rightarrow \mathbb{R}$ ein Unterschätzer von f auf N mit $N \subsetneq M$, sowie $\bar{m} \in M \setminus N$. Gilt $f(\bar{m}) < g(n)$ für alle $n \in N$, so liegt keine der Minimalstellen von f auf M in N .*

Beweis: Angenommen, es gäbe ein $\bar{n} \in N$, in dem ein globales Minimum von f angenommen wird. Dann gilt

$$f(\bar{n}) \leq f(\bar{m}) < g(\bar{n}) \leq f(\bar{n}),$$

ein Widerspruch. ■

Da numerische Verfahren in der Regel nicht exakt arbeiten, wird man mit einem Branch-and-Bound-Algorithmus globale Minima (zumindest in vertretbarer Rechenzeit) nur bis auf eine vorgegebene Genauigkeit ermitteln können. Ferner wird man sich wünschen, dass für jedes globale Minimum, zumindest in einer Umgebung ein mit dem Algorithmus als „optimal“ identifizierter Punkt liegt. Diese Idee wird durch die folgende Definition realisiert:

Definition 2.5 (ε -minimal, (ε, δ) -Überdeckung) *Es sei $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion und \bar{m} eine globale Minimalstelle von (2.1) mit Minimalwert $f(\bar{m}) = \min_{m \in M} f(m)$. Ferner seien $\varepsilon > 0$ und $\delta > 0$ vorgegebene Genauigkeiten.*

- (a) Ein Punkt $m \in M$ heißt ε -minimal für das Problem (2.1), falls $f(m) - \min_{m \in M} f(m) \leq \varepsilon$.
- (b) Ein Punkt $m \in M$ heißt (ε, δ) -minimal für \bar{m} , falls m ε -minimal ist und $d(m, \bar{m}) < \delta$.
- (c) Es sei X die Menge der globalen Minimalstellen von f auf M . Eine endliche Menge $A \subseteq M$ heißt (ε, δ) -Überdeckung (oder (ε, δ) -Approximation) von X , falls alle $m \in A$ ε -minimal sind und für jedes $x \in X$ ein (ε, δ) -minimaler Punkt $m \in A$ für x existiert.

Den Begriff der (ε, δ) -Überdeckung werden wir erst in Kapitel 4 benötigen. Dieser wird hier vorbereitend eingeführt. Die Definition orientiert sich an [EGS16, Definition 2.1(c)] und den Erläuterungen aus [HW03, Abschnitt 12.9]. Für zwei globale Minimalstellen \bar{m}_1, \bar{m}_2 kann es möglicherweise nur einen gemeinsamen approximierenden Punkt in der (ε, δ) -Approximation geben, falls $d(\bar{m}_1, \bar{m}_2) < \delta$. Andererseits kann es zu einer Minimalstelle mehrere Elemente in A geben, die diese approximieren. Man beachte, dass es darüber hinaus Elemente in A geben kann, die zwar ε -minimal sind, aber weiter als δ von jeder globalen Minimalstelle entfernt liegen.

Bemerkung 2.6 Die Algorithmen dieser Arbeit assoziieren stets eine gegebene Teilmenge mit einem, für diesen Bereich repräsentativen Punkt. Dieser Repräsentant wird dabei heuristisch ausgewählt. Wenngleich die Auswahl dieses Punktes Einfluss auf die Laufzeit des Algorithmus nehmen mag, werden wir dies im Folgenden vernachlässigen.

Im Rahmen eines Branch-and-Bound-Verfahrens wird die zulässige Menge M sukzessive in (nicht notwendigerweise disjunkte) Teilmengen M_1, M_2, \dots, M_k unterteilt, welche die zulässige Menge *überdecken* sollen, d. h. es gilt $\bigcup_{i=1}^k M_i = M$. Für den Bound-Schritt benötigen wir sowohl obere als auch untere Schranken auf diesen Teilbereichen. Das folgende Lemma bietet uns eine obere Schranke für den Minimalwert einer Zielfunktion, sowie ein Kriterium für ε -Minimalität.

Lemma 2.7 *Es seien $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion, M_1, M_2, \dots, M_k eine Überdeckung von M , d. h., $\bigcup_{i=1}^k M_i = M$, und g_i seien untere Schranken von f auf M_i , $i = 1, 2, \dots, k$. Ferner sei $\varepsilon > 0$ gegeben. Dann gilt:*

(1) *Für jeden Punkt $\bar{m} \in M$ ist $f(\bar{m})$ eine obere Schranke für $\min_{m \in M} f(m)$.*

(2) *Gilt für einen Punkt $\bar{m} \in M$ die Bedingung*

$$f(\bar{m}) - \min_{i=1,2,\dots,k} g_i \leq \varepsilon$$

so ist \bar{m} ε -minimal für (2.1).

Beweis: Die Aussage (1) ist evident. Für (2) gilt wegen $g_i \leq f(m)$ für alle $m \in M_i$, $i = 1, 2, \dots, k$, insbesondere $\min_{i=1,2,\dots,k} g_i \leq \min_{m \in M} f(m)$. Folglich ist

$$f(\bar{m}) - \min_{m \in M} f(m) \leq f(\bar{m}) - \min_{i=1,2,\dots,k} g_i \leq \varepsilon,$$

d. h., \bar{m} ist ε -minimal für (2.1). ■

Ist M in die Teilmengen M_1, M_2, \dots, M_k unterteilt und sind für diese bereits untere Schranken für den Minimalwert bekannt, so lässt sich auf diese Weise einfach ein ε -minimaler Punkt als solcher identifizieren. Oftmals genügt es bereits, eine Approximation des minimalen Zielfunktionswertes zu kennen. Einen Näherungswert dafür liefert dann ein ε -minimaler Punkt. Der folgende, einfache Branch-and-Bound-Algorithmus dient zur Bestimmung eines ε -minimalen Punktes.

Algorithmus 2.8 (Branch-and-Bound) Wir betrachten zu einer Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ das Problem (2.1). Es sei eine Branch-Vorschrift zur Unterteilung der Menge M in Teilbereiche, sowie eine Vorschrift zur Berechnung einer unteren Schranke der Zielfunktion f auf jeder Teilmenge $\tilde{M} \subseteq M$ bekannt. Obere Schranken für den Minimalwert auf einer Teilmenge $\tilde{M} \subseteq M$ erhält man durch Funktionsauswertung (vgl. Lemma 2.7 (1)).

Input : Metrischer Raum (M, d) , Zielfunktion f , Genauigkeit $\varepsilon > 0$

Output : ε -minimaler Punkt für eine Minimallösung des Optimierungsproblems (2.1)

```

1 Initialisiere Liste  $\mathcal{L}$  mit zu untersuchenden Teilbereichen von  $M$ . Bestimme obere
  Schranke für den Minimalwert  $\min_{m \in M} f(m)$  (bspw. durch Funktionsauswertung).
  Wähle erstes Element  $M^*$  aus der Liste  $\mathcal{L}$ .
2 while  $\mathcal{L} \neq \emptyset$  do
3   Lösche  $M^*$  aus  $\mathcal{L}$ . Unterteile  $M^*$  gemäß einer Branchingvorschrift in Teilbereiche.
4   for alle Teilbereiche  $\tilde{M}$  do
5     Berechne obere und untere Schranke auf  $\tilde{M}$ .
6     if untere Schranke < kleinste obere Schranke von Elementen aus  $\mathcal{L}$  then
7       Füge  $\tilde{M}$  zur Liste  $\mathcal{L}$  hinzu. Aktualisiere ggf. obere Schranke und streiche
       alle Teilbereiche aus  $\mathcal{L}$ , die gemäß Lemma 2.4 kein Minimum mehr
       enthalten können.
8     end if
9   end for
10  if  $\mathcal{L} \neq \emptyset$  then
11    Auswahl eines neuen Teilbereiches  $M^*$  aus der Liste  $\mathcal{L}$ .
12    if (obere Schranke auf  $M^*$ ) – (kleinste untere Schranke von Elementen
13    aus  $\mathcal{L}$ )  $\leq \varepsilon$  then
14      Gib Repräsentanten von  $M^*$  aus und beende das Verfahren.
15    end if
16  end if
17 end while

```

Algorithmus : Bestimmung eines ε -minimalen Punktes auf einem metrischen Raum

Der angegebene Algorithmus 2.8 initialisiert zunächst eine Liste \mathcal{L} von noch zu untersuchenden Teilbereichen \tilde{M} von M . Jedes Element der Liste \mathcal{L} besitze dabei neben einer Beschreibung des Teilbereichs \tilde{M} die Attribute „obere Schranke auf \tilde{M} “ und „untere Schranke auf \tilde{M} “ für den Minimalwert $\min_{m \in M} f(m)$.

In der äußeren Schleife (Zeile 2-16) sind ein Branch-Schritt (Zeile 3), ein Bound-Schritt (Zeile 4-9) und ein Auswahl-Schritt (Zeile 12) enthalten. Dabei wird im Branch-Schritt der aktuelle Teilbereich M^* nach einer gegebenen Vorschrift unterteilt.

Im Bound-Schritt werden Elemente der Liste \mathcal{L} der noch zu untersuchenden Teilbereiche eliminiert, wenn das Verwerfungskriterium aus Lemma 2.4 erfüllt ist.

Im Auswahl-Schritt wird anschließend (nach einer deterministischen Vorschrift) ein neuer aktueller Teilbereich M^* ausgewählt und anschließend getestet, ob dessen Repräsentant ε -minimal ist (vgl. Lemma 2.7 (2)). Ist dies der Fall, so wird das entsprechende Element ausgegeben und das Verfahren beendet. Andernfalls wird in die äußere Schleife in Zeile 2 erneut eingestiegen und iteriert.

Bemerkung 2.9 Dieser Branch-and-Bound-Algorithmus ist so konzipiert, dass er, nachdem er einen Punkt (bzw. Teilbereich) des Suchgebiets als ε -minimal identifiziert hat, abbricht. Man beachte dabei, dass diese Lösung jedoch beliebig weit von einer globalen Minimallösung entfernt liegen kann. Insbesondere ist damit die Bestimmung einer (ε, δ) -Überdeckung der Menge der Minimallösungen nicht möglich.

Wir wenden uns daher einer modifizierten Variante des obigen Algorithmus zur Approximation aller globalen Minimalstellen zu. Dabei nehmen wir insbesondere auf den in [EGS16] veröffentlichten Algorithmus Bezug. Diesen betrachten wir in Kapitel 4 ausführlicher.

Bemerkung 2.10 (Unterteilung in Teilbereiche/ Branch-Schritt) Wir haben bisher stets stillschweigend angenommen, dass auf dem metrischen Raum (M, d) eine Unterteilungsvorschrift für den Branch-Schritt existiert. Natürlich muss zur Formulierung eines Branch-and-Bound-Verfahrens ex ante klar sein, wie unterteilt werden soll. Während im Fall $M = \mathbb{R}^k$ (bzw. einer Teilmenge davon) zumeist eine Unterteilung in Hyperquader, sogenannte *Boxen*, angewendet wird, so ist dies auf allgemeinen metrischen Räumen zunächst unklar. Zur Lösung des Problems triangulieren wir im Rahmen dieser Arbeit den zugrunde liegenden Raum auf geeignete Art und Weise. In Abschnitt 4.2 gehen wir darauf noch einmal genauer ein.

2.2 Fréchet-Funktion und intrinsische Mittelwerte

In diesem Abschnitt stellen wir das Optimierungsproblem, welches im Fokus dieser Arbeit steht, vor. Ferner werden einige illustrative Beispiele dafür gegeben. Wir führen zunächst einige Definitionen ein.

Definition 2.11 (beschränkt, Durchmesser) Wir nennen den metrischen Raum (M, d) *beschränkt*, falls sein *Durchmesser*

$$\text{diam}(M) := \sup \{d(m, \tilde{m}) \mid m, \tilde{m} \in M\}$$

endlich ist, andernfalls *unbeschränkt*.

Für eine nichtleere Teilmenge $X \subseteq M$ und einen Punkt $m \in M$ definieren wir durch

$$d(m, X) := \inf \{d(m, x) \mid x \in X\}$$

den *Abstand* von m zu X .

Definition 2.12 (Fréchet-Funktion) Gegeben seien die Punkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$, $n \in \mathbb{N}$, sowie $p \in \mathbb{R}_+$ eine nichtnegative reelle Zahl. Die Funktion

$$\hat{F}_n : M \rightarrow \mathbb{R}, \quad m \mapsto \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_i, m), \quad (2.2)$$

die jedem Punkt $m \in M$ den mittleren Abstand in p -ter Potenz zu x_1, x_2, \dots, x_n zuweist, heißt *Fréchet-Funktion* der Punkte x_1, x_2, \dots, x_n .

Bemerkung 2.13

- (1) Die Punkte x_1, x_2, \dots, x_n nennen wir unter Anwendungsgesichtspunkten auch *Datenpunkte*.
- (2) In der Literatur wird die Funktion \hat{F}_n gelegentlich nur für $p = 2$ als Fréchet-Funktion bezeichnet. Da diese Einschränkung für diese Arbeit nicht relevant ist, nehmen wir sie zunächst nicht vor und weisen bei spezieller Wahl von p explizit darauf hin.

Definition 2.14 (Fréchet-Mittelwert) Wir betrachten das zur Fréchet-Funktion aus (2.2) zugehörige Optimierungsproblem

$$\min_{m \in M} \hat{F}_n(m). \quad (2.3)$$

Einen Minimierer des Problems (2.3) bezeichnen wir als *Fréchet- p -Mittelwert*, im Falle $p = 2$ schlicht als *Fréchet-Mittelwert*.

Wird die Metrik d durch die Länge kürzester Verbindungswege in M (*intrinsisch*) realisiert, so spricht man in diesem Zusammenhang von *intrinsischen Mittelwerten*. In diesem Fall wird der Raum auch *geodätischer Raum* genannt und die Metrik d als *intrinsische Metrik* bezeichnet.

Dass Fréchet-Mittelwerte unter gewissen Voraussetzungen (welchen die von uns betrachteten Beispiele genügen) stets existieren, zeigt der folgende Satz:

Satz 2.15 (Existenz von Minima) *Es sei (M, d) ein metrischer Raum, in dem jede abgeschlossene und beschränkte Menge kompakt ist; man sagt, der Raum besitzt die Heine-Borel-Eigenschaft. Ferner seien $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$, $n \in \mathbb{N}$, und \hat{F}_n die zugehörige Fréchet-Funktion wie in (2.2). Dann besitzt \hat{F}_n auf M ein globales Minimum.*

Beweis: Wir bemerken zunächst, dass die Funktion \hat{F}_n stetig ist. Nun unterscheiden wir zwei Fälle.

- (1) M ist beschränkt. Da M auch (in sich) abgeschlossen ist, ist nach Voraussetzung M sogar kompakt. Nach dem Satz von Weierstraß (siehe [AE10, S. 257, Korollar III.3.8]) nimmt \hat{F}_n auf M sein Minimum an.
- (2) M ist unbeschränkt. Dann gibt es für jedes $\delta > 0$ und jedes $m \in M$ ein $\tilde{m} \in M$ mit $d^p(m, \tilde{m}) > \delta$. Es seien $X := \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ und

$$c := \max_{i=1,2,\dots,n} d^p(x_1, x_i).$$

Für alle $m \in M$ mit $d^p(m, X) = \min_{i=1,2,\dots,n} d^p(m, x_i) > c$ gilt nun die folgende Ungleichung:

$$\begin{aligned} \hat{F}_n(m) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(m, x_i) \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(m, X) \\ &= d^p(m, X) \\ &> \max_{i=1,2,\dots,n} d^p(x_1, x_i) \\ &\geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_1, x_i) = \hat{F}_n(x_1). \end{aligned} \tag{2.4}$$

Die Menge

$$N := \{m \in M \mid d^p(m, X) \leq c\}$$

ist abgeschlossen und beschränkt, also nach Voraussetzung auch kompakt. Ferner gilt aufgrund von $d^p(x_1, X) = 0 < c$ die Beziehung $X \subseteq N$. Insbesondere ist N daher nichtleer. Dann besitzt \hat{F}_n nach dem Satz von Weierstraß auf N ein Minimum, d. h.,

es gibt ein $\bar{m} \in N$, sodass $\hat{F}_n(m) \geq \hat{F}_n(\bar{m})$ für alle $m \in N$ gilt. Wegen $X \subseteq N$ ist $\hat{F}_n(x_1) \geq \hat{F}_n(\bar{m})$. Mit (2.4) folgt somit für alle $m \in M \setminus N$:

$$\hat{F}_n(m) > \hat{F}_n(x_1) \geq \hat{F}_n(\bar{m})$$

und daher $\hat{F}_n(m) \geq \hat{F}_n(\bar{m})$ für alle $m \in M$. Damit besitzt \hat{F}_n ein Minimum auf M . ■

Bemerkung 2.16 Man beachte, dass es sich bei dem Problem (2.3) im Allgemeinen nicht um ein konvexes Optimierungsproblem handelt. Insbesondere ist die Definition einer konvexen Funktion (im klassischen Sinne) zunächst unklar, da der metrische Raum (M, d) nicht mit einer Vektorraumstruktur ausgestattet sein muss. Das folgende Beispiel soll die Problematik illustrieren:

Beispiel 2.17 (Einheitskreis) Wir betrachten den Einheitskreis

$$\mathbb{S}^1 = \{m \in \mathbb{R}^2 \mid \|m\| = 1\} \subseteq \mathbb{R}^2.$$

Für zwei Punkte $m, \tilde{m} \in \mathbb{S}^1$ sei ihr Abstand durch die *Bogenlänge*

$$d : \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \rightarrow [0, \pi], \quad (m, \tilde{m}) \mapsto \arccos(\langle m, \tilde{m} \rangle), \quad (2.5)$$

d. h., durch den von m und \tilde{m} eingeschlossenen Winkel gegeben.

Mit der Metrik (2.5) wird (\mathbb{S}^1, d) zu einem metrischen Raum (siehe [Bal15, Beispiel 4.2.9]). Die Kreislinie trägt allerdings keine natürliche Vektorraumstruktur, sodass (gewichtete) Mittel von Punkten des Kreises nicht erklärt sind. Insbesondere ergibt die klassische Definition von Konvexität einer Funktion $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}$ durch Forderung der Bedingung

$$f(\lambda m + (1 - \lambda)\tilde{m}) \leq \lambda f(m) + (1 - \lambda)f(\tilde{m})$$

für $m, \tilde{m} \in \mathbb{S}^1$, $m \neq \tilde{m}$ und $\lambda \in [0, 1]$ hier keinen Sinn. Die Funktion f ist für $\lambda \neq 0, 1$ in $\lambda m + (1 - \lambda)\tilde{m}$ nicht einmal definiert.

Bemerkung 2.18 (Extrinsische Sichtweise) Man könnte den Einheitskreis in den umgebenden Raum, die Ebene \mathbb{R}^2 , einbetten und in diesem rechnen, da der \mathbb{R}^2 eine Vektorraumstruktur trägt. Ergebnisse auf der Kreislinie erhielte man dann durch Projektionen auf diese. Die Bogenlänge lässt sich jedoch nicht in natürlicher Weise als Metrik auf der ganzen Ebene \mathbb{R}^2 fortsetzen. Um die Ebene zu metrisieren, würde man daher zu einer anderen Metrik übergehen, bspw. zur durch die euklidische Norm induzierten Metrik. Diesen Zugang bezeichnet man auch als *extrinsische Sichtweise*.

Allerdings sind die intrinsische Metrik des Kreises und die euklidische Metrik der Ebene nicht äquivalent in dem Sinne, dass Lösungen des Problems (2.3) und die des Problems

$$\min_{m \in \mathbb{S}^1} \sum_{i=1}^n \|m - x_i\|^p \quad (2.6)$$

für gegebene Punkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^1$, im Allgemeinen nicht miteinander übereinstimmen.

Lösungen des Optimierungsproblems (2.6) nennt man auch *extrinsische Mittelwerte* bzw. *extrinsische p -Mittelwerte*. Für nähere Betrachtungen von diesen und für Vergleiche zwischen extrinsischen und intrinsischen Mittelwerten verweisen wir auf [Hot13].

Im Folgenden wollen wir nur die intrinsische Sichtweise weiter verfolgen. Statt einer Einbettung in den umgebenden Raum, betrachten wir die Sphäre lokal in *Karten*, d. h., wir parametrisieren den zugrunde liegenden Raum (M, d) (hier: den Kreis) lokal auf „geeignete“ Art und Weise.

Beispiel 2.19 (Fortsetzung Beispiel 2.17) Wir parametrisieren die Ebene durch Polarkoordinaten und ordnen jedem Punkt

$$x = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

des Einheitskreises seinen zugehörigen, sog. *Polarwinkel* $\varphi \in [-\pi, \pi)$ zu. Dabei bezeichne x^i die i -te Komponente des Vektors x .

Mithilfe der Polarwinkel können wir den Einheitskreis in kanonischer Weise mit dem Intervall $[-\pi, \pi)$ identifizieren. In dieser Darstellung lässt sich der Abstand zweier Punkte $x, y \in \mathbb{S}^1$ mit Polarwinkeln $\alpha, \beta \in [-\pi, \pi)$ de facto auch über

$$d(x, y) = \begin{cases} |\alpha - \beta|, & |\alpha - \beta| \leq \pi, \\ 2\pi - |\alpha - \beta|, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.8)$$

berechnen, wie aus Abbildung 2.1 hervorgeht. Mit anderen Worten, man kann sich zur Bestimmung des Abstandes zweier Punkte auf der Kreislinie auf die Berechnung des Abstandes zweier Winkel, d. h. reeller Zahlen auf $[-\pi, \pi)$ beschränken. Bei der Addition von Winkeln ist diese im Folgenden stets als Addition von Zahlen modulo 2π zu verstehen, sodass die Summe wieder Element des Intervalls $[-\pi, \pi)$ ist. Sind aus dem Kontext keine Verwechslungen möglich, so schreiben wir, statt $d(x, y)$ auch $d(\alpha, \beta)$ für den Abstand von x, y mit Polarwinkeln α, β und $d(\alpha, \beta)$ gemäß (2.8).

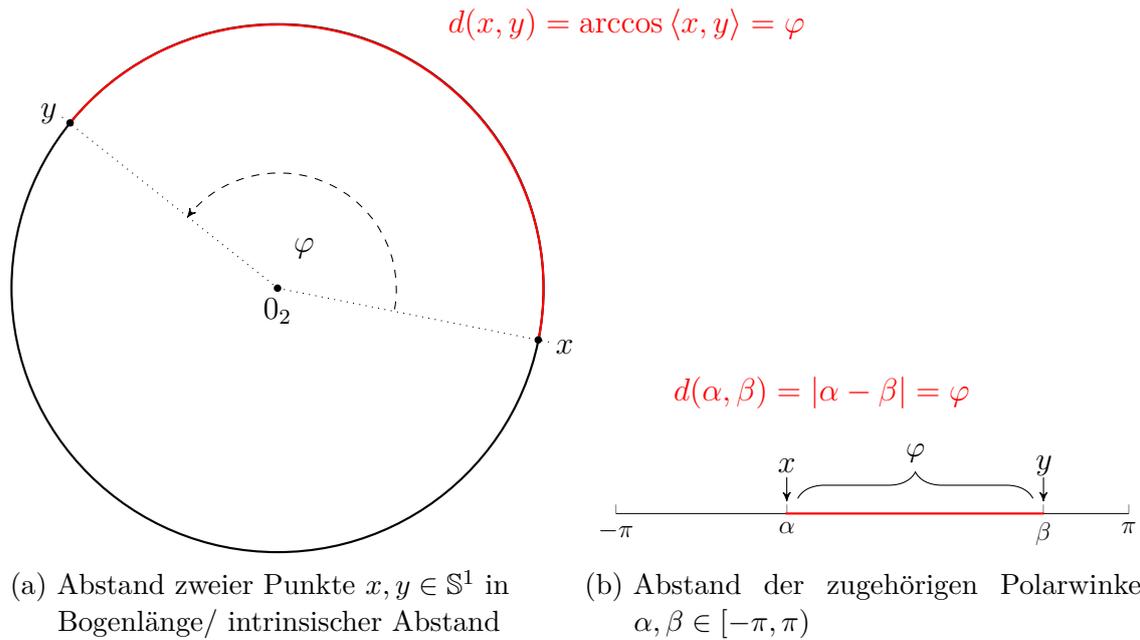


Abbildung 2.1: Abstand von Punkten $x, y \in \mathbb{S}^1$ bez. verschiedener Parametrisierungen

Sind nun Punkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^1$ (bzw. deren Polarwinkel) gegeben, lässt sich mithilfe dieser Parametrisierung die Fréchet-Funktion dieser Punkte, hier zu $p = 2$, auf \mathbb{S}^1 leicht veranschaulichen. Für die Punkte $x_1, x_2, x_3, x_4 \in \mathbb{S}^1$ mit den Polarwinkeln $\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \frac{\pi}{3}, \varphi_3 = \frac{2\pi}{3}, \varphi_4 = -\frac{2\pi}{3}$ ist der Graph von \hat{F}_4 in Abbildung 2.2 zu sehen.

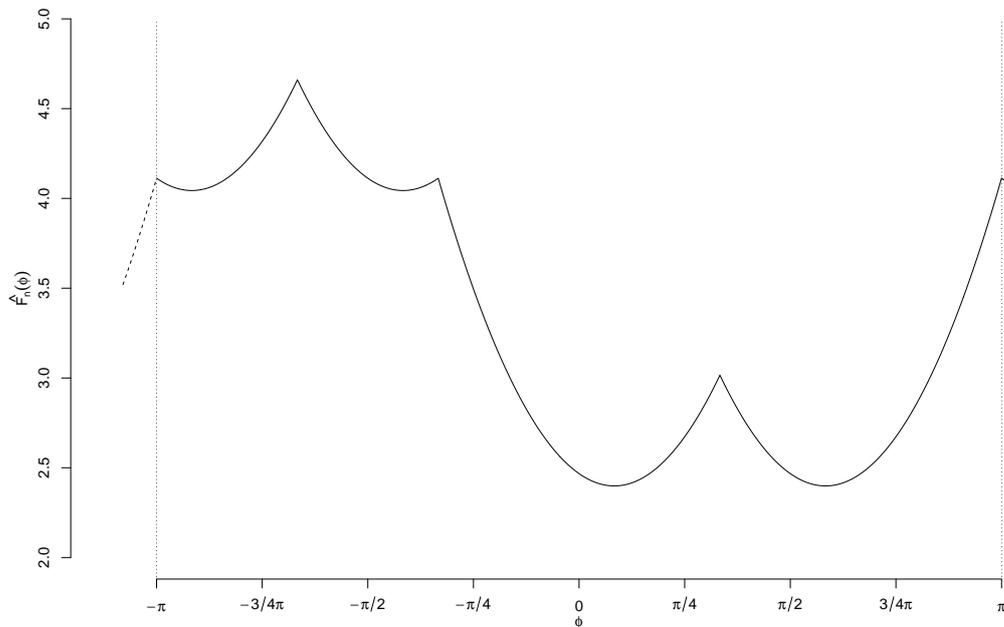


Abbildung 2.2: Fréchet-Funktion zu $p = 2$ für den Einheitskreis bei gegebenen Punkten x_1, x_2, x_3, x_4

Die Fréchet-Funktion \hat{F}_4 ist die Konvexkombination von vier verschiedenen, verschobenen Parabeln, aber offenbar nicht konvex. Insbesondere gibt es lokale Minimalstellen, welche keine globalen Minimalstellen sind; die Fréchet-Mittelwerte sind zudem nicht eindeutig bestimmt. Darüber hinaus besitzt die Funktion bei $\varphi_i \pm \pi \in [-\pi, \pi]$, $i = 1, 2, 3, 4$, Knickstellen, an welchen sie nicht differenzierbar ist.

Bei der Verwendung eines Optimierungsverfahrens ist daher zu berücksichtigen, dass die Voraussetzung der Differenzierbarkeit, wie sie bspw. bei der bekannten α BB-Methode (einem Branch-and-Bound-Verfahren, das einen, mit der Hessematrix der Zielfunktion konstruierten Unterschätzer nutzt, siehe [LS13, Abschnitt 4.6]) notwendig ist, nicht erfüllt ist. In Kapitel 4 stellen wir einen Branch-and-Bound-Ansatz vor, der weder Differenzierbarkeit noch Konvexität der Zielfunktion voraussetzt.

Zunächst wollen wir uns jedoch einem weiteren Beispiel widmen.

Beispiel 2.20 (2-Sphäre) Wir betrachten die Oberfläche der Einheitskugel, die zweidimensionale Einheitsosphäre

$$\mathbb{S}^2 = \{m \in \mathbb{R}^3 \mid \|m\| = 1\} \subseteq \mathbb{R}^3.$$

Analog zum Einheitskreis \mathbb{S}^1 kann man auch hier den Abstand zweier Punkte durch den Arkuskosinus des Skalarproduktes

$$d : \mathbb{S}^2 \times \mathbb{S}^2 \rightarrow [0, \pi], \quad (m, \tilde{m}) \mapsto \arccos(\langle m, \tilde{m} \rangle) \quad (2.9)$$

definieren und (\mathbb{S}^2, d) wird damit zu einem metrischen Raum; die Metrik (2.9) ist dabei die intrinsische Metrik der Einheitsosphäre. Dies gilt allgemein für alle k -dimensionalen Einheitsosphären \mathbb{S}^k (kurz: k -Sphären) mit $k \in \mathbb{N}$ (siehe [Bal15, Beispiel 4.2.9]).

Durch Übergang in ein anderes Koordinatensystem – das Kugelkoordinatensystem – erhält man eine äquivalente Darstellung, welche sich für weitere Berechnungen und Veranschaulichungen gelegentlich als geeigneter erweist. Diese stellen wir im Folgenden vor.

Es seien dazu $m_1, m_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei Punkte. Dann gibt es für jeden dieser Punkte Winkel $\theta_i \in [0, \pi]$, $\varphi_i \in [-\pi, \pi]$, $i = 1, 2$ derart, dass

$$m_i = \begin{pmatrix} \sin \theta_i \cos \varphi_i \\ \sin \theta_i \sin \varphi_i \\ \cos \theta_i \end{pmatrix} \in \mathbb{S}^2, \quad i = 1, 2 \quad (2.10)$$

gilt. Dabei wird das Tupel (θ_i, φ_i) auch als *Winkelkoordinaten* des Punktes m_i bezeichnet. Abbildung 2.3 veranschaulicht diese Darstellung.

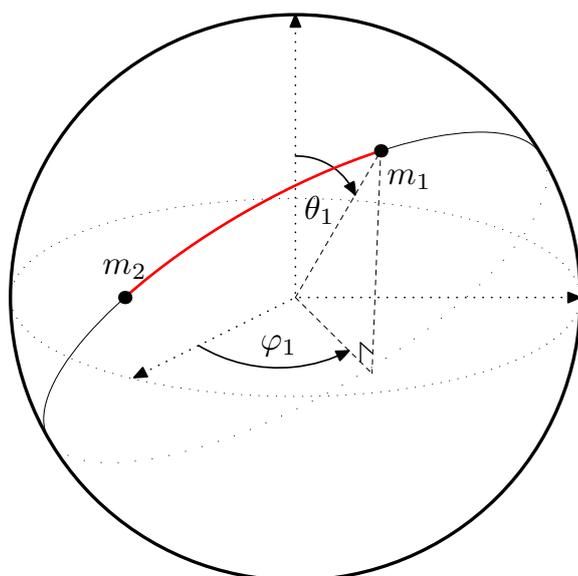


Abbildung 2.3: Kugelkoordinaten eines Punktes $m_1 = (\theta_1, \varphi_1) \in \mathbb{S}^2$, sowie dessen Abstand $d(m_1, m_2)$ (rot) in Bogenlänge zu $m_2 \in \mathbb{S}^2$

Auf diese Weise lässt sich eine Zuordnung $m \in \mathbb{S}^2 \mapsto (\theta, \varphi) \in [0, \pi] \times [-\pi, \pi)$ definieren, welche gemeinhin auch als „Darstellung eines Einheitsvektors in Kugelkoordinaten“ bekannt ist. Ein *Einheitsvektor* sei dabei ein Vektor $m \in \mathbb{R}^k$ mit $\|m\| = 1$, $k \in \mathbb{N}$. Man beachte, dass die so definierte Darstellung im Allgemeinen nicht eindeutig ist – für $m = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}^\top$ ist $\theta = \frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{2}$ und der Winkel φ ist beliebig wählbar.

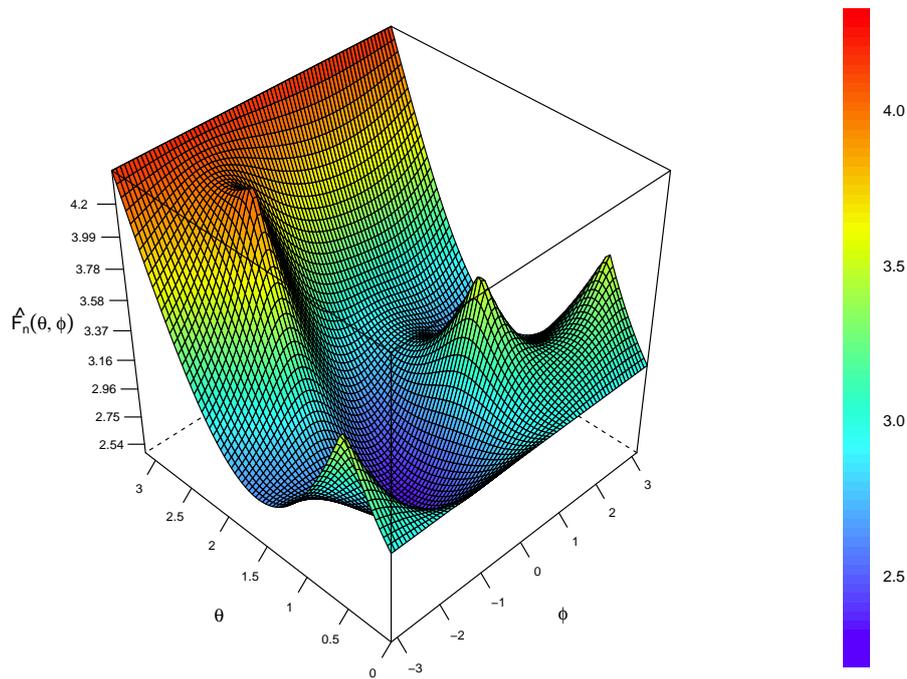
Betrachten wir nun das Skalarprodukt zweier Vektoren $m_1, m_2 \in \mathbb{S}^2$ in der Darstellung aus (2.10), so ergibt sich (mithilfe eines Additionstheorems):

$$\begin{aligned} \langle m_1, m_2 \rangle &= (\sin \theta_1 \cos \varphi_1)(\sin \theta_2 \cos \varphi_2) + (\sin \theta_1 \sin \varphi_1)(\sin \theta_2 \sin \varphi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2 \\ &= (\sin \theta_1 \sin \theta_2)(\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2 \\ &= \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2. \end{aligned}$$

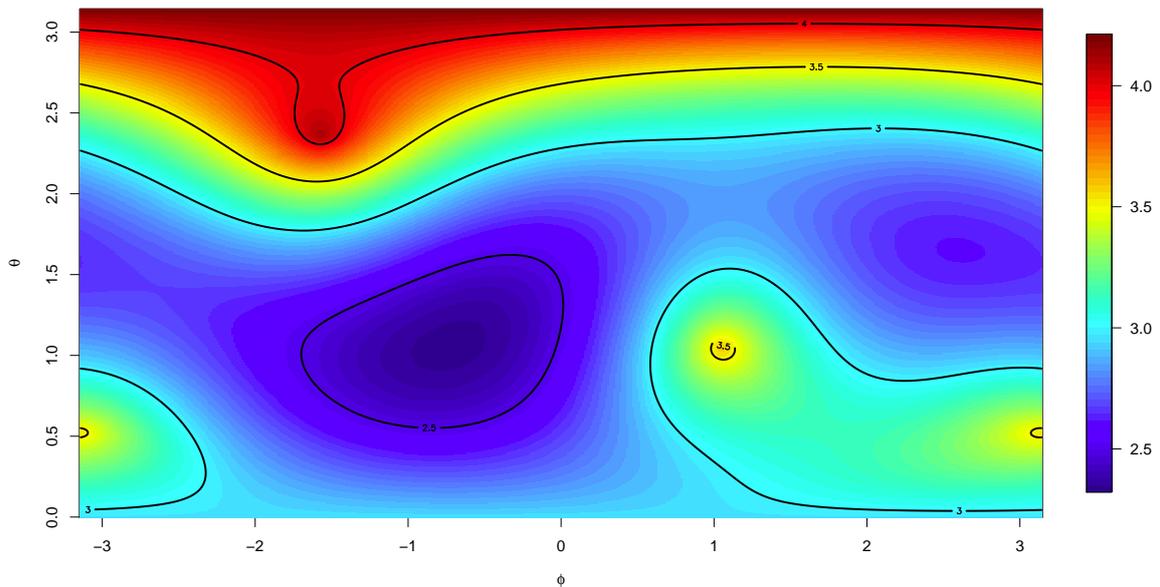
Wir können demnach den Abstand zweier Punkte $m_1, m_2 \in \mathbb{S}^2$ auch durch ihre Winkelkoordinaten beschreiben vermöge der Vorschrift:

$$\begin{aligned} d : ([0, \pi] \times [-\pi, \pi))^2 &\rightarrow [0, \pi], \\ \left(\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \varphi_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \theta_2 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \right) &\mapsto \arccos \left(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \right). \end{aligned}$$

Es seien nun die Punkte $x_1, x_2, x_3, x_4 \in \mathbb{S}^2$ mit den Winkelkoordinaten $(\theta_1, \varphi_1) = (0, 0)$, $(\theta_2, \varphi_2) = (\frac{5}{6}\pi, 0)$, $(\theta_3, \varphi_3) = (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$ und $(\theta_4, \varphi_4) = (\frac{2}{3}\pi, -\frac{2}{3}\pi)$ gegeben. Der Graph von \hat{F}_4 für $p = 2$ ist in Abbildung 2.4a als Oberflächenplot bzw. in Abbildung 2.4b als Niveaulinienplot abgebildet.



(a) Graph der Zielfunktion \hat{F}_4 , S^2 parametrisiert über dem Rechteck $[0, \pi] \times [-\pi, \pi]$



(b) Niveaulinienplot der Zielfunktion \hat{F}_4

Abbildung 2.4: Graph der Fréchet-Funktion \hat{F}_4 für die Einheitskugel bei den gegebenen Punkten x_1, x_2, x_3, x_4 , $p = 2$

Auch hier ist klar erkennbar, dass die Zielfunktion, parametrisiert als Funktion von $[0, \pi] \times [-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{R}$, nicht konvex und an diskreten Stellen nicht differenzierbar ist. Ferner gibt es auch hier lokale Minimalstellen, welche keine globalen Minimalstellen sind (vgl. Abbildung 2.4b etwa bei $(\theta \ \varphi) \approx (1,6 \ 2,6)$). Aus diesem Grund werden wir zur Bestimmung von globalen Minimalstellen nicht auf lokale Optimierungsverfahren zurückgreifen. Viel mehr motiviert dies die Verwendung eines Branch-and-Bound-Verfahrens zur Ermittlung der Fréchet-Mittelwerte auf Sphären.

Bemerkung 2.21 Für die Formulierung eines Branch-and-Bound-Algorithmus zur Lösung des Optimierungsproblems (2.3) ist es notwendig, Unterschätzer bzw. untere Schranken für die Fréchet-Funktion zu konstruieren. Es genügt, eine untere Schranke g_i von $d^p(x_i, \cdot)$ für jeden gegebenen Punkt x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ auf einem entsprechenden Bereich $\tilde{M} \subseteq M$ zu konstruieren. Aufgrund von

$$\hat{F}_n(m) \geq \min_{\tilde{m} \in \tilde{M}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_i, \tilde{m}) \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \min_{\tilde{m} \in \tilde{M}} d^p(x_i, \tilde{m}) \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i$$

für alle $m \in \tilde{M}$, erhält man eine untere Schranke für \hat{F}_n durch $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i$.

Es ist sogar ausreichend, eine untere Schranke g_i von $d(x_i, \cdot)$ für $i = 1, 2, \dots, n$ zu konstruieren, sofern diese nichtnegativ ist. In diesem Falle ist, aufgrund der Monotonie von $x \mapsto x^p$ auf \mathbb{R}_+ , durch $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i^p$ eine untere Schranke von \hat{F}_n gegeben.

2.3 Unterschätzer mit Lipschitz-Konstante

Die Konstruktion eines Unterschätzers kann mitunter sehr elementar sein. Ist für die Zielfunktion eine Lipschitz-Konstante bekannt, so kann mithilfe dieser ein Unterschätzer konstruiert werden. Dies betrachten wir im folgenden Abschnitt genauer. Dazu sei der zugrunde liegende metrische Raum M stets beschränkt mit Durchmesser D .

Definition 2.22 (Lipschitz-stetig) Es sei $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion. Gibt es eine reelle Zahl $L > 0$, sodass für alle $m, \tilde{m} \in M$ die Beziehung

$$|f(m) - f(\tilde{m})| \leq L d(m, \tilde{m})$$

gilt, so heißt f *Lipschitz-stetig* mit *Lipschitz-Konstante* L .

Satz 2.23 Die Zielfunktion f des Problems (2.1) sei Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante L und $\tilde{M} \subseteq M$ sei eine nichtleere Teilmenge von M , sowie $\tilde{m} \in \tilde{M}$. Dann ist die Funktion

$$g : \tilde{M} \rightarrow \mathbb{R}, \quad m \mapsto f(\tilde{m}) - L d(m, \tilde{m})$$

ein Unterschätzer von f auf \tilde{M} .

Beweis: Es sei $m \in \tilde{M}$ ein beliebiger Punkt. Dann gilt:

$$f(\tilde{m}) - f(m) \leq |f(\tilde{m}) - f(m)| \leq L d(m, \tilde{m})$$

und somit $g(m) = f(\tilde{m}) - L d(m, \tilde{m}) \leq f(m)$, was die Behauptung zeigt. \blacksquare

Eingehendere Informationen zur Theorie der „Lipschitz-Optimierung“ finden sich in der Literatur. Wir empfehlen dazu beispielsweise [HP95, S. 407 ff.] und [Pin96, Abschnitt 1.1.4].

Für die in Abschnitt 2.2 vorgestellte Fréchet-Funktion können wir mithilfe ihrer Lipschitz-Konstanten ebenfalls einen Unterschätzer konstruieren, wie das folgende Resultat zeigt:

Satz 2.24 *Es seien $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$ gegebene Punkte, $p \in \mathbb{R}_+$, \hat{F}_n die Fréchet-Funktion, wie in (2.2) und $D = \text{diam}(M)$. Dann ist \hat{F}_n Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante pD^{p-1} . Insbesondere gilt für $m, \tilde{m} \in M$ die folgende Ungleichung:*

$$\hat{F}_n(m) \geq \hat{F}_n(\tilde{m}) - pD^{p-1} d(m, \tilde{m}). \quad (2.11)$$

Beweis: Für je zwei nichtnegative Zahlen $a, b \in \mathbb{R}_+$ mit $a \leq b$ gilt

$$b^p - a^p = \int_a^b pt^{p-1} dt \leq p(b-a)b^{p-1}.$$

Folglich gilt für zwei beliebige nichtnegative Zahlen $a, b \in \mathbb{R}_+$ die Ungleichung

$$|b^p - a^p| \leq p|b-a| \max\{a, b\}^{p-1}. \quad (2.12)$$

Es seien nun $x, m, \tilde{m} \in M$. Nach der umgekehrten Dreiecksungleichung gilt

$$|d(x, m) - d(x, \tilde{m})| \leq d(m, \tilde{m}). \quad (2.13)$$

Dann folgt aus (2.12) und (2.13) die Ungleichung

$$\begin{aligned} d^p(x, \tilde{m}) - d^p(x, m) &\leq |d^p(x, m) - d^p(x, \tilde{m})| \\ &\leq p|d(x, m) - d(x, \tilde{m})| \max\{d(x, m), d(x, \tilde{m})\}^{p-1} \\ &\leq p d(m, \tilde{m}) D^{p-1}, \end{aligned}$$

wobei in das letzte Ungleichheitszeichen die Abschätzung $\max\{d(x, m), d(x, \tilde{m})\} \leq D$ eingeht. Durch Summation folgt

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_i, m) \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^p(x_i, \tilde{m}) - pD^{p-1} d(m, \tilde{m}),$$

was die Behauptung zeigt. \blacksquare

Die Tatsache, dass \hat{F}_n eine nichtnegative Funktion ist, zieht das folgende Resultat nach sich.

Folgerung 2.25 *Mit den Voraussetzungen von Satz 2.24 gilt für $m, \tilde{m} \in M$ die Ungleichung*

$$\hat{F}_n(m) \geq \max \left\{ \hat{F}_n(\tilde{m}) - pD^{p-1} d(m, \tilde{m}), 0 \right\}.$$

Insbesondere ist damit für jeden Punkt $\tilde{m} \in M$ die Funktion

$$g : M \rightarrow \mathbb{R}, \quad m \mapsto \max \left\{ \hat{F}_n(\tilde{m}) - pD^{p-1} d(m, \tilde{m}), 0 \right\}$$

ein Unterschätzer von \hat{F}_n auf M .

Durch Minimieren dieses Unterschätzers erhält man eine untere Schranke für den Minimalwert der Fréchet-Funktion auf einer Teilmenge von M . Leider ist dieser Lipschitz-Unterschätzer, insbesondere für Bereiche mit großem Durchmesser D , nicht besonders genau, wie das nachfolgende Beispiel verdeutlicht.

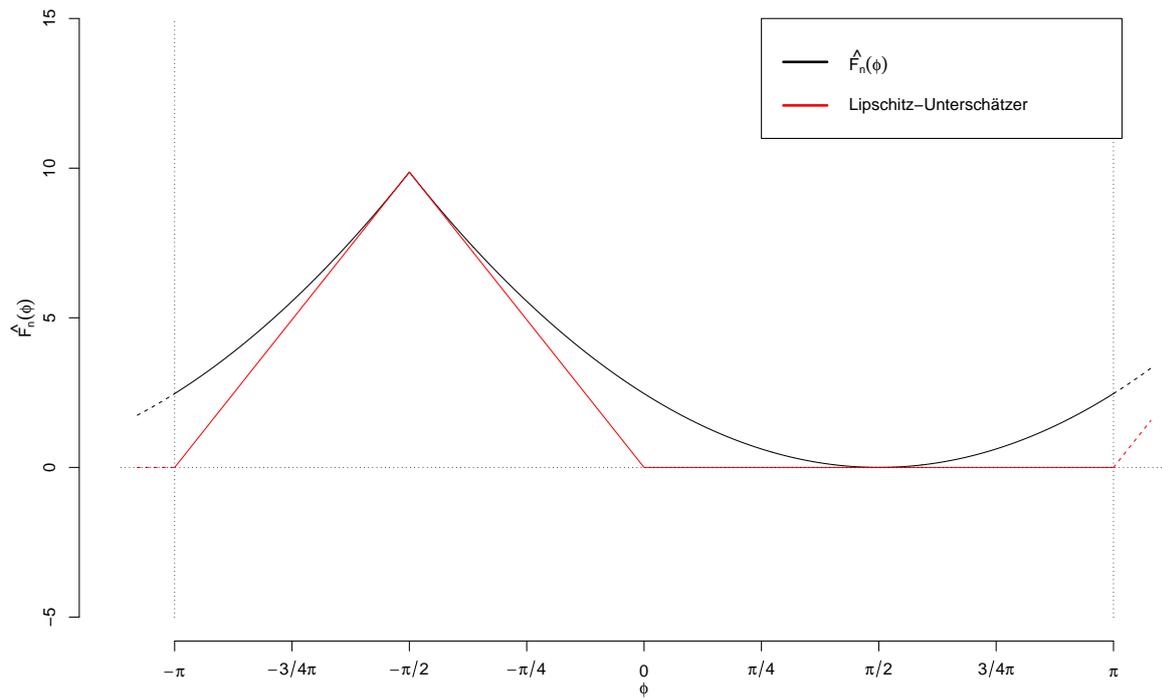
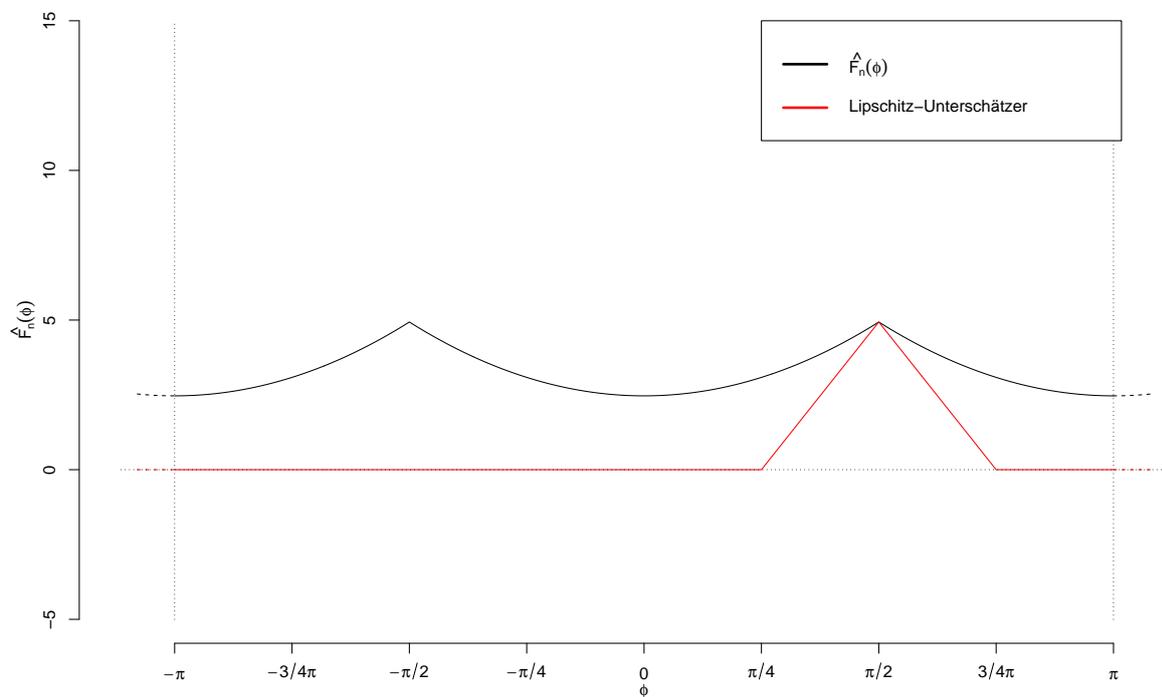
Beispiel 2.26 (Einheitskreis) Für den Einheitskreis (\mathbb{S}^1, d) mit der intrinsischen Metrik d gilt $D = \pi$. Mit anderen Worten, der größte Abstand in Bogenlänge zwischen zwei Punkten x, y auf dem Kreis beträgt π . Dies ist genau dann der Fall, wenn sich die Punkte *diametral* gegenüber liegen, d. h. falls $x = -y$ gilt. In diesem Fall unterscheiden sich die Polarwinkel genau um π (gerechnet in $[-\pi, \pi)$).

Es sei nun der Einheitskreis durch $[-\pi, \pi)$ parametrisiert und $p = 2$. Ferner sei $x \in \mathbb{S}^1$ mit Polarwinkel $\varphi \in [-\pi, \pi)$ gegeben. Für jeden Referenzpunkt $\tilde{m} \in \mathbb{S}^1$ ist dann die Funktion

$$g_{\tilde{m}} : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}, \quad m \mapsto \max \left\{ \hat{F}_n(\tilde{m}) - 2\pi d(m, \tilde{m}), 0 \right\}$$

ein Unterschätzer für \hat{F}_n auf \mathbb{S}^1 . In Abbildung 2.5 sind die Graphen von zwei Fréchet-Funktionen für unterschiedliche Datenpunkte x_i und verschiedene Referenzpunkte \tilde{m} zu sehen. Offenbar hängt der maximale Abstand des Unterschätzers zur Zielfunktion maßgeblich von der Wahl des Referenzpunktes ab – ein Parameter, der bei der Formulierung eines Branch-and-Bound-Verfahrens vorher zu bestimmen wäre. Vernachlässigen wir dies, so kann der Abstand zwischen Unterschätzer und Fréchet-Funktion sehr groß werden.

Ist die Approximation der Fréchet-Funktion durch den Lipschitz-Unterschätzer in Abbildung 2.5a noch relativ gut, die untere Schranke für den Minimalwert sogar scharf, so ist dies in Abbildung 2.5b mitnichten der Fall – die Differenz zwischen Minimalwert der Fréchet-Funktion und Unterschätzer in der Minimalstelle beträgt $\frac{\pi^2}{4} \approx 2,467$. Der Lipschitz-Unterschätzer bietet demnach im Allgemeinen nur eine sehr ungenaue untere Schranke für den Minimalwert des Problems (2.3).

(a) Datenpunkte: $x_1 = \frac{\pi}{2}$, Referenzpunkt: $\tilde{m} = -\frac{\pi}{2}$ (b) Datenpunkte: $x_1 = \frac{\pi}{2}, x_2 = -\frac{\pi}{2}$, Referenzpunkt: $\tilde{m} = \frac{\pi}{2}$ Abbildung 2.5: Fréchet-Funktion und Lipschitz-Unterschätzer für verschiedene Datenpunkte x_i und Referenzpunkte $\tilde{m} \in \mathbb{S}^2$

Dies soll uns dazu motivieren, im Folgenden eine untere Schranke der Fréchet-Funktion zu konstruieren, die für einen gegebenen Datenpunkt ebenfalls exakt ist und darüber hinaus für mehrere gegebene Datenpunkte eine genauere Abschätzung als der Lipschitz-Unterschätzer liefert. Die Güte der Unterschätzung nach der hier vorgestellten Methode für einen Branch-and-Bound-Algorithmus demonstrieren wir anhand eines Beispiels in Kapitel 5 abschließend noch einmal genauer. Den Unterschätzer als solchen werden wir im Folgenden jedoch nicht weiter betrachten.

3 Intrinsische Abstände auf Sphären

Dieses Kapitel soll einige Eigenschaften der intrinsischen Metrik auf Sphären vorstellen, welche wir später für die Konstruktion eines Unterschätzers der Fréchet-Funktion benötigen. Diese werden uns insbesondere dabei helfen, gegeben einen Datenpunkt, eine scharfe untere Schranke für die Fréchet-Funktion auf dem Einheitskreis und der Kugeloberfläche (bzw. einem Teilgebiet davon) anzugeben. Die grundlegende Idee besteht darin, zuerst für einen gegebenen Punkt $x \in M$ und eine Teilmenge $S \subseteq M$ eines metrischen Raumes (M, d) , den Abstand $d(x, S)$ zu berechnen. Durch Summation über alle Datenpunkte erhält man (siehe Bemerkung 2.21) eine untere Schranke für den Minimalwert der Fréchet-Funktion auf S .

Zunächst benötigen wir noch zwei vorbereitende Hilfsresultate.

Lemma 3.1 *Es seien $I = [\alpha, \beta] \subseteq \mathbb{R}$ ein abgeschlossenes Intervall und eine Zerlegung $\alpha = \alpha_0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_{\ell-1} < \alpha_\ell = \beta$ des Intervalls I in ℓ Teilintervalle gegeben, $\ell \in \mathbb{N}$. Weiter sei $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion mit der Eigenschaft, dass f monoton auf allen Teilintervallen $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$ für $i = 0, 1, \dots, \ell - 1$ ist. Dann ist*

$$\min_{x \in I} f(x) = \min \{f(\alpha_i) \mid i = 0, 1, \dots, \ell\}.$$

Beweis: Angenommen, es gibt ein

$$\bar{x} \in I \setminus \{\alpha_i \mid i = 0, 1, \dots, \ell\} \quad \text{mit} \quad f(\bar{x}) < \min \{f(\alpha_i) \mid i = 0, 1, \dots, \ell\}.$$

Dann ist \bar{x} in einem Intervall der Form $[\alpha_j, \alpha_{j+1}]$ enthalten für ein $j \in \{0, 1, \dots, \ell - 1\}$. Nach Voraussetzung ist f auf $[\alpha_j, \alpha_{j+1}]$ monoton. Angenommen, f ist monoton wachsend auf $[\alpha_j, \alpha_{j+1}]$. Aufgrund von $\alpha_j < \bar{x}$ ist dann $f(\alpha_j) \leq f(\bar{x})$ und es folgt

$$f(\alpha_j) \leq f(\bar{x}) < \min \{f(\alpha_i) \mid i = 0, 1, \dots, \ell\}, \tag{3.1}$$

ein Widerspruch. Ist f auf $[\alpha_j, \alpha_{j+1}]$ monoton fallend, so erhalten einen analogen Widerspruch wie in (3.1) durch Betrachtung von α_{j+1} statt α_j . ■

Allgemein würde man von einer Metrik auf der k -Sphäre erwarten, dass diese invariant unter orthogonalen Transformationen, d. h. Drehungen und Spiegelungen, ist – dies sind die Isometrien der \mathbb{S}^k (vgl. [Ber96, Proposition 18.5.2]). Dass diese Eigenschaft für die intrinsische Metrik von k -Sphären gilt, zeigt das folgende Lemma.

Lemma 3.2 *Es seien $x, y \in \mathbb{S}^k$ zwei Punkte der k -dimensionalen Einheitssphäre, $k \in \mathbb{N}$ und d der intrinsische Abstand darauf. Ferner sei $R \in \mathbb{R}^{(k+1) \times (k+1)}$ eine orthogonale Matrix, d. h., eine Matrix mit $R^\top = R^{-1}$. Dann gilt $d(x, y) = d(Rx, Ry)$. Insbesondere ist der Abstand in Bogenlänge invariant unter Rotationen.*

Beweis: Für $x, y \in \mathbb{R}^{k+1}$ ist deren Skalarprodukt durch $\langle x, y \rangle = x^\top y$ gegeben. Folglich ist

$$\begin{aligned} d(Rx, Ry) &= \arccos \langle Rx, Ry \rangle = \arccos \left((Rx)^\top Ry \right) = \arccos \left(x^\top (R^\top R) y \right) \\ &= \arccos \left(x^\top y \right) = \arccos \langle x, y \rangle = d(x, y). \end{aligned}$$

■

3.1 Eigenschaften der Bogenlänge auf dem Einheitskreis

Wir betrachten den Einheitskreis \mathbb{S}^1 , parametrisiert durch das Intervall $[-\pi, \pi)$ und eine kompakte, zusammenhängende Teilmenge $S \subseteq \mathbb{S}^1$ der Kreislinie. Ferner sei ein Punkt $x \in \mathbb{S}^1$ mit Polarwinkel φ gegeben. Das folgende Resultat gibt Aufschluss über die Lage von Minimalstellen der Abstandsfunktion auf dem Einheitskreis.

Lemma 3.3 *Der Einheitskreis \mathbb{S}^1 sei durch $[-\pi, \pi)$ parametrisiert und $S \subseteq \mathbb{S}^1$ sei eine kompakte, zusammenhängende Teilmenge des Kreises. Ferner sei $x \in \mathbb{S}^1$ mit Polarwinkel $\varphi \in [-\pi, \pi)$ gegeben. Dann gelten für den Abstand*

$$g_x = d(x, S) = \min \left\{ d(x, s) \mid s \in S \right\} \quad (3.2)$$

die folgenden Aussagen:

(1) Ist $S = \mathbb{S}^1$, so ist $d(x, S) = 0$.

(2) Ist $S \subsetneq \mathbb{S}^1$ durch das Intervall $[\alpha, \beta] \subseteq [-\pi, \pi)$ mit $\alpha \leq \beta$ parametrisiert, so gilt

$$d(x, S) = d(\varphi, [\alpha, \beta]) = \begin{cases} 0, & \varphi \in [\alpha, \beta], \\ \min\{d(\varphi, \alpha), d(\varphi, \beta)\}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Beweis: Die Aussage (1) ist einfach einzusehen. Man beachte, dass das Minimum in (3.2) tatsächlich angenommen wird, da die Metrik d stetig und S kompakt ist.

Das erste Gleichheitszeichen in (3.3) folgt aus (2.8). Ist $\varphi \in [\alpha, \beta]$, so ist offenbar $d(\varphi, [\alpha, \beta]) = d(\varphi, \varphi) = 0$ die beste untere Schranke für $d(\varphi, \xi)$ für $\xi \in [\alpha, \beta]$. Andernfalls unterscheiden wir zwei Fälle:

- (a) Ist der zu x diametrale Punkt mit Polarwinkel $\psi = \varphi + \pi \in [-\pi, \pi)$ im Gebiet S und damit $\psi \in [\alpha, \beta]$ enthalten, so ist $d(\varphi, \cdot)$ auf $[\alpha, \psi]$ monoton wachsend und auf $[\psi, \beta]$ monoton fallend (vgl. (2.8)). Nach Lemma 3.1 wird das Minimum $\min_{\xi \in [\alpha, \beta]} d(\varphi, \xi)$ entweder auf dem Rand des Kompaktums $[\alpha, \beta]$ angenommen oder in ψ . Wegen

$$\min \{d(\varphi, \alpha), d(\varphi, \beta)\} \leq \pi = d(\varphi, \psi)$$

ist letzterer Fall irrelevant.

- (b) Gilt für den Polarwinkel ψ des zu x diametralen Punktes die Bedingung $\psi \notin [\alpha, \beta]$, so ist $d(\varphi, \cdot)$ auf $[\alpha, \beta]$ monoton und nimmt sein Minimum (wegen Lemma 3.1) auf dem Rand des Intervalls an.

Damit ist $\min_{\xi \in [\alpha, \beta]} d(\varphi, \xi) = \min\{d(\varphi, \alpha), d(\varphi, \beta)\}$. Insgesamt gilt somit:

$$d(\varphi, [\alpha, \beta]) = \min_{\xi \in [\alpha, \beta]} d(\varphi, \xi) = \begin{cases} 0, & \varphi \in [\alpha, \beta], \\ \min\{d(\varphi, \alpha), d(\varphi, \beta)\}, & \text{sonst.} \end{cases}$$

■

Bemerkung 3.4 Die Annahme in Lemma 3.3 (2), dass S durch $[\alpha, \beta] \subseteq [-\pi, \pi)$ mit $\alpha \leq \beta$ parametrisiert ist, ist keine Einschränkung. Ist $S \subsetneq \mathbb{S}^1$ kompakt und zusammenhängend, so zeichnet S einen Kreisbogen der Länge kleiner 2π aus, welcher durch ein abgeschlossenes Intervall $[\alpha, \beta] \subseteq \mathbb{R}$ mit $\alpha \leq \beta$ und $\beta - \alpha < 2\pi$ parametrisiert werden kann. Ist $[\alpha, \beta] \not\subseteq [-\pi, \pi)$, so können wir S durch Rotation mit der Matrix

$$R = \begin{pmatrix} -\cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix}$$

in die Menge $RS = \{Rs \mid s \in S\}$ überführen. Für einen Punkt $s \in S$ mit Polarwinkel $\varphi \in [\alpha, \beta]$ hat der rotierte Punkt

$$\begin{aligned} \tilde{s} = Rs &= \begin{pmatrix} -\cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \alpha \cos \varphi - \sin \alpha \sin \varphi \\ -\sin \alpha \cos \varphi + \cos \alpha \sin \varphi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\cos(\varphi - \alpha) \\ -\sin(\varphi - \alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi - \alpha - \pi) \\ \sin(\varphi - \alpha - \pi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

einen Polarwinkel $\tilde{\varphi} = \varphi - \alpha - \pi \in [-\pi, \beta - \alpha - \pi]$ und aufgrund von $\beta - \alpha < 2\pi$ folgt $\tilde{\varphi} \in [-\pi, \pi)$. Die letzten beiden Gleichheitszeichen in (3.4) folgen aus Additionstheoremen

und Symmetrieeigenschaften der trigonometrischen Funktionen, siehe [BSMM08, S. 80]. Die Menge RS ist dann ein Kreisbogen, dessen Parametrisierung eine Teilmenge des Intervalls $[-\pi, \pi)$ ist und für jeden Punkt $x \in S$ gilt $d(x, S) = d(Rx, RS)$.

Bemerkung 3.5

- (1) Für einen gegebenen Punkt $x \in \mathbb{S}^1$ ist der in (3.3) berechnete Abstand eine scharfe untere Schranke der zugehörigen Fréchet-Funktion, d. h., die beste untere Schranke für \hat{F}_1 .
- (2) Sind $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^1$, so erhalten wir durch

$$g = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_{x_i}^p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(d(x_i, S) \right)^p \quad (3.5)$$

mit g_{x_i} wie in (3.2) für $i = 1, 2, \dots, n$, eine untere Schranke für \hat{F}_n auf einem zusammenhängenden Kompaktum $S \subseteq \mathbb{S}^1$ (aufgrund der Nichtnegativität von g_{x_i}). Mithilfe einer Parametrisierung von S und der Polarwinkel $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ lässt sich (3.5) auch mittels (3.3) berechnen. Die so konstruierte untere Schranke ist für $n \geq 2$ im Allgemeinen jedoch nicht mehr scharf, wie Beispiel 3.6 zeigt.

Beispiel 3.6 Es seien die Punkte $x_1, x_2 \in \mathbb{S}^1$ mit Polarwinkeln $\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \pi$ gegeben, sowie $p = 2$. Dann ist die untere Schranke g von \hat{F}_2 auf $[-\pi, \pi)$ gemäß (3.5) gleich Null, denn die Winkel φ_1, φ_2 sind Elemente des Intervalls $[-\pi, \pi)$. Die Fréchet-Mittelwerte des zugehörigen Problems haben jedoch die Polarwinkel $\pm \frac{\pi}{2}$; der zugehörige Minimalwert beträgt $\frac{\pi^2}{4}$. Die untere Schranke g ist demnach für mehr als einen gegebenen Punkt im Allgemeinen nicht mehr scharf.

3.2 Sphärische Geometrie auf der Einheitskugel

In diesem Abschnitt betrachten wir die zweidimensionale Einheitssphäre \mathbb{S}^2 . Dabei stellen wir einige ausgewählte, grundlegende Definitionen und Resultate der sphärischen Trigonometrie vor und leiten eine untere Schranke für die Abstandsfunktion auf der Kugeloberfläche her.

3.2.1 Großkreise und Kugeldreiecke

Im Hinblick auf die Formulierung eines Branch-and-Bound-Verfahrens auf der Kugeloberfläche ist es notwendig, eine Struktur auf dieser einzuführen, um sie in verschiedene Teilbereiche zu unterteilen. Dazu triangulieren wir die Kugeloberfläche, d. h. wir unterteilen sie in sphärische Dreiecke. Für dieses Konzept benötigen wir zunächst die Definition eines Großkreises, welche wir im Folgenden einführen.

Definition 3.7 (Großkreis) Es sei \mathbb{S}^2 die zweidimensionale Einheitskugel und $E \subseteq \mathbb{R}^3$ eine Ebene des \mathbb{R}^3 , die den Ursprung enthalte. Die Menge $\Gamma_E = E \cap \mathbb{S}^2$ nennen wir einen *Großkreis* der Einheitskugel.

Bemerkung 3.8

- (1) Geometrisch gesehen ist ein Großkreis ein Kreis auf der Kugeloberfläche größtmöglicher Länge (bspw. der Äquator); der Umfang beträgt 2π . Kreise auf der Sphäre mit einer Länge kleiner als 2π heißen *Kleinkreise*. Diese sind für uns fortan allerdings von geringem Interesse.
- (2) Für jede Ebene E des \mathbb{R}^3 gibt es stets einen *Normaleneinheitsvektor* n_E , d. h., einen Vektor der Länge eins, welcher senkrecht auf E steht. Die Ebene ist in diesem Fall auch durch

$$E = \left\{ x \in \mathbb{R}^3 \mid \langle x, n_E \rangle = x^\top n_E = 0 \right\}$$

gegeben. Auf diese Weise können wir jeden Großkreis Γ_E durch einen Normaleneinheitsvektor n_E repräsentieren. Dieser ist bis auf sein Vorzeichen, d. h. Multiplikation mit -1 , eindeutig bestimmt.

- (3) Für zwei linear unabhängige Vektoren $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^3$ ist durch deren normiertes Kreuzprodukt $\frac{d_1 \times d_2}{\|d_1 \times d_2\|}$ ein Normaleneinheitsvektor der Ebene $\text{span}\{d_1, d_2\}$ gegeben.

Satz 3.9 Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei gegebene Punkte und

$$\gamma : [-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{S}^2, \quad \varphi \mapsto \cos \varphi d_1 + \sin \varphi d_2.$$

Das Bild $\gamma([-\pi, \pi))$ der Kurve γ ist dann und nur dann ein Großkreis, wenn $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$ gilt. In diesem Fall stimmt der von der Ebene $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ induzierte Großkreis Γ_E mit dem Bild der Kurve $\gamma([-\pi, \pi))$ überein.

Beweis: Es sei $\gamma([-\pi, \pi))$ ein Großkreis. Dann gilt für alle $\varphi \in [-\pi, \pi)$, dass

$$\begin{aligned} 1 &= \|\gamma(\varphi)\|^2 = \|\cos \varphi d_1 + \sin \varphi d_2\|^2 \\ &= (\cos^2 \varphi) \|d_1\|^2 + (\sin^2 \varphi) \|d_2\|^2 + 2 \sin \varphi \cos \varphi \langle d_1, d_2 \rangle \\ &= 1 + 2 \sin \varphi \cos \varphi \langle d_1, d_2 \rangle. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Folglich muss $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$ gelten.

Es gelte umgekehrt $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$. Wir zeigen, dass dann $\gamma([-\pi, \pi)) = E \cap \mathbb{S}^2$ mit $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ gilt. Dass für $\varphi \in [-\pi, \pi)$ der Vektor $\gamma(\varphi)$ in $E \cap \mathbb{S}^2$ liegt, folgt unmittelbar aus der Definition von γ und Gleichung (3.6). Sei umgekehrt $x \in E \cap \mathbb{S}^2$. Dann

gibt es ein $\lambda = \begin{pmatrix} \lambda^1 & \lambda^2 \end{pmatrix}^\top \in \mathbb{R}^2$ mit $x = \lambda^1 d_1 + \lambda^2 d_2$ und es gilt

$$1 = \|x\|^2 = (\lambda^1)^2 \|d_1\|^2 + (\lambda^2)^2 \|d_2\|^2 + 2\lambda^1\lambda^2 \langle d_1, d_2 \rangle = (\lambda^1)^2 + (\lambda^2)^2. \quad (3.7)$$

Dann gibt es ein $\varphi \in [-\pi, \pi)$ mit $\lambda^1 = \cos \varphi$, $\lambda^2 = \sin \varphi$, also $x \in \gamma([-\pi, \pi))$. ■

Bemerkung 3.10

- (1) Durch Satz 3.9 wird uns eine Möglichkeit gegeben, jeden Großkreis zu parametrisieren.
- (2) Der Großkreis Γ_E zur Ebene $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ mit linear unabhängigen Vektoren $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$, wird durch die Vektoren d_1, d_2 in zwei Teile geteilt, die wir *Großkreisbögen* nennen. Die Parametrisierung des kürzeren der beiden Bögen bezeichnen wir als die *Abstandskurve* von d_1 nach d_2 . Insbesondere realisiert die Länge dieses Großkreisbogens den Abstand $d(d_1, d_2)$.
- (3) Man beachte, dass im Falle linear unabhängiger Vektoren d_1, d_2 , die Abstandskurve eindeutig bestimmt ist. Andernfalls hätten beide Großkreisbögen aus (2) die Länge π und die Punkte d_1, d_2 würden sich diametral gegenüber liegen (d. h., es gilt $d_1 = -d_2$), im Widerspruch zur linearen Unabhängigkeit.
- (4) Liegen sich die Punkte d_1, d_2 auf der Kugel diametral gegenüber, so sind sie linear abhängig. In diesem Fall gibt es unendlich viele Ursprungsebenen, die beide Vektoren enthalten und daher auch unendlich viele Abstandskurven von d_1 nach d_2 .

Definition 3.11 (Kugeldreieck) Es seien $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ drei linear unabhängige Vektoren (d. h., d_1, d_2, d_3 liegen nicht alle auf demselben Großkreis). Wir verbinden je zwei dieser Punkte durch ihre Abstandskurve. Die durch diese Großkreisbögen begrenzte Teilmenge $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$ der Kugeloberfläche, nennen wir *Kugeldreieck* (auch: *sphärisches Dreieck*).

Die Punkte d_1, d_2, d_3 werden als *Ecken* des Dreiecks bezeichnet; die *Seiten* sind die kürzesten Großkreisbögen zwischen den Punkten d_i, d_j mit $i, j \in \{1, 2, 3\}$. Diese sind stets eindeutig bestimmt, vgl. Bemerkung 3.10 (3). Abbildung 3.1 veranschaulicht Definition 3.11.

Bemerkung 3.12

- (1) Für drei linear unabhängige Vektoren $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ bezeichnen wir mit $\Delta(d_1, d_2, d_3)$ das von d_1, d_2, d_3 erzeugte Kugeldreieck.
- (2) Kugeldreiecke nach Definition 3.11 erstrecken sich nie über mehr als eine Halbkugel, auch *Hemisphäre* genannt.

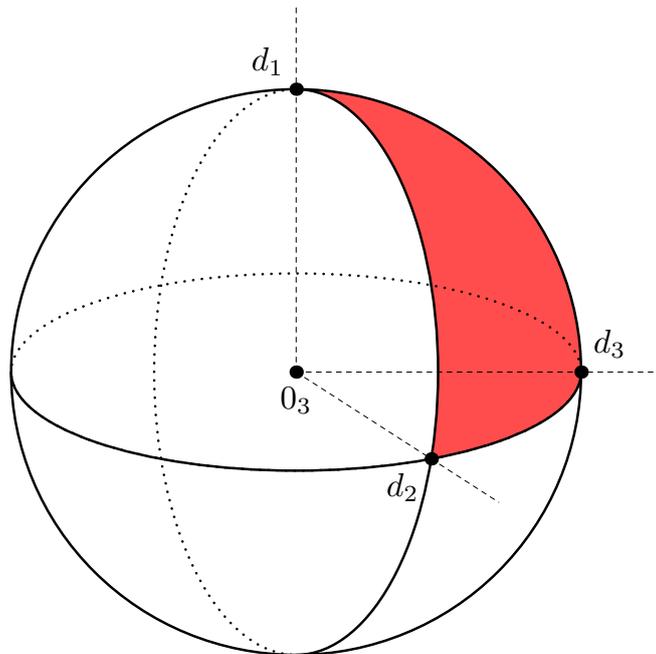


Abbildung 3.1: Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$ (rot) auf der Einheitskugel \mathbb{S}^2 mit Ecken d_1, d_2, d_3 und zugehörigen Großkreisen (schwarz)

- (3) Ein Kugeldreieck nach Definition 3.11 entsteht durch Schnitt des von den Vektoren d_1, d_2, d_3 erzeugten, konvexen Kegels mit der Einheitskugel, d. h.,

$$\Delta(d_1, d_2, d_3) = \text{cone} \{d_1, d_2, d_3\} \cap \mathbb{S}^2$$

mit

$$\text{cone} \{d_1, d_2, d_3\} = \left\{ \sum_{i=1}^3 \lambda_i d_i \mid \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, 3 \right\}.$$

Diese Aussage ist in Abbildung 3.1 grafisch dargestellt; der von d_1, d_2, d_3 erzeugte konvexe Kegel ist durch die gestrichelten Linien skizziert.

Bemerkung 3.12 (3) bietet einen algebraischen Zugang um einfach zu prüfen, ob ein Punkt x in einem Kugeldreieck Δ enthalten ist. Dies wird für unsere weiteren Betrachtungen wichtig sein. Für den Test kann auf Methoden der linearen Algebra zurückgegriffen werden. Die genaue Vorgehensweise geht aus den folgenden beiden Sätzen hervor.

Satz 3.13 *Durch die linear unabhängigen Vektoren $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ sei das Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$ gegeben und $x \in \mathbb{S}^2$ sei ein beliebiger Punkt. Wir betrachten das inhomogene lineare Gleichungssystem*

$$\begin{pmatrix} d_1 & d_2 & d_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda^1 \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \end{pmatrix} = x. \quad (3.8)$$

Dann ist $x \in \Delta$ genau dann, wenn die Lösung $\bar{\lambda} = (\bar{\lambda}^1 \ \bar{\lambda}^2 \ \bar{\lambda}^3)^\top$ des Gleichungssystems (3.8) komponentenweise nichtnegativ ist, d. h., falls $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}_+^3$ gilt.

Beweis: Wir wissen bereits, dass $x \in \mathbb{S}^2$ ist. Somit ist $\lambda = (\lambda^1 \ \lambda^2 \ \lambda^3)^\top \in \mathbb{R}_+^3$ genau dann Lösung von (3.8), wenn

$$\sum_{i=1}^3 \lambda^i d_i = x$$

mit $\lambda^i \geq 0$ für $i = 1, 2, 3$. Dies ist äquivalent zu $x \in \text{cone}\{d_1, d_2, d_3\}$. Mit Bemerkung 3.12 (3) folgt damit die Behauptung. ■

Satz 3.14 *Es seien $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ drei linear unabhängige Vektoren. Für je zwei Vektoren d_i, d_j mit $(i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\}$ sei ein Normaleneinheitsvektor $n_{ij} \in \mathbb{S}^2$ der Ebene $\text{span}\{d_i, d_j\}$ derart gegeben, dass $\langle d_i, n_{ij} \rangle = \langle d_j, n_{ij} \rangle = 0$ und für den dritten Vektor d_k , $k \neq i, j$, die Ungleichung $\langle d_k, n_{ij} \rangle \geq 0$ gilt. Für einen Punkt $x \in \mathbb{S}^2$ gilt dann $x \in \text{cone}\{d_1, d_2, d_3\}$ genau dann, wenn*

$$\langle x, n_{ij} \rangle \geq 0$$

für alle $(i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\}$.

Beweis: Die Vektoren d_1, d_2, d_3 sind linear unabhängig und bilden daher eine Basis des \mathbb{R}^3 . Folglich gibt es eine Darstellung $x = \sum_{\ell=1}^3 \lambda^\ell d_\ell$ mit $\lambda = (\lambda^1 \ \lambda^2 \ \lambda^3)^\top \in \mathbb{R}^3$. Dann gilt

$$\langle x, n_{12} \rangle = \left\langle \sum_{\ell=1}^3 \lambda^\ell d_\ell, n_{12} \right\rangle = \sum_{\ell=1}^3 \lambda^\ell \langle d_\ell, n_{12} \rangle = \lambda^3 \langle d_3, n_{12} \rangle.$$

Wegen $\langle d_3, n_{12} \rangle \geq 0$ haben somit $\langle x, n_{12} \rangle$ und λ^3 dasselbe Vorzeichen. Eine analoge Aussage gilt für $\langle x, n_{23} \rangle$ und λ^1 respektive $\langle x, n_{31} \rangle$ und λ^2 . Damit folgt die Behauptung. ■

Mit Satz 3.14 können wir auf eine weitere Weise testen, ob ein gegebener Punkt in einem Kugeldreieck enthalten ist. Diese ist aus numerischen Gründen gelegentlich geeigneter als die Variante aus Satz 3.13, da man sich auf die Berechnung dreier Skalarprodukte zurückziehen kann, statt ein lineares Gleichungssystem zu lösen. Allerdings ist es vorher notwendig, die Normalenvektoren n_{ij} , etwa durch Berechnung je eines Kreuzproduktes, sowie deren Vorzeichen zu bestimmen. Wir gehen in Kapitel 5 näher auf diese numerischen Gesichtspunkte ein.

3.2.2 Untere Schranke durch geometrische Konstruktion

Im Folgenden sei ein Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$, sowie ein Punkt $x \in \mathbb{S}^2$ gegeben. Ziel ist es nun, den minimalen Abstand $d(x, \Delta) = \min_{m \in \Delta} d(m, x)$ zu bestimmen. Dieses Minimum

wird entweder

- (1) im Punkt x angenommen, falls $x \in \Delta$ ist oder
- (2) auf dem Rand des Kugeldreiecks angenommen, d. h. in einem der Eckpunkte oder auf einem der Großkreisbögen.

Ist nämlich $m \in \Delta$, so gibt einen Großkreis, der m und x verbindet. Schränken wir diesen auf denjenigen Bogen κ ein, der innerhalb des Dreiecks Δ verläuft, so kann man mit gleichen Mitteln wie in Lemma 3.3 zeigen, dass der minimale Abstand eines Punktes auf κ zu x auf einem der beiden Endpunkte, also auf dem Rand von Δ , angenommen wird, sofern x kein Element des Dreiecks Δ ist. Andernfalls ist er Null.

Es ist demnach im Falle $x \notin \Delta$ zur Bestimmung des minimalen Abstandes $d(x, \Delta)$ erforderlich, den Abstand eines Punktes zu einem Großkreis berechnen zu können. Dazu benötigen wir zunächst noch eine Definition aus dem Bereich der euklidischen Geometrie.

Definition 3.15 (Halbraum) Es sei $\bar{m} \in \mathbb{R}^k$ ein Vektor, $k \in \mathbb{N}$. Die Mengen

$$\{m \in \mathbb{R}^k \mid \langle m, \bar{m} \rangle \geq 0\}, \quad \{m \in \mathbb{R}^k \mid \langle m, \bar{m} \rangle \leq 0\}$$

nennen wir die durch \bar{m} erzeugten *Halbräume*.

Bemerkung 3.16 Es sei $E \subseteq \mathbb{R}^k$ eine Hyperebene und n_E ein dazugehöriger Normalenvektor. Dann werden durch E via n_E zwei Halbräume erzeugt, deren Schnitt die Hyperebene E ist.

Mithilfe des folgenden Satzes kann man nun den Abstand eines Punktes $x \in \mathbb{S}^2$ zu einem gegebenen Großkreis berechnen.

Satz 3.17 Es seien $x \in \mathbb{S}^2$, $E \subseteq \mathbb{R}^3$ eine Ursprungsebene mit Normaleneinheitsvektor n_E und $\Gamma_E = E \cap \mathbb{S}^2$ der von ihr erzeugte Großkreis. Dann gelten folgende Aussagen:

- (1) Ein Punkt $m \in \Gamma_E$ minimiert genau dann den intrinsischen Abstand zu x , wenn er den extrinsischen Abstand (für $p = 2$) zu x minimiert, d. h. es gilt

$$\operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) = \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \|x - m\|^2. \quad (3.9)$$

- (2) Der Menge der Minimalstellen aus (3.9) ist gegeben durch

$$\operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) = \begin{cases} \Gamma_E, & \text{falls } x = \pm n_E, \\ \left\{ \frac{P_E x}{\|P_E x\|} \right\}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.10)$$

Dabei sei P_E die Orthogonalprojektion auf die Ebene E .

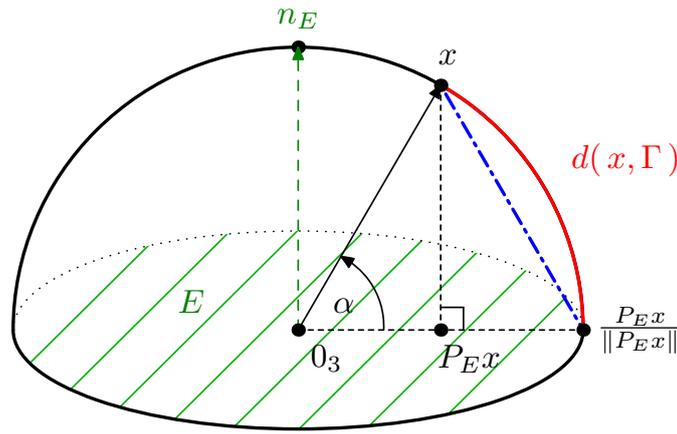


Abbildung 3.2: Intrinsischer Abstand $d(x, \Gamma) = \arcsin \alpha$ (rot) und extrinsischer Abstand (blau $- \cdot$) eines Datenpunktes $x \in \mathbb{S}^2$ vom von der Ebene E (grün schraffiert) erzeugten Großkreis Γ_E

(3) Für den Minimalwert des Problems $\min_{m \in \Gamma_E} d(x, m)$ gilt

$$\min_{m \in \Gamma_E} d(x, m) = \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|).$$

Beweis: In Abbildung 3.2 sind die gegebenen Voraussetzungen dieses Beweises, sowie die getroffenen Aussagen veranschaulicht.

(1) Da der Arkuskosinus streng monoton fallend ist, folgt:

$$\begin{aligned} \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) &= \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \arccos(\langle x, m \rangle) \\ &= \operatorname{argmax}_{m \in \Gamma_E} \langle x, m \rangle \\ &= \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \langle x, x \rangle - 2 \langle x, m \rangle + \langle m, m \rangle \\ &= \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \|x - m\|^2, \end{aligned}$$

wobei das vorletzte Gleichheitszeichen gilt, da $\langle x, x \rangle = \langle m, m \rangle = 1$ ist. Dies zeigt Gleichung (3.9).

(2) Ist $x = \pm n_E$ ein Normaleneinheitsvektor zur Ebene E , so ist $\langle x, m \rangle = 0$ für alle $m \in E$ und somit

$$d(x, m) = \arccos(\langle x, m \rangle) = \arccos(0) = \frac{\pi}{2} = \arcsin(1) = \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|) \quad (3.11)$$

für alle $m \in \Gamma_E$. Folglich ist $\operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) = \Gamma_E$.

Es sei nun $x \neq \pm n_E$. Dann ist x kein Element des orthogonalen Komplements von E und folglich $P_E x \neq 0_3$. Ferner gilt für alle $m \in \Gamma_E$ nach dem Satz des Pythagoras (vgl. Abbildung 3.2) die Gleichung

$$\|x - m\|^2 = \|x - P_E x\|^2 + \|P_E x - m\|^2. \quad (3.12)$$

Daraus folgt zusammen mit (3.9) die Äquivalenz

$$\begin{aligned} \bar{m} \in \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) &\iff \bar{m} \in \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \|x - m\|^2 \\ &\iff \bar{m} \in \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} \|P_E x - m\|^2 \\ &\iff \bar{m} = \frac{P_E x}{\|P_E x\|}. \end{aligned}$$

Dies zeigt die Gleichung (3.10).

- (3) Ist $x = \pm n_E$, so folgt Aussage (3) bereits aus (3.11). Es sei $x \neq \pm n_E$ (und damit $P_E x \neq 0_3$). Ohne Einschränkung liegen x und n_E im selben der beiden, von E erzeugten Halbräume, d. h. es gelte $\langle x, n_E \rangle \geq 0$. Für die Orthogonalprojektion von x auf E gilt nach dem Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren [Wer11, Satz V.4.2]:

$$P_E x = x - \langle x, n_E \rangle n_E.$$

Folglich liegen x , n_E und $P_E x$ in einer Ebene. Die Punkte x , n_E und $\frac{P_E x}{\|P_E x\|}$ liegen demnach auf demselben Großkreis und x liegt im Inneren des Großkreisbogens von n_E nach $\frac{P_E x}{\|P_E x\|}$. Aufgrund von $\frac{P_E x}{\|P_E x\|} \in E$ ergibt sich damit

$$\frac{\pi}{2} = d\left(n_E, \frac{P_E x}{\|P_E x\|}\right) = d(n_E, x) + d\left(x, \frac{P_E x}{\|P_E x\|}\right).$$

Mit [BSMM08, Formel (2.145)] folgt dann

$$\begin{aligned} d\left(x, \frac{P_E x}{\|P_E x\|}\right) &= \frac{\pi}{2} - d(x, n_E) = \frac{\pi}{2} - \arccos(\langle x, n_E \rangle) \\ &= \arcsin(\langle x, n_E \rangle) = \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|). \end{aligned}$$

Für den Fall, dass $\langle x, n_E \rangle \leq 0$ ist, betrachte man $-n_E$ statt n_E und zeigt mit gleichen Mitteln die Beziehung

$$d\left(x, \frac{P_E x}{\|P_E x\|}\right) = \arcsin(\langle x, -n_E \rangle) = \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|).$$

■

Die, ein Kugeldreieck begrenzenden Großkreisbögen, sind nur Teile von Großkreisen. Der Abstand eines Punktes x von einer Seite stimmt demnach nicht notwendigerweise mit dem Abstand vom gesamten Großkreis überein. Im Folgenden wollen wir untersuchen, unter welchen Voraussetzungen dies dennoch der Fall ist und, wie man den Abstand bestimmen kann, sofern diese Bedingungen nicht erfüllt sind. Dazu benötigen wir zunächst einige vorbereitende Aussagen.

Lemma 3.18 *Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei Vektoren mit $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$. Dann gibt es eine Rotationsmatrix $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit der Eigenschaft, dass $Rd_i = e_i$ für $i = 1, 2$ gilt.*

Beweis: Wir zeigen zunächst, dass die Matrix

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & d_1 \times d_2 \end{pmatrix}$$

eine Rotationsmatrix ist. Dazu gehen wir schrittweise vor.

- (1) Das Kreuzprodukt $d_1 \times d_2$ der Vektoren d_1, d_2 ist ein Einheitsvektor, da

$$\|d_1 \times d_2\| = \|d_1\| \|d_2\| \sin \varphi = 1,$$

vgl. [BSMM08, Formel (3.249b)]. Dabei sei $\varphi = \arccos(\langle d_1, d_2 \rangle) = \frac{\pi}{2}$ der von d_1, d_2 eingeschlossene Winkel.

- (2) Die Matrix \tilde{R} ist orthogonal, da mithilfe von (1) die Gleichung

$$\tilde{R}^\top \tilde{R} = \begin{pmatrix} d_1^\top d_1 & d_1^\top d_2 & d_1^\top (d_1 \times d_2) \\ d_2^\top d_1 & d_2^\top d_2 & d_2^\top (d_1 \times d_2) \\ (d_1 \times d_2)^\top d_1 & (d_1 \times d_2)^\top d_2 & (d_1 \times d_2)^\top (d_1 \times d_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

folgt.

- (3) Es gilt $\det \tilde{R} = 1$, da

$$\det \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & d_1 \times d_2 \end{pmatrix} = \langle d_1 \times d_2, d_1 \times d_2 \rangle = \|d_1 \times d_2\|^2 = 1,$$

vgl. [BSMM08, Formel (3.259) i. V. m. Formel (3.266)].

Aus (2)–(3) folgt nun, dass \tilde{R} eine Rotationsmatrix ist. Deren Transponierte $R = \tilde{R}^\top$ überführt dann, aufgrund von

$$\begin{pmatrix} Rd_1 & Rd_2 & R(d_1 \times d_2) \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & d_1 \times d_2 \end{pmatrix} = \tilde{R}^\top \tilde{R} = I_3,$$

die Vektoren d_1, d_2 in die kanonischen Einheitsvektoren e_1 bzw. e_2 . ■

Lemma 3.18 besagt, dass wir zwei orthogonale Vektoren $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ durch eine Drehung in die beiden ersten kanonischen Einheitsvektoren überführen können. Insbesondere folgt daraus, dass alle Großkreise der Kugel \mathbb{S}^2 durch Rotation aus dem Großkreis, der durch e_1, e_2 in der e_1 - e_2 -Ebene erzeugt wird, hervorgehen. Dieses Resultat wird uns im folgenden Lemma von Nutzen sein.

Lemma 3.19 *Es seien $x \in \mathbb{S}^2$, $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei Vektoren mit $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$ und Γ_E der durch $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ erzeugte Großkreis. Dieser sei durch die Kurve*

$$\gamma : [-\pi, \pi) \rightarrow \mathbb{S}^2, \quad \omega \mapsto \cos \omega d_1 + \sin \omega d_2$$

parametrisiert. Ferner sei n_E ein Normaleneinheitsvektor zu E . Ist $x \neq \pm n_E$, so hat die Abbildung $\omega \mapsto d(x, \gamma(\omega))$ auf einem Intervall der Länge kleiner 2π je genau ein Minimum und Maximum und ist zwischen diesen monoton; andernfalls ist sie konstant.

Beweis: Wir können ohne Einschränkung annehmen, dass $d_1 = e_1$, $d_2 = e_2$ gilt, da es andernfalls nach Lemma 3.18 eine Rotation R gibt, die d_i in e_i überführt, $i = 1, 2$, und $d(Rx, R\gamma(\omega)) = d(x, \gamma(\omega))$ gemäß Lemma 3.2 gilt.

Ist $x = \pm e_3$, so ist $d(x, m) = \frac{\pi}{2}$ für alle $m \in \Gamma_E$ und folglich ist $\omega \mapsto d(x, \gamma(\omega))$ konstant.

Es sei nun $x \neq \pm e_3$. Dann ist $x^1 \neq 0$ oder $x^2 \neq 0$, andernfalls wäre aufgrund von $x \in \mathbb{S}^2$ einer der Vektoren $\begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$, was wir ausgeschlossen haben. O. B. d. A. gelte $x^1 \neq 0$. Aufgrund von Satz 3.17 ist minimieren/ maximieren von $d(x, \gamma(\omega))$ äquivalent zum minimieren/ maximieren von $\|x - \gamma(\omega)\|^2$. Wir betrachten deshalb die Funktion

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \omega \mapsto \|x - \gamma(\omega)\|^2 = (x^1 - \cos \omega)^2 + (x^2 - \sin \omega)^2 + (x^3)^2,$$

und suchen Minima und Maxima dieser Abbildung. Dabei setzen wir γ auf \mathbb{R} auf kanonische Weise fort. Da f stetig differenzierbar ist, genügt es dazu die Nullstellen der Ableitung

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \omega}(\omega) &= 2 \sin \omega (x^1 - \cos \omega) - 2 \cos \omega (x^2 - \sin \omega) \\ &= 2x^1 \sin \omega - 2x^2 \cos \omega \end{aligned}$$

zu betrachten. Diese verschwindet genau dann, wenn

$$\omega = \arctan\left(\frac{x^2}{x^1}\right) + k\pi \text{ mit } k \in \mathbb{Z}.$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \omega^2} \left(\arctan \left(\frac{x^2}{x^1} \right) + k\pi \right) &= \left(2x^1 \cos \omega + 2x^2 \sin \omega \right) \Big|_{\omega = \arctan \left(\frac{x^2}{x^1} \right) + k\pi} \\ &= \begin{cases} \operatorname{sgn}(x^1) \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2}, & \text{falls } k \text{ gerade,} \\ -\operatorname{sgn}(x^1) \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2}, & \text{falls } k \text{ ungerade.} \end{cases} \end{aligned}$$

Dabei bezeichne $\operatorname{sgn}(x^1)$ das Vorzeichen von x^1 . Folglich gibt es auf einem Intervall der Länge kleiner 2π je genau eine lokale Minimal- und Maximalstelle. Diese sind zugleich global, da aufgrund der Periodizität von f in allen Minimalstellen derselbe Funktionswert vorliegt, ebenso wie in allen Maximalstellen. Da die Ableitung stetig ist und zwischen den beiden Extremstellen nicht verschwindet, ist die Funktion f zwischen diesen beiden (streng) monoton. ■

Bemerkung 3.20 Die Forderung $\langle d_1, d_2 \rangle = 0$ in Lemma 3.19 ist keine Einschränkung. Sind d_1, d_2 zwei linear unabhängige Vektoren mit $\langle d_1, d_2 \rangle \neq 0$, so erhalten wir nach dem Gram-Schmidt-Orthonormalisierungsverfahren durch

$$\tilde{d}_1 = d_1, \quad \tilde{d}_2 = \frac{d_2 - \langle d_1, d_2 \rangle d_1}{\|d_2 - \langle d_1, d_2 \rangle d_1\|}$$

zwei orthonormale Vektoren $\tilde{d}_1, \tilde{d}_2 \in \mathbb{S}^2$ mit $\operatorname{span}\{\tilde{d}_1, \tilde{d}_2\} = \operatorname{span}\{d_1, d_2\}$. Folglich erzeugen \tilde{d}_1, \tilde{d}_2 denselben Großkreis wie d_1, d_2 .

Folgerung 3.21 *Es gelten die Voraussetzungen von Lemma 3.19. Weiterhin seien $x \neq \pm n_E$, $\bar{\omega} = \operatorname{argmin}_{\omega \in [-\pi, \pi)} d(x, \gamma(\omega))$ und $[\alpha, \beta] \subseteq [-\pi, \pi)$ ein abgeschlossenes Intervall. Dann ist*

$$\min_{\omega \in [\alpha, \beta]} d(x, \gamma(\omega)) = \begin{cases} \min \{d(x, \gamma(\alpha)), d(x, \gamma(\beta))\}, & \text{falls } \bar{\omega} \notin [\alpha, \beta], \\ d(x, \gamma(\bar{\omega})), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Insbesondere gilt für den Abstand von x zu dem, d_1 und d_2 verbindenden Großkreisbogen κ , die Beziehung

$$\min_{m \in \kappa} d(x, m) = \begin{cases} \min \{d(x, d_1), d(x, d_2)\}, & \text{falls } \gamma(\bar{\omega}) \notin \kappa, \\ d(x, \gamma(\bar{\omega})), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Beweis: Die erste Aussage folgt mit Lemma 3.19 aus der stückweisen Monotonie der Abstandsfunktion auf dem Großkreis Γ und kann mit gleichen Mitteln wie in Lemma 3.3 gezeigt werden. Die zweite Aussage folgt daraus, dass man den Kreisbogen κ über einem geeignet gewählten Intervall $[\alpha, \beta]$ parametrisieren kann (vgl. Satz 3.9). Gilt $[\alpha, \beta] \subsetneq [-\pi, \pi)$, so

betrachte man die Menge $R\kappa$ mit

$$R = \begin{pmatrix} -\cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & -\cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & d_1 \times d_2 \end{pmatrix}^\top.$$

Der entstehende Großkreisbogen $R\kappa$ befindet sich dann in der e_1 - e_2 -Ebene (siehe Lemma 3.18) und besitzt eine entsprechende Parametrisierung (siehe Bemerkung 3.4). Nach Lemma 3.2 gilt darüber hinaus $d(x, m) = d(Rx, Rm)$ für $m \in \kappa$ und $R\kappa$ ist durch ein abgeschlossenes Teilintervall von $[-\pi, \pi]$ parametrisiert. ■

Besitzt man Kenntnis darüber, ob der zu x nächstgelegene Punkt des Großkreises Γ_E im Großkreisbogen κ enthalten ist, so kann man mithilfe von Satz 3.17 und Folgerung 3.21 den Abstand $d(x, \kappa)$ bestimmen. Wir leiten im Folgenden ein Kriterium her, welches uns ermöglicht diese Bedingung einfach zu überprüfen. Dazu benötigen wir die nachstehende Definition.

Definition 3.22 (Kugelzweieck) Es seien $m, \tilde{m} \in \mathbb{S}^2$ zwei diametral gegenüberliegende Punkte (d. h., $m = -\tilde{m}$) und κ_1, κ_2 zwei verschiedene, diese Punkte verbindende Großkreisbögen. Durch κ_1 und κ_2 wird dann eine Menge Λ begrenzt, welche wir *Kugelzweieck* (engl. *spherical lune*) nennen.

In Abbildung 3.3 ist Definition 3.22 grafisch dargestellt. Die Großkreisbögen κ_1, κ_2 werden auch *Seiten* des Zweiecks genannt; die Punkte m, \tilde{m} heißen dessen *Ecken*.

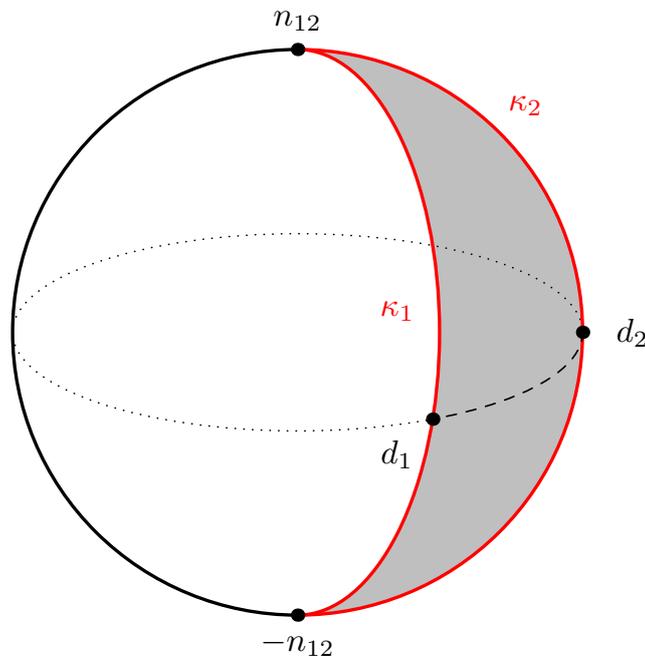


Abbildung 3.3: Durch $\pm n_{12}$ erzeugtes Kugelzweieck Λ (grau) mit verbindenden Großkreisbögen κ_1, κ_2 (rot) welche durch die Punkte d_1 bzw. d_2 verlaufen

Bemerkung 3.23

- (1) Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei linear unabhängige Vektoren und n_{12} ein Normaleneinheitsvektor der Ebene $\text{span}\{d_1, d_2\}$. Dann wird durch die Großkreisbögen, die n_{12} und $-n_{12}$ verbinden und durch d_1 bzw. d_2 verlaufen, ein Kugelzweieck Λ definiert, welches sich nur über eine Hemisphäre erstreckt. Dieses Kugelzweieck entsteht durch den Schnitt des Schnitts zweier Halbräume H_1, H_2 mit der Sphäre \mathbb{S}^2 , d. h.,

$$\Lambda = H_1 \cap H_2 \cap \mathbb{S}^2.$$

Dabei ist H_i derjenige Halbraum, der von $\text{span}\{d_i, n_{12}\}$ erzeugt wird und den jeweils anderen Punkt d_j enthält, $i, j = 1, 2, j \neq i$. In Abbildung 3.4 haben wir dies veranschaulicht. Die Halbräume H_i sind aufgrund von $d_1 \notin H_2$ und $d_2 \notin H_1$ eindeutig bestimmt. Das so entstehende (eindeutig bestimmte) Kugelzweieck $\Lambda = \Lambda(d_1, d_2)$ bezeichnen wir als das *von d_1, d_2 erzeugte Kugelzweieck* $\Lambda(d_1, d_2)$.

- (2) Das Kugelzweieck $\Lambda(d_1, d_2)$ ist die Vereinigung der beiden Kugeldreiecke $\Delta(d_1, d_2, n_{12})$ und $\Delta(d_1, d_2, -n_{12})$, wobei n_{12} ein Normaleneinheitsvektor zu $\text{span}\{d_1, d_2\}$ sei. Anschaulich „verklebt“ man die beiden Dreiecke an der Seite von d_1 nach d_2 , siehe Abbildung 3.3. Folglich gilt

$$\Lambda(d_1, d_2) = \Delta(d_1, d_2, n_{12}) \cup \Delta(d_1, d_2, -n_{12}).$$

Dies ermöglicht es uns einfach prüfen, ob ein Punkt x in einem gegebenen Kugelzweieck enthalten ist.

Lemma 3.24 *Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ linear unabhängig und n_{12} sei ein Normaleneinheitsvektor der Ebene $\text{span}\{d_1, d_2\}$. Dann ist $x \in \Lambda(d_1, d_2)$ genau dann, wenn das Gleichungssystem*

$$\begin{pmatrix} d_1 & d_2 & n_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda^1 \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \end{pmatrix} = x \quad (3.13)$$

eine Lösung $\bar{\lambda} = (\bar{\lambda}^1 \ \bar{\lambda}^2 \ \bar{\lambda}^3)^\top \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$ besitzt.

Beweis: Nach Bemerkung 3.23 (2) ist $x \in \Lambda(d_1, d_2)$ genau dann, wenn x in einem der beiden Kugeldreiecke $\Delta(d_1, d_2, \pm n_{12})$ enthalten ist. Dies ist nach Satz 3.13 äquivalent dazu, dass x eine Darstellung $x = \lambda^1 d_1 + \lambda^2 d_2 + \lambda^3 n_{12}$ mit $\lambda^1, \lambda^2 \geq 0$ und $\lambda^3 \in \mathbb{R}$ besitzt, was die Behauptung zeigt. ■

Um den Abstand eines Punktes $x \in \mathbb{S}^2$ zu einem Großkreisbogen herzuleiten, benötigen wir abschließend noch das folgende Hilfsresultat.

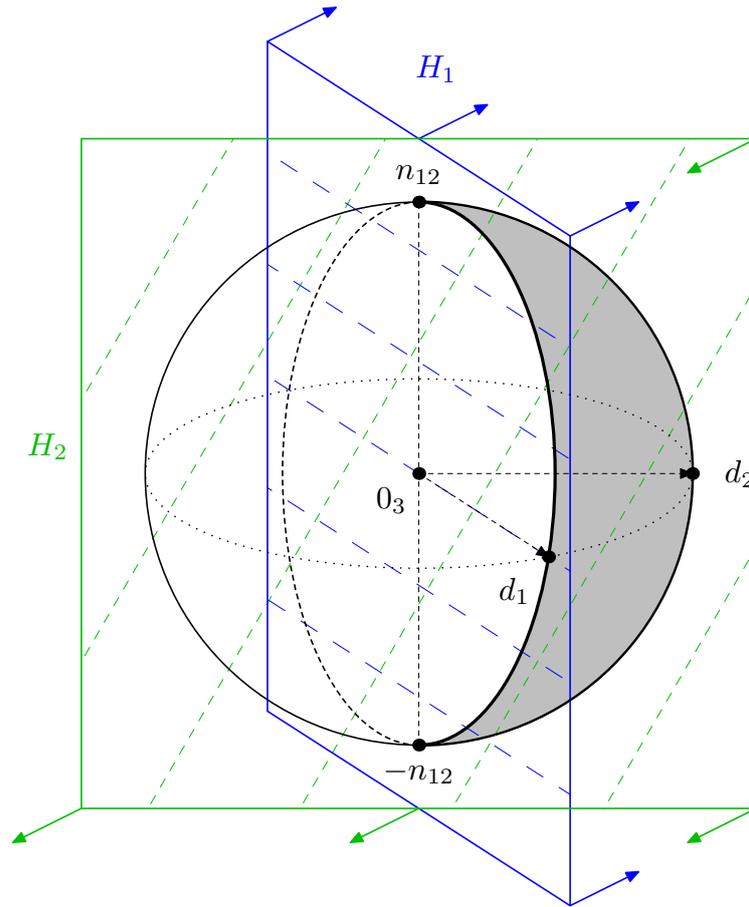


Abbildung 3.4: Durch d_1, d_2 erzeugtes Kugelzweieck $\Lambda(d_1, d_2)$ (grau) als Schnitt der Halbräume H_1 (blau schraffiert -), H_2 (grün schraffiert -) und der Sphäre \mathbb{S}^2 nach Bemerkung 3.23 (1)

Lemma 3.25 *Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei linear unabhängige Vektoren und κ der d_1 und d_2 verbindende Großkreisbogen. Ferner sei Γ_E der durch $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ erzeugte Großkreis mit Normaleneinheitsvektor n_E und $x \in \mathbb{S}^2$ sei ein Punkt mit $x \neq \pm n_E$. Dann ist der Minimierer von $m \mapsto d(x, m)$ auf Γ_E eindeutig bestimmt. Er ist genau dann ein Element des Großkreisbogens κ , wenn x im von d_1, d_2 erzeugten Kugelzweieck $\Lambda(d_1, d_2)$ liegt. Mit anderen Worten, es gilt*

$$\operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) \in \kappa \iff x \in \Lambda(d_1, d_2) \setminus \{\pm n_E\}.$$

Beweis: Die Eindeutigkeit des Minimierers $\bar{m} = \operatorname{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m)$ gilt nach Satz 3.17 (2). Er ist gegeben als die normierte Orthogonalprojektion $\frac{P_E x}{\|P_E x\|}$ von x auf E . Für diese gilt

$$\begin{aligned} \frac{P_E x}{\|P_E x\|} \in \kappa &\iff P_E x \in \text{cone}\{d_1, d_2\} \setminus \{0_3\} \\ &\iff x \in (H_1 \cap H_2) \setminus \text{span}\{n_E\}, \end{aligned} \tag{3.14}$$

wobei H_i derjenige durch $\text{span}\{d_i, n_E\}$ erzeugte Halbraum ist, der d_j enthält, $i, j = 1, 2, j \neq i$, (vgl. Abbildung 3.4). Aufgrund von $x \in \mathbb{S}^2$ und Bemerkung 3.23 ist dann (3.14) äquivalent zu $x \in \Lambda(d_1, d_2) \setminus \{\pm n_E\}$. ■

Mithilfe der Kugelzweiecke lässt sich nun eine Formel zur Berechnung des Abstandes eines Punktes x zu einem Großkreisbogen herleiten.

Satz 3.26 *Es seien $d_1, d_2 \in \mathbb{S}^2$ zwei linear unabhängige Vektoren und $\Gamma_E = E \cap \mathbb{S}^2$ der von $E = \text{span}\{d_1, d_2\}$ erzeugte Großkreis. Für den Abstand eines Punktes $x \in \mathbb{S}^2$ zum, die Punkte d_1, d_2 verbindenden Großkreisbogen $\kappa \subseteq \Gamma_E$ gilt dann:*

$$\min_{m \in \kappa} d(x, m) = \begin{cases} \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|), & \text{falls } x \in \Lambda(d_1, d_2), \\ \min \{d(x, d_1), d(x, d_2)\}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.15)$$

Dabei sei n_E ein Normaleneinheitsvektor zu E .

Beweis: Zum Beweis unterscheiden wir drei Fälle.

- (1) Ist $x = \pm n_E$, so ist $\arcsin(|\langle x, n_E \rangle|) = \arcsin(1) = \frac{\pi}{2} = d(x, m)$ für alle $m \in \Gamma_E$.
- (2) Ist $x \in \Lambda(d_1, d_2) \setminus \{\pm n_E\}$, so ist nach Lemma 3.25 $\text{argmin}_{m \in \Gamma_E} d(x, m) \in \kappa$ und mit Satz 3.17 folgt

$$\min_{m \in \kappa} d(x, m) = \min_{m \in \Gamma_E} d(x, m) = \arcsin(|\langle x, n_E \rangle|).$$

- (3) Ist $x \notin \Lambda(d_1, d_2)$. Dann ist $\text{argmin}_{m \in \kappa} d(x, m) = \frac{P_E x}{\|P_E x\|} \notin \kappa$ und nach Folgerung 3.21 gilt $\min_{m \in \kappa} d(x, m) = \min \{d(x, d_1), d(x, d_2)\}$.

Aus (1)–(3) folgt nun die Gleichung (3.15). ■

Die Bedingung $x \in \Lambda(d_1, d_2)$ in (3.15) lässt sich einfach durch Lösen des linearen Gleichungssystems (3.13) überprüfen.

Es sei nun durch drei linear unabhängige Vektoren $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ ein Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$ gegeben. Wir suchen eine untere Schranke g für den Minimalwert von $d(x, \cdot)$ auf Δ . Diesen können wir mit den vorangegangenen Resultaten sogar exakt berechnen. Ist $x \in \Delta$, so ist $\min_{m \in \Delta} d(x, m) = 0$. Andernfalls wissen wir bereits, dass das Minimum auf dem Rand des Dreiecks Δ angenommen wird, d. h., entweder in einer der Ecken d_1, d_2, d_3 oder auf einem der, die Ecken verbindenden Großkreisbögen und wir können den Minimalwert gemäß Satz 3.26 bestimmen. Im nachstehenden Algorithmus 3.27 ist noch einmal kurz die Vorgehensweise zur Berechnung des Minimalwertes $d(x, \Delta)$ auf einem gegebenen Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$ zusammengefasst.

Algorithmus 3.27 (Berechnung des Abstandes $d(x, \Delta)$ eines Punktes $x \in \mathbb{S}^2$ von einem sphärischen Dreieck Δ)

Input : Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$, Punkt $x \in \mathbb{S}^2$

Output : Abstand $d(x, \Delta)$ (insb. untere Schranke g für $d(x, \cdot)$ auf Δ)

- 1 Für jedes Paar (d_1, d_2) , (d_2, d_3) , (d_3, d_1) bestimme die zu den Seiten gehörigen Großkreise Γ_{12} , Γ_{23} , Γ_{31} mit zugehörigen Normaleneinheitsvektoren $n_{ij} = \pm \frac{d_i \times d_j}{\|d_i \times d_j\|}$ mit entsprechendem Vorzeichen gemäß Satz 3.14.
- 2 Berechne die Skalarprodukte $\langle x, n_{ij} \rangle$ und prüfe, ob alle nichtnegativ sind (vgl. Satz 3.14).
- 3 **if** $\langle x, n_{ij} \rangle \geq 0 \forall (i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\}$ **then**
- 4 | Setze $g = 0$ und beende das Verfahren.
- 5 **else**
- 6 | **for** *Jeden Großkreis* Γ_{ij} mit $(i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\}$ **do**
- 7 | | Löse das lineare Gleichungssystem $\begin{pmatrix} d_i & d_j & n_{ij} \end{pmatrix} \lambda = x$ und prüfe die Vorzeichen der Koeffizienten des Lösungsvektors $\bar{\lambda}$, vgl. Lemma 3.24.
- 8 | | **if** $\bar{\lambda}^1 \geq 0 \wedge \bar{\lambda}^2 \geq 0$ **then**
- 9 | | | Setze $g_{ij} = \arcsin(|\langle x, n_{ij} \rangle|)$.
- 10 | | **else**
- 11 | | | Setze $g_{ij} = \min\{d(x, d_i), d(x, d_j)\}$.
- 12 | | **end if**
- 13 | **end for**
- 14 | $g = \min\{g_{12}, g_{23}, g_{31}\}$.
- 15 **end if**

Algorithmus : Bestimmung des Abstandes $g = \min_{m \in \Delta} d(x, m)$ auf einem Kugeldreieck Δ

Bemerkung 3.28

- (1) Sind $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^2$ und $g_i = \min_{m \in \Delta} d(x_i, m)$ gemäß Algorithmus 3.27 für $i = 1, 2, \dots, n$, so ist aufgrund von $g_i \geq 0$ durch

$$g = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i^p \quad (3.16)$$

eine untere Schranke für \hat{F}_n auf Δ gegeben. Auch hier ist zu beachten, dass diese für $n \geq 2$ Punkte im Allgemeinen jedoch nicht scharf ist.

- (2) Die so konstruierte untere Schranke ist nie schlechter als die, durch den Lipschitz-Unterschätzer aus Abschnitt 2.3 gegebene. Dies zeigen wir später in Abschnitt 4.4.

Mithilfe der in diesem Kapitel getroffenen Vorbereitungen, können wir nun Branch-and-Bound-Verfahren zur Bestimmung von Fréchet- p -Mittelwerten auf k -Sphären der Dimension $k = 1, 2$ formulieren. Dies ist Gegenstand des folgenden Kapitels.

4 Branch-and-Bound-Verfahren auf Sphären

In diesem Kapitel stellen wir zunächst ein Branch-and-Bound-Verfahren zur Ermittlung aller globalen Minima einer gegebenen Zielfunktion vor. Anschließend gehen wir näher darauf ein, wie die, in dieser Arbeit betrachteten, zugrunde liegenden metrischen Räume im Branch-Schritt unterteilt werden können und schlagen einige Möglichkeiten vor.

Mit den in Kapitel 3 bereitgestellten Hilfsmitteln konstruieren wir schließlich für den Einheitskreis und die Einheitskugel Branch-and-Bound-Algorithmen zur Ermittlung aller globalen Minima der Fréchet-Funktion bei gegebenen Punkten x_1, x_2, \dots, x_n .

Die folgenden Voraussetzungen 4.1 seien in diesem Kapitel stets erfüllt.

Voraussetzungen 4.1 Es sei (M, d) ein metrischer Raum mit endlichem Durchmesser. Ferner seien die Punkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$ mit $n \in \mathbb{N}$ gegeben und \hat{F}_n die zugehörige Fréchet-Funktion mit $p \in \mathbb{R}_+$.

4.1 Branch-and-Bound-Algorithmus zur Ermittlung aller globalen Minima

Der hier vorgestellte Algorithmus ist im Pseudocode in seinen grundlegenden Zügen der Arbeit [EGS16, Algorithmus 1] entnommen und die Notation an diese angelehnt. Allerdings wurde er auf die hier gegebenen Voraussetzungen angepasst.

Die Version aus [EGS16] arbeitet mit einer zweifach stetig differenzierbaren Zielfunktion $f : X \rightarrow \mathbb{R}$, deren Definitionsbereich eine *Box* des \mathbb{R}^k ist, d. h. eine nichtleere Teilmenge $X \subseteq \mathbb{R}^k$ der Form

$$X = [\underline{x}_1, \bar{x}_1] \times [\underline{x}_2, \bar{x}_2] \times \cdots \times [\underline{x}_k, \bar{x}_k]$$

mit $\underline{x}_i, \bar{x}_i \in \mathbb{R}$ und $\underline{x}_i \leq \bar{x}_i$ für $i = 1, 2, \dots, k$. Der Algorithmus wurde auf eine nicht differenzierbare Zielfunktion über einem metrischen Raum angepasst.

Etwaige Funktionen, die sich vom Originalalgorithmus unterscheiden und auf den jeweiligen Sachverhalt zuzuschneiden sind, sind in Kapitälchen hervorgehoben. Insbesondere handelt es sich dabei um die Funktionen:

- (1) **LB**, die bei Eingabe einer Teilmenge von M , eine untere Schranke (engl. *lower bound*) der Zielfunktion \hat{F}_n darauf berechnet.
- (2) **MID**, die bei Eingabe einer Teilmenge von M , einen für diesen Bereich repräsentativen Punkt auswählt. In unserem Fall ist dies meist der Mittelpunkt eines Kreisbogens oder Kugeldreiecks.
- (3) **BRANCH**, die bei Eingabe einer Teilmenge von M , diesen nach einer Vorschrift unterteilt.

Wir wollen die Arbeitsweise des angegebenen Algorithmus nur kurz darstellen. Für eine ausführliche Beschreibung verweisen wir auf [EGS16, Kapitel 3].

Algorithmus 4.2 (Branch-and-Bound) Der Branch-and-Bound-Algorithmus zur Bestimmung einer (ε, δ) -Überdeckung der globalen Minima ist auf der nachfolgenden Seite aufgeführt. Die grundlegende Funktionsweise ist die folgende:

Zunächst wird das Verfahren durch Erzeugen einer Liste \mathcal{L} der noch zu bearbeitenden Elemente in Zeile 1 initialisiert. Jedes Element der Liste besteht dabei aus der Beschreibung eines Teilbereichs $\Delta \subseteq M$, dessen Durchmesser s , sowie einer oberen und unteren Schranke v bzw. u der Zielfunktion auf diesem Bereich. Die obere Schranke bestimmt sich durch Funktionsauswertung an einem ausgewählten Punkt $\text{MID}(\Delta)$. Für die untere Schranke sei (ex ante) ein Unterschätzer (bzw. ein untere Schranke) **LB** bekannt.

Die äußere Schleife (Zeile 3–31) enthält

- einen Branch-Teil (Zeile 5), in dem der aktuell ausgewählte Teilbereich gemäß der Vorschrift **BRANCH** unterteilt wird,
- einen Bound-Teil (Zeile 6–15), in dem Elemente aus dem Branch-Schritt ggf. zur Liste \mathcal{L} hinzugefügt werden und Elemente der Liste \mathcal{L} eliminiert werden, sofern sie das Verwerfungskriterium aus Lemma 2.4 erfüllen und
- einen Auswahl-Teil (Zeile 16–30), der das nächste aktuelle Element der Liste auswählt und entscheidet, ob dieses zur Liste A der Elemente der (ε, δ) -Überdeckung der Fréchet-Mittelwerte hinzugefügt werden kann (Zeile 18–21) oder noch weiter bearbeitet werden muss. Sollte dieses Element zur Liste A hinzugefügt worden sein, so wird es aus der Liste \mathcal{L} gestrichen und dasjenige Element mit der kleinsten oberen Schranke aus der Liste \mathcal{L} als aktuelles Element gewählt (Zeile 25–28).

Input : Datenpunkte x_1, x_2, \dots, x_n , Genauigkeiten $\varepsilon > 0, \delta > 0$, Startunterteilung $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_k$ des metrischen Raumes (M, d) mit $\bigcup_{i=1}^k \Delta_i \supseteq M$

Output : (ε, δ) -Überdeckung der Menge der für das Optimierungsproblem (2.3) minimalen Punkte

```

1 Initialisiere Liste  $\mathcal{L} = \{X_1 = \{\Delta_1, s_1, v_1, u_1\}, \dots, X_k = \{\Delta_k, s_k, v_k, u_k\}\}$  aller noch zu
  betrachtenden Bereiche. Dabei sei  $s_i = \text{diam}(\Delta_i)$  der Durchmesser des Bereichs  $\Delta_i$ ,
   $v_i = \hat{F}_n(\text{MID}(\Delta_i))$  und  $u_i = \text{LB}(\Delta_i)$ .
2 Setze  $A = \emptyset$ ,  $X^* = \{\Delta_1, s_1, v_1, u_1\}$ ,  $X_{act} = X^*$ ,  $u^* = -\infty$ ,  $v_{act} = \infty$ ,  $v_{glob} = v_{act}$ .
3 while  $\mathcal{L} \neq \emptyset$  do
4    $\mathcal{L} \leftarrow \mathcal{L} \setminus \{X^*\}$ 
5    $sB(X^*) \leftarrow \text{BRANCH}(X^*)$ 
6   for Jedes  $\bar{X} = \{\bar{\Delta}, \bar{s}, \bar{v}, \bar{u}\} \in sB(X^*)$  do
7     Berechne Funktionswert  $\bar{v}$  im Punkt  $\text{MID}(\bar{X})$ , Größe  $\bar{s}$  von  $\bar{X}$ , sowie untere
     Schranke  $\bar{u} = \text{LB}(\bar{X})$ .
8     if  $\bar{u} \leq v_{glob}$  then
9       Füge  $\{\bar{\Delta}, \bar{s}, \bar{v}, \bar{u}\}$  am Ende der Liste  $\mathcal{L}$  hinzu.
10      if  $\bar{v} \leq v_{act}$  then
11         $X_{act} \leftarrow \bar{X}$ ,  $v_{act} \leftarrow \bar{v}$ ,  $v_{glob} \leftarrow \min\{v_{act}, v_{glob}\}$ 
12        Lösche alle Elemente  $\{\Delta, s, v, u\}$  aus der Liste  $\mathcal{L}$  mit  $u > v_{glob}$ .
13      end if
14    end if
15  end for
16  if  $\mathcal{L} \neq \emptyset$  then
17    Wähle  $X^* = \{\Delta^*, s^*, v^*, u^*\}$  als erstes Element von  $\mathcal{L}$  mit  $u^* = \min_{\{\Delta, s, v, u\} \in \mathcal{L}} u$ .
18    while  $\mathcal{L} \neq \emptyset \wedge v_{act} - u^* \leq \frac{\varepsilon}{2}$  do
19      if  $X_{act} \in \mathcal{L} \wedge s_{act} \leq \delta$  then
20        Füge  $X_{act}$  zur Liste  $A$  der Minima hinzu und lösche  $X_{act}$  aus  $\mathcal{L}$ .
21      end if
22      if  $X_{act} \in \mathcal{L}$  then
23         $X^* \leftarrow X_{act}$ , gehe zu Zeile 3.
24      end if
25      if  $\mathcal{L} \neq \emptyset$  then
26        Definiere  $X^* \leftarrow \{\Delta^*, s^*, v^*, u^*\}$  als erstes Element von  $\mathcal{L}$  mit
         $u^* = \min_{\{\Delta, s, v, u\} \in \mathcal{L}} u$ .
27        Berechne  $X_{act}$  mit kleinstem Funktionswert in  $\mathcal{L}$  und aktualisiere obere
        Schranke  $v_{act} \leftarrow \hat{F}_n(\text{MID}(X_{act}))$ .
28      end if
29    end while
30  end if
31 end while

```

Algorithmus : Modifizierter Branch-and-Bound-Algorithmus zur Bestimmung einer (ε, δ) -Überdeckung der Minimierer der Fréchet-Funktion \hat{F}_n

Ein Konvergenz- und Korrektheitsbeweis des Originalalgorithmus findet sich in [EGS16, Abschnitt 3.3]. Wir gehen in Abschnitt 4.4 kurz darauf ein, wie dieser an die hier vorliegende Version angepasst werden kann und verzichten auf einen ausführlichen Beweis. Zunächst ist es dazu jedoch wichtig, die konkreten Branch-Vorschriften zu kennen.

4.2 Branch-Vorschriften auf metrischen Räumen

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit den Branch-Vorschriften der einzelnen, in dieser Arbeit betrachteten metrischen Räume. Wir weisen an dieser Stelle explizit darauf hin, dass die Unterteilung im Branch-Schritt hier auf die uns nächstliegende Art und Weise durchgeführt wird und keinerlei Anspruch auf Optimalität erhebt.

Beim *Branching* wird eine gegebene Teilmenge S der zulässigen Punkte in eine endliche Anzahl $\ell \geq 2$ kleinerer Teilmengen S_1, S_2, \dots, S_ℓ unterteilt mit der Bedingung, dass jeder Punkt der Menge S in einer Teilmenge S_i enthalten ist, d. h.

$$\bigcup_{i=1}^{\ell} S_i = S.$$

Üblicherweise verlangt man dabei zusätzlich, dass das Innere der Teilmengen paarweise disjunkt ist, d. h. $\text{int } S_i \cap \text{int } S_j = \emptyset$ für $i \neq j$. Handelt es sich beim zugrunde liegenden Raum um eine Teilmenge des \mathbb{R}^k , so wird oft das sogenannte *geometrical branching* angewendet. Ist die zulässige Menge beschränkt, so kann diese in eine Obermenge mit besonders „einfacher“ geometrischer Form eingeschlossen werden. Jede bei einem Branch-Schritt entstehende Teilmenge hat dann die gleiche Gestalt. Gebräuchliche geometrische Formen sind bspw. Hyperquader, Simplexes, Kegel oder Ellipsoide. Der Vorteil an dieser Vorgehensweise ist, dass sich diese „einfachen“ geometrischen Strukturen einerseits leicht für den Computer beschreiben lassen und andererseits effiziente Verfahren zur Bestimmung von unteren Schranken auf solchen Gebieten existieren. Die einzelnen Vorteile der verschiedenen Formen werden ausführlicher in [LS13, Abschnitt 5.3] diskutiert.

Ist der zugrunde liegende Raum nun ein allgemeiner metrischer Raum (M, d) , so ist zunächst nicht klar, was ein Hyperquader, Simplex o. ä. sein soll. Einen Ausweg hierfür liefert, sofern dies möglich ist, der Übergang in eine geeignete Karte. In diesem Fall kann man die geometrischen Strukturen im parametrisierten Raum, einer Teilmenge des \mathbb{R}^k mit $k \in \mathbb{N}$, betrachten und über die Karte in den metrischen Raum zurückholen. Natürlich werden diese Formen durch die Parametrisierung verzerrt. Bei geeigneter Wahl dieser kann man jedoch zuversichtlich sein, dass die geometrischen Formen im metrischen Raum nicht zu sehr entartet sind.

Mit einer der einfachsten geometrischen Strukturen wird durch Dreiecke bzw. höherdimensional durch Simplexe beschrieben. Eine Unterteilung des Raumes in Simplexe wird *Triangulierung* genannt. Es gibt zahlreiche Resultate, wie man auch für abstraktere Mannigfaltigkeiten eine solche konstruieren kann, siehe bspw. [Jos13, Theorem 2.3.A.1] und [Whi12, Kapitel IV. B]. Eine Branch-Vorschrift mithilfe von Triangulierungen kann auf diese Weise leicht allgemein beschrieben werden und scheint darüber hinaus eine sehr natürliche Art der Unterteilung des Raumes zu sein. Aus diesem Grund befassen wir uns im Rahmen dieser Arbeit mit Triangulierungen des metrischen Raumes bzw. der Parametrisierung derer zur Umsetzung eines Branch-Schrittes. Dies konkretisieren wir in den folgenden beiden Abschnitten.

4.2.1 Branch-Vorschrift für den Einheitskreis

Wir gehen im Folgenden davon aus, dass der Einheitskreis \mathbb{S}^1 mithilfe der Polarkoordinaten parametrisiert wurde. Statt einer Unterteilung des Einheitskreises in Kreisbögen, können wir eine Unterteilung des Intervalls $[-\pi, \pi)$ in Teilintervalle (eindimensionale Simplexe) vornehmen. Diese induziert dann auf kanonische Weise auch eine Unterteilung der Kreislinie in Kreisbögen.

Ist ein Teilintervall $[\alpha, \beta] \subseteq [-\pi, \pi)$ mit $\alpha \leq \beta$ gegeben, so unterteilen wir dies durch Halbieren des Intervalls. Mit anderen Worten, für den Einheitskreis ist die Branch-Funktion gegeben durch

$$\text{BRANCH}([\alpha, \beta]) = \left\{ \left[\alpha, \frac{\alpha + \beta}{2} \right], \left[\frac{\alpha + \beta}{2}, \beta \right] \right\}.$$

Für Intervalle der Form $[\alpha, \pi)$ mit $\alpha \in [-\pi, \pi)$ definieren wir die Branch-Regel entsprechend.

4.2.2 Branch-Vorschrift für die Einheitskugel

Die Einheitskugel \mathbb{S}^2 sei durch kartesische Koordinaten parametrisiert, d. h., für $x \in \mathbb{S}^2$ gelte $x = \begin{pmatrix} x^1 & x^2 & x^3 \end{pmatrix}^\top$ mit $x^1, x^2, x^3 \in \mathbb{R}$ und $(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 = 1$.

Die Punkte

$$d_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, d_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, d_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, d_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, d_5 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, d_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

erzeugen im \mathbb{R}^3 ein Oktaeder mit Seitenlänge $\sqrt{2}$, welches in die Einheitskugel eingeschrieben

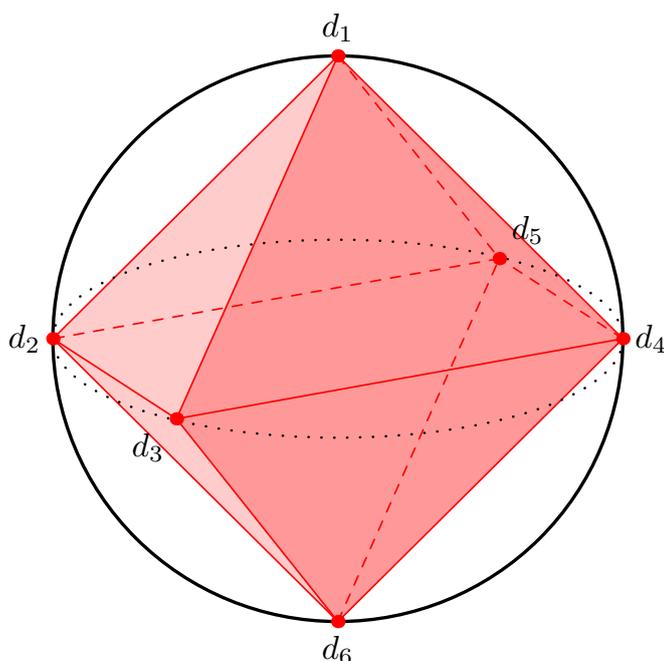


Abbildung 4.1: Starttriangulation der Einheitskugel \mathbb{S}^2 , gegeben durch Oktaeder

ben ist (siehe Abbildung 4.1). Durch die Eckpunkte d_1, d_2, \dots, d_6 des Oktaeders werden acht gleichseitige Kugeldreiecke definiert.

Ausgehend von dieser Starttriangulation, unterteilen wir die Kugeldreiecke stets an ihrer längsten Seite. Ist $\Delta(d_1, d_2, d_3)$ ein gegebenes Dreieck, so ergibt sich durch

$$\begin{aligned} \bar{s} &= \max \left\{ d(d_i, d_j) \mid (i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\} \right\} \\ &= \max \left\{ \arccos(\langle d_i, d_j \rangle) \mid (i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\} \right\} \end{aligned}$$

eine Seite längster Länge, an welcher wir das Dreieck $\Delta(d_1, d_2, d_3)$ mittig unterteilen. Es sei o. B. d. A. $\operatorname{argmax} \bar{s} = (1, 2)$. Dann unterteilen wir entlang der Seite (d_1, d_2) und erhalten die folgende Branch-Vorschrift:

$$\operatorname{BRANCH}(\Delta(d_1, d_2, d_3)) = \left\{ \Delta \left(d_1, \frac{\frac{1}{2}(d_1 + d_2)}{\left\| \frac{1}{2}(d_1 + d_2) \right\|}, d_3 \right), \Delta \left(\frac{\frac{1}{2}(d_1 + d_2)}{\left\| \frac{1}{2}(d_1 + d_2) \right\|}, d_2, d_3 \right) \right\}.$$

Entsprechend erhalten wir die anderen Fälle, indem die Punkte d_2, d_3 , bzw. d_3, d_1 jeweils einmal durch den Mittelpunkt der längsten Seite ersetzt werden. Bei Nicht-Eindeutigkeit wählen wir die Seite mit dem kleinsten ersten Index. Durch sukzessive Anwendung dieser Regel ergibt sich ein Bild, ähnlich der schematischen Darstellung in Abbildung 4.2.

Bemerkung 4.3 (Bisektionsregel) Eine Branch-Vorschrift, bei der ein Dreieck (allgemeiner auch Simplex oder Hyperquader) entlang der längsten Seite geteilt werden ist in der Literatur auch unter dem Namen *Bisektionsregel* (engl. *bisection rule*) zu finden, siehe bspw. [HT90, S.135 ff.].

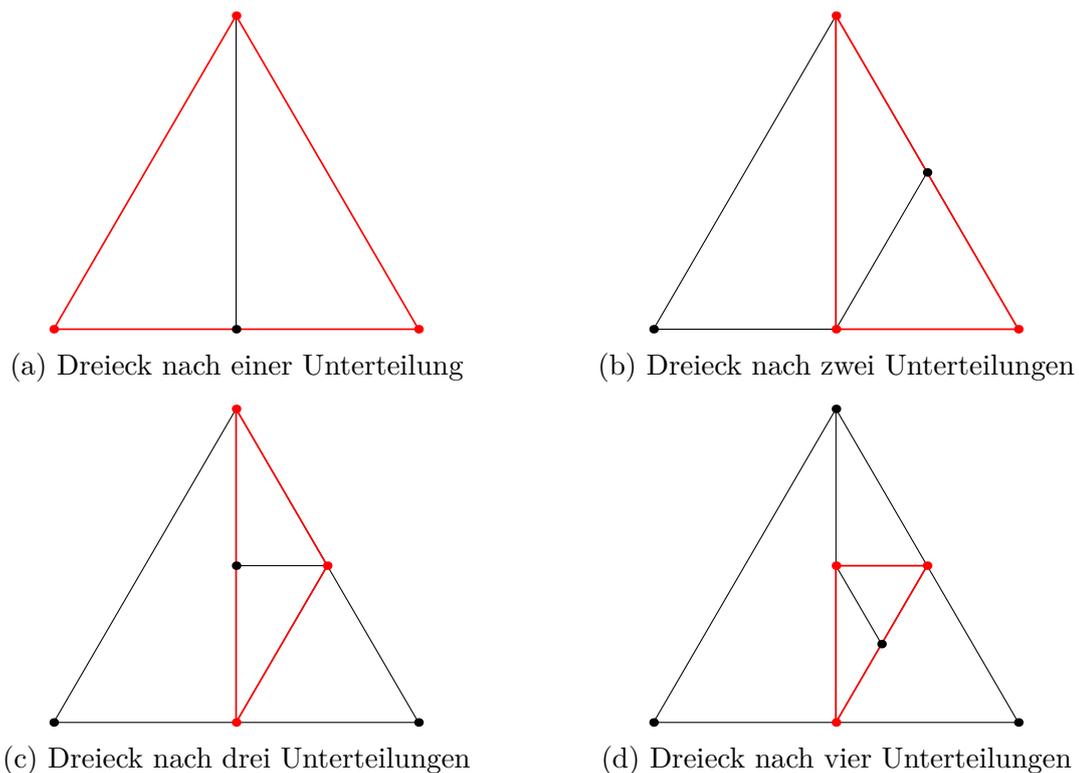


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung einer Unterteilung eines Kugeldreiecks nach vier Branch-Schritten in der Ebene, angewendet auf verschiedene Teildreiecke, aktuell unterteiltes Dreieck jeweils rot gekennzeichnet

4.3 Branch-and-Bound-Verfahren mit unteren Schranken aus geometrischer Konstruktion

Nachdem wir in den vorangegangenen Abschnitten Branch-Vorschriften und untere Schranken für die Fréchet-Funktion auf den Einheitskugeln der Dimension eins und zwei vorgestellt haben, können wir nun mithilfe von Algorithmus 4.2 Branch-and-Bound-Algorithmen auf diesen Räumen formulieren.

4.3.1 Branch-and-Bound-Verfahren für den Einheitskreis

Wir konstruieren zunächst mit der in Abschnitt 3.1 bereitgestellten unteren Schranke einen Branch-and-Bound-Algorithmus für den Einheitskreis. Dazu seien die Punkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^1$ mit zugehörigen Polarwinkeln $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n \in [-\pi, \pi)$ gegeben.

Wir betrachten Algorithmus 4.2 mit

- **BRANCH:** der in Abschnitt 4.2.1 vorgestellten Branch-Vorschrift;
- **LB:** der unteren Schranke aus Kapitel 3, Gleichung (3.5);

- der Anfangsunterteilung $\Delta_1 = [-\pi, \pi)$;
- MID: als Repräsentant eines Intervalls $[\alpha, \beta] \subseteq [-\pi, \pi)$ mit $\alpha < \beta$ soll uns der Mittelpunkt $\frac{1}{2}(\alpha + \beta)$ dieses Intervalls dienen.

Damit erhalten wir ein Branch-and-Bound-Verfahren zur Ermittlung von Fréchet-Mittelwerten der Fréchet-Funktion zu $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ auf dem Kreis.

Man beachte, dass die Ausgabe dieses Algorithmus eine (ε, δ) -Überdeckung der Polarwinkel der Fréchet-Mittelwerte ist. Mithilfe von (2.7) erhalten wir die entsprechenden Punkte auf der Kreislinie.

4.3.2 Branch-and-Bound-Verfahren für die Einheitskugel

Für die Einheitskugel können wir mithilfe der unteren Schranke aus Abschnitt 3.2.2 und der Branch-Vorschrift aus Abschnitt 4.2.2 ein Branch-and-Bound-Verfahren formulieren. Es seien dazu n Datenpunkte $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^2$ gegeben. Dann erhalten wir durch Algorithmus 4.2 mit

- BRANCH: der in Abschnitt 4.2.2 vorgestellten Branch-Regel,
- LB: der unteren Schranke aus Kapitel 3, Gleichung (3.16),
- der Anfangsunterteilung

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \Delta(d_1, d_2, d_3), & \Delta_2 &= \Delta(d_1, d_3, d_4), & \Delta_3 &= \Delta(d_1, d_4, d_5), & \Delta_4 &= \Delta(d_1, d_5, d_2), \\ \Delta_5 &= \Delta(d_2, d_6, d_3), & \Delta_6 &= \Delta(d_3, d_6, d_4), & \Delta_7 &= \Delta(d_4, d_6, d_5), & \Delta_8 &= \Delta(d_5, d_6, d_2) \end{aligned}$$

mit d_1, d_2, \dots, d_8 , wie in (4.1);

- MID: als Repräsentant eines Kugeldreiecks $\Delta(d_1, d_2, d_2)$ mit $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{S}^2$ wählen wir den normierten Schwerpunkt

$$\frac{d_1 + d_2 + d_3}{\|d_1 + d_2 + d_3\|}$$

des durch d_1, d_2, d_3 erzeugten ebenen Dreiecks;

einen Branch-and-Bound-Algorithmus zur Approximation der Fréchet-Mittelwerte der zu x_1, x_2, \dots, x_n gehörigen Fréchet-Funktion.

4.4 Konvergenz und Exaktheit

Wir gehen in diesem Abschnitt auf die maßgeblichen Punkte ein, die bei der Formulierung eines Konvergenz- und Exaktheitsbeweises wie in [EGS16, Abschnitt 3.3] für die hier vorliegenden Versionen aus Abschnitt 4.3 zu beachten wären. Dabei betrachten wir nur den Fall, dass der zugrunde liegende Raum die 2-Sphäre \mathbb{S}^2 ist. Für die Kreislinie erhalten wir durch gleiches Vorgehen ein analoges Ergebnis, gehen aber an dieser Stelle nicht näher darauf ein.

Zum Beweis der Konvergenz und Exaktheit sind im Wesentlichen zwei Eigenschaften des Branch-and-Bound-Verfahrens zu zeigen, die in der Literatur als Vollständigkeit (engl. *exhaustiveness*) der Branch-Vorschrift und Exaktheit im Grenzwert (engl. *exactness in the limit*) des Unterschätzers bezeichnet werden, siehe [LS13, S. 294 ff., Definition 5.4, Definition 5.5, S. 332, Theorem 5.26].

Bei der ersten Eigenschaft fordert man, dass es zu jeder gegebenen Zahl $\delta > 0$ eine Anzahl j_δ an Iterationen gibt, nach der jedes Element, das sich noch in der Liste \mathcal{L} des Algorithmus befindet, eine „Größe“ kleiner oder gleich δ hat. Es liegt in unserem Fall nahe, die Größe solcher Mengen durch ihren Durchmesser zu beschreiben. Dann besagt die Vollständigkeit der Branch-Vorschrift, dass der Durchmesser der sich in der Liste \mathcal{L} befindlichen Einträge für wachsende Iterationszahl gegen Null konvergiert. Diese Eigenschaft gilt für allgemeine Bisektionsregeln, die die zulässige Menge in Simplexes unterteilen, siehe [HT90, Proposition IV.2]. Das Resultat lässt sich auch auf eine Unterteilung in Kugeldreiecke übertragen und ist eine Folgerung aus nachstehendem Lemma.

Lemma 4.4 (Vollständigkeit der Branch-Vorschrift) *Es seien $\Delta, \tilde{\Delta} \subseteq \mathbb{S}^2$ Kugeldreiecke, wobei $\tilde{\Delta}$ aus Δ durch j Unterteilungen gemäß Abschnitt 4.2.2 hervorgehe, $j \in \mathbb{N}$. Dann gilt:*

$$\text{diam}(\tilde{\Delta}) \leq \left(\frac{1}{2}\right)^{\lfloor \frac{j}{3} \rfloor} \text{diam}(\Delta). \quad (4.2)$$

Beweis: Der Durchmesser $\text{diam}(\Delta)$ ist gegeben durch die Länge der längsten Seite des Kugeldreiecks Δ . Da sich diese Länge spätestens nach drei Unterteilungsschritten halbiert, folgt

$$\text{diam}(\tilde{\Delta}) \leq \frac{1}{2} \text{diam}(\Delta),$$

sofern $\tilde{\Delta}$ durch mindestens drei Unterteilungen aus Δ hervorgeht. Dabei werden drei Schritte dann und nur dann benötigt, wenn das Dreieck Δ gleichseitig ist. Durch iteratives Vorgehen folgt somit die Behauptung. Dieses Resultat ersetzt [EGS16, Lemma 2.7]. ■

Die zweite Eigenschaft formalisiert die Forderung danach, dass die maximale Abweichung des Unterschätzers von der Zielfunktion auf einem Bereich Δ mit fallender Größe $\text{diam}(\Delta)$ beliebig gering werde. Diese Eigenschaft gilt auch für die von uns vorgeschlagene untere Schranke g .

Lemma 4.5 (Exaktheit im Grenzwert) *Es seien $\bar{m} \in \mathbb{S}^2$ ein Punkt der zweidimensionalen Einheitssphäre, \hat{F}_n die Fréchet-Funktion zu $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^2$ mit $p \in \mathbb{R}_+$ und $(\Delta_j)_{j=1}^\infty \subseteq \mathbb{S}^2$ eine Folge von Kugeldreiecken, deren Folgenglieder Δ_j alle den Punkt \bar{m} enthalten und die die Eigenschaft $\lim_{j \rightarrow \infty} \text{diam}(\Delta_j) = 0$ besitzt. Weiter sei $g^{(j)}$ die in Abschnitt 3.2.2 angegebene untere Schranke von \hat{F}_n auf Δ_j , $j \in \mathbb{N}$. Dann gilt:*

$$\lim_{j \rightarrow \infty} g^{(j)} = \hat{F}_n(\bar{m}).$$

Beweis: Für die zweidimensionale Einheitssphäre \mathbb{S}^2 gilt $\text{diam}(\mathbb{S}^2) = \pi$. Es sei nun Δ ein beliebiges Kugeldreieck. Für einen gegebenen Datenpunkt können wir das Minimum g_i der Abstandsfunktion auf Δ explizit berechnen. Damit folgt aus dem Beweis von Satz 2.24 die Ungleichung

$$d^p(x_i, m) \geq g_i = \min_{\tilde{m} \in \Delta} d^p(x_i, \tilde{m}) \geq \min_{\tilde{m} \in \Delta} \left(d^p(x_i, \bar{m}) - p\pi^{p-1} d(\tilde{m}, \bar{m}) \right)$$

für alle $m \in \Delta$. Durch Summation ergibt sich somit

$$\begin{aligned} \hat{F}_n(m) &\geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i \\ &\geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \min_{\tilde{m} \in \Delta} \left(d^p(x_i, \bar{m}) - p\pi^{p-1} d(\tilde{m}, \bar{m}) \right) \\ &= \hat{F}_n(\bar{m}) - p\pi^{p-1} \max_{\tilde{m} \in \Delta} d(\tilde{m}, \bar{m}) \\ &\geq \hat{F}_n(\bar{m}) - p\pi^{p-1} \text{diam}(\Delta). \end{aligned} \tag{4.3}$$

Aus der Lipschitz-Stetigkeit von \hat{F}_n mit Konstante $p\pi^{p-1}$, siehe Satz 2.24, folgt

$$\hat{F}_n(m) - \hat{F}_n(\bar{m}) \leq p\pi^{p-1} d(\tilde{m}, \bar{m}). \tag{4.4}$$

Es sei nun $\delta_j = \text{diam}(\Delta_j)$. Mit (4.3) und (4.4) folgt für $m, \tilde{m} \in \Delta_j$ die Ungleichung

$$\hat{F}_n(\bar{m}) + p\pi^{p-1} \delta_j \geq \hat{F}_n(m) \geq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_i^{(j)} \geq \hat{F}_n(\bar{m}) - p\pi^{p-1} \delta_j. \tag{4.5}$$

Für $j \rightarrow \infty$ ergibt sich mit $\delta_j \rightarrow 0+$ und $\bigcap_{j=1}^\infty \Delta_j \supseteq \{\bar{m}\}$ die Gleichheit in (4.5) und es folgt die Exaktheit im Grenzwert für die untere Schranke aus Abschnitt 3.2.2. Dieses Ergebnis ergibt eine zu [EGS16, Lemma 2.5] vergleichbare Aussage. ■

Bemerkung 4.6 Aus der Ungleichungskette (4.3) ergibt sich insbesondere, dass die in Abschnitt 3.2.2 konstruierte untere Schranke für den Minimalwert der Fréchet-Funktion nie schlechter ist als jene, mit dem Lipschitz-Unterschätzer konstruierte, siehe Folgerung 2.25.

Mit den beiden oben aufgeführten Resultaten kann man die Aussagen aus [EGS16, Lemma 3.3. – Lemma 3.5, Theorem 3.6] mit kleinen Anpassungen, entsprechend für die hier aufgeführte Fassung übernehmen. Dabei beachte man, dass die Abstandsbestimmung zweier Vektoren x, y via $\|x - y\|$ durch die Metrik $d(x, y)$ substituiert werden muss. Wir erhalten die folgende Aussage:

Theorem 4.7 (Konvergenz und Exaktheit) *Es seien $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^2$ und \hat{F}_n die zugehörige Fréchet-Funktion bezüglich der intrinsischen Metrik der Einheitssphäre. Dann gelten für Algorithmus 4.2 aus Abschnitt 4.3.2 die folgenden Aussagen:*

- (1) *Der Algorithmus terminiert nach endlich vielen Iterationen.*
- (2) *Die Ausgabemenge A des Algorithmus ist eine (ε, δ) -Überdeckung der Menge der Fréchet-Mittelwerte zu \hat{F}_n .*

Mit diesem Theorem folgt die Korrektheit des in Abschnitt 4.3 konstruierten Branch-and-Bound-Verfahrens zur Ermittlung der Fréchet- p -Mittelwerte. Dessen Performance wollen wir im folgenden Kapitel für verschiedene Testinstanzen näher untersuchen.

5 Testinstanzen und Anwendung

Dieses Kapitel widmet sich der Implementation der, in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten Algorithmen, sowie deren Anwendung auf verschiedene Datensätze. Ferner gehen wir auf Fragestellungen im Bezug auf allgemeine numerische Aspekte der Implementation ein und sprechen Probleme, die speziell bei den einzelnen Beispielen auftreten an.

Hierzu haben wir den Branch-and-Bound-Algorithmus aus Algorithmus 4.2, sowie die verschiedenen unteren Schranken und Branch-Vorschriften in der Programmiersprache R [R C16] implementiert. Der verwendete Quellcode findet sich in Anhang A. Um eine möglichst große Aussagekraft der numerischen Experimente zu erreichen, verwenden wir zufällige Datenpunkte, unter anderem solche, die die Eigenschaft besitzen auf der k -Sphäre (oder einem Teilbereich davon) möglichst gleichmäßig (*uniform*) verteilt zu sein, $k = 1, 2$. Den Begriff der uniformen Verteilung präzisieren wir in Abschnitt 5.2.

Im gesamten Kapitel betrachten wir die Fréchet-Funktion stets zu $p = 2$.

5.1 Definition der Testinstanzen

Wir widmen uns zunächst der Definition der Testinstanzen und wollen deren Auswahl motivieren. Dazu gehen wir auf die unterschiedlichen, zugrunde liegenden Räume \mathbb{S}^1 bzw. \mathbb{S}^2 jeweils gesondert ein.

5.1.1 Testinstanzen auf dem Einheitskreis

Für auf dem Einheitskreis verteilte Daten wollen wir den in Abschnitt 4.3.1 vorgestellten Branch-and-Bound-Algorithmus auf folgende Testinstanzen anwenden:

- (1) uniform auf einem (zufällig ausgewählten) Halbkreis verteilte Punkte,
 - (2) uniform auf dem Einheitskreis verteilte Punkte, sowie auf
 - (3) ein regelmäßiges, in den Einheitskreis einbeschriebenes n -Eck, welches um einen zufälligen Winkel gedreht wurde.
-

Die Auswahl der Beispiele wollen wir im Folgenden kurz motivieren.

Für uniform auf dem Einheitskreis (bzw. einem Halbkreis) verteilte Daten sind die Fréchet-Mittelwerte fast sicher eindeutig bestimmt, siehe [BP03, Bemerkung 2.6], wenngleich die Zielfunktion mehrere lokale Minima besitzen kann. Sind die Daten nur auf einem (offenen) Halbkreis verteilt, so hat die Fréchet-Funktion auf diesem sogar nur ein lokales Minimum, vgl. [Afs11, Theorem 2.1], und es ist daher ein schnelles Konvergenzverhalten zu erwarten.

Die Ermittlung eines globalen Minimums für auf dem ganzen Kreis uniform verteilte Daten wird hingegen länger dauern, da lokale Minima möglicherweise erst sehr spät aus der Liste \mathcal{L} noch zu bearbeitender Elemente eliminiert werden. Allerdings ist die Annahme, dass die Daten auf dem ganzen Kreis verteilt sind weitaus realistischer, als die, dass sie sich nur auf einem Halbkreis befinden. Dafür könnte man schließlich auch ein lokales Verfahren benutzen. Durch mehrfaches, unabhängiges Ziehen von Datenpunkten und Ausführen des Algorithmus erhält man eine Aussage über die durchschnittliche Performance des Verfahrens zur Ermittlung eines einzelnen globalen Minimums.

Bei einem regelmäßigen n -Eck tritt der Fall nichteindeutiger Fréchet-Mittelwerte auf. Diese lassen sich explizit berechnen. Ist n ungerade, so sind die Fréchet-Mittelwerte des n -Ecks die Ecken selbst. Ist n gerade und sind $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{S}^1$ die Ecken des n -Ecks mit Polarwinkeln $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$, so sind die Punkte $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n$ mit den Polarwinkeln $\varphi_1 + \frac{\pi}{n}, \varphi_2 + \frac{\pi}{n}, \dots, \varphi_n + \frac{\pi}{n}$ die Minimierer der zu x_1, x_2, \dots, x_n gehörigen Fréchet-Funktion. Die Addition ist dabei als Addition von Winkeln in $[-\pi, \pi)$ zu verstehen. Auf diese Weise ergibt sich eine einfache Möglichkeit zur Überprüfung der Ergebnisse. Allerdings wird die Ermittlung der Minimierer aufgrund deren Nichteindeutigkeit erwartungsgemäß ein Vielfaches länger dauern.

Wir werden zudem alle Testinstanzen für eine unterschiedliche Anzahl an Eingangsdaten ausführen, da die Laufzeit des Algorithmus maßgeblich von der Größe n der Eingangsdatensmenge abhängt.

Bemerkung 5.1 Wir möchten an dieser Stelle darauf hinweisen, dass zur Ermittlung von Fréchet-Mittelwerten auf dem Einheitskreis eine Möglichkeit zur (allgemeinen) expliziten Berechnung existiert, siehe [HH15]. Diese nutzen wir zusätzlich, um Anzahl und Lage der Fréchet-Mittelwerte auch für die Beispiele der uniform verteilten Daten zu ermitteln.

5.1.2 Testinstanzen auf der Kugeloberfläche

Leider ist für den Fall, dass der zugrunde liegende Raum die Oberfläche der Einheitskugel ist, bisher keine solche explizite Methode zur Bestimmung der Fréchet-Mittelwerte bekannt. Deswegen greifen wir zu deren Approximation auf die in Abschnitt 4.3.2 vorgestellte Branch-

and-Bound-Methode zurück. Um deren Eigenschaften zu demonstrieren, betrachten wir die folgenden mathematischen Testbeispiele:

- (1) uniform auf einer Hemisphäre der Kugel verteilte Punkte,
- (2) uniform auf der Einheitskugel verteilte Punkte,
- (3) ein in die Sphäre einbeschriebenes Tetraeder, welches um eine zufällige Ursprungsgerade um einen zufälligen Winkel rotiert wurde, sowie
- (4) zwei diametral gegenüberliegende Punkte.

Die Instanzen mit uniform verteilten Eingangsdatenpunkten werden wir dabei (aus bereits o. g. Gründen) für unterschiedliche Anzahlen ausführen. Die Auswahl der Beispiele wollen wir nachfolgend kurz motivieren. Für die ersten drei Probleminstanzen gelten analoge Begründungen, wie für den Einheitskreis. Für uniform verteilte Daten ist erneut mit Wahrscheinlichkeit eins ein eindeutiger Fréchet-Mittelwert zu erwarten. Dabei wird die Konvergenzgeschwindigkeit des Algorithmus im Fall der auf ausschließlich einer Hemisphäre verteilten Daten erheblich größer sein, da hier nur ein lokales Minimum existiert, vgl. [Afs11, Theorem 2.1].

Für das in die Sphäre einbeschriebene Tetraeder lassen sich die Fréchet-Mittelwerte explizit berechnen, wodurch sich eine einfache Möglichkeit ergibt, unsere Ergebnisse zu überprüfen. Der Fréchet-Mittelwert ist hier jedoch nicht eindeutig – es gibt vier Fréchet-Mittelwerte, die vier Ecken des Tetraeders, welche diskret auf der Kugel verteilt sind. Es ist, wie schon im Falle der nicht-eindeutigen Fréchet-Mittelwerte auf dem Kreis, eine lange Laufzeit des Algorithmus zu erwarten.

Für zwei diametral gegenüberliegende Punkte tritt auf der Kugel der Fall auf, dass es überabzählbar unendlich viele Fréchet-Mittelwerte gibt; im Falle von Nord- und Südpol etwa der ganze Äquator. Dieser Fall kann auf dem Einheitskreis nicht eintreten. Dort gibt es höchstens so viele Fréchet-Mittelwerte, wie gegebene Datenpunkte, siehe [HH15, Korollar 3.5]. Erwartungsgemäß wird der Algorithmus sehr lange benötigen um eine Approximation eines ganzen Großkreises auszugeben. Diese Vermutung wollen wir überprüfen.

5.2 Erzeugung der Eingangsdaten

Die Eingangsdaten der Testinstanzen sollen, wie oben bereits erläutert, einer Wahrscheinlichkeitsverteilung entstammen, um Aussagen über den Algorithmus unabhängig von der Lage der Punkte treffen zu können. Die genaue Vorgehensweise zur Erzeugung dieser Daten stellen wir in diesem Abschnitt dar.

Wir betrachten zunächst die Testinstanzen auf dem Einheitskreis.

- (1) Auf dem Einheitskreis uniform verteilte Daten erhält man durch die Erzeugung gleichverteilter Winkel $\varphi \in [-\pi, \pi)$ und Betrachtung der Punkte $(\cos \varphi \quad \sin \varphi)^\top$, siehe [MJ09, Abschnitt 3.5.3]. Diese Winkel werden mithilfe der in \mathbb{R} implementierten Funktion `runif` erzeugt. Für Teilbereiche (hier: Kreisbögen) generiert man die Datenpunkte analog mittels gleichverteilter Polarwinkel über einem geeigneten Intervall.
- (2) Um uniform auf einem (zufälligen) Halbkreis verteilte Punkte zu erhalten, erzeugen wir zunächst gleichverteilte Winkel $\varphi \in [-\pi, 0)$ und drehen die zugehörigen Punkte anschließend um einen zufälligen Winkel $\psi \in [-\pi, \pi)$, d. h., wir betrachten

$$\begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi \\ -\sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi - \psi) \\ \sin(\varphi - \psi) \end{pmatrix}$$

mit φ, ψ gleichverteilt auf $[-\pi, 0)$ bzw. $[-\pi, \pi)$. Die Rotation um einen zufälligen Winkel ψ erreicht man folglich durch Subtraktion einer Realisierung ψ einer auf $[-\pi, \pi)$ gleichverteilten Zufallsvariable von den ursprünglich erzeugten Polarwinkeln.

- (3) Zur Erzeugung der Daten für die dritte Testinstanz betrachten wir zunächst das n -Eck mit den Ecken x_1, x_2, \dots, x_n und zugehörigen Polarwinkeln $\varphi_i = -\pi + \frac{(i-1)\pi}{n}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Durch eine Rotation analog zu (2) erhalten wir dann ein regelmäßiges n -Eck auf dem Kreis, welches um einen zufälligen Winkel gedreht wurde.

Eine mathematisch exakte Definition der uniformen Verteilung auf einer k -Sphäre höherer Dimension, $k \geq 2$, ist hingegen zunächst nicht unmittelbar klar, ebenso wie die Erzeugung von zufälligen Punkten aus einer solchen Verteilung. Daher wollen wir mit der nachstehenden Definition den Begriff der Gleichverteilung auf der k -dimensionalen Einheitskugel präzisieren.

Definition 5.2 (uniforme Verteilung, [MJ09, Abschnitt 9.3.1]) Es sei X ein $(k+1)$ -dimensionaler Zufallsvektor über einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$ mit Werten auf der k -Sphäre \mathbb{S}^k , $k \in \mathbb{N}$. Dann heißt X *uniform verteilt auf der k -dimensionalen Einheitskugel*, falls die Wahrscheinlichkeit einer messbaren Teilmenge von \mathbb{S}^k proportional zu ihrem k -dimensionalen Flächeninhalt ist, d. h. falls

$$\mathbb{P}_X(A) = \frac{\nu(A)}{\nu(\mathbb{S}^k)} \quad (5.1)$$

für alle messbaren Mengen $A \subseteq \mathbb{S}^k$ gilt und ν das Oberflächenmaß einer Hyperfläche des \mathbb{R}^{k+1} (vgl. [AE01, Abschnitt XII.1]) ist. Entsprechend definieren wir uniforme Verteilungen auf Teilmengen $S \subseteq \mathbb{S}^k$ der k -Sphäre mit positivem Oberflächenmaß.

Bemerkung 5.3 Die uniforme Verteilung wird auch als *Gleichverteilung* bezeichnet. Sie ist die einzige Verteilung auf der k -Sphäre \mathbb{S}^k , $k \in \mathbb{N}$, welche invariant unter den orthogonalen Transformationen des \mathbb{R}^{k+1} ist, siehe [MJ09, Abschnitt 9.3.1]. Dies wollen wir im Folgenden als Charakterisierung nutzen.

Lemma 5.4 *Es sei $X \sim \mathcal{N}(0_{k+1}, I_{k+1})$ ein $(k+1)$ -dimensionaler, standardnormalverteilter Zufallsvektor, $k \in \mathbb{N}$. Dabei bezeichne I_{k+1} die Einheitsmatrix der Ordnung $k+1$. Dann ist die Zufallsvariable $Y = \frac{X}{\|X\|}$ uniform verteilt auf der k -Sphäre \mathbb{S}^k .*

Beweis: Da X stetig verteilt ist, ist $X \neq 0_{k+1}$ fast sicher und die Zufallsvariable Y ist somit fast sicher definiert. Es sei nun $Q \in \mathbb{R}^{(k+1) \times (k+1)}$ eine orthogonale Matrix. Dann ist $QX \sim \mathcal{N}(Q0_{k+1}, Q^\top I_{k+1} Q) = \mathcal{N}(0_{k+1}, I_{k+1})$, siehe [Hüb09, Folgerung 6.12], d. h., X ist invariant unter orthogonalen Transformationen. Da Y aus X durch eine messbare Transformation hervorgeht, gilt dies auch für Y . Aufgrund von $\|Y\| = 1$ fast sicher folgt dann, dass Y uniform verteilt auf \mathbb{S}^k ist, siehe Bemerkung 5.3. ■

Mithilfe von Lemma 5.4 können wir nun die Vorgehensweise zur Erzeugung der Beispieldatenpunkte auf der Kugeloberfläche zu formulieren.

- (1) Zur Erzeugung von uniform auf der zweidimensionalen Einheitssphäre verteilten Daten genügt es nach Lemma 5.4, einen dreidimensionalen, standardnormalverteilten Zufallsvektor zu generieren (dies ist mithilfe der Funktion `rnorm(3)` in R möglich) und diesen anschließend auf Länge eins zu normieren.
- (2) Um Daten zu erzeugen, welche auf einer zufälligen Halbsphäre uniform verteilt sind, erzeugen wir zunächst auf der ganzen Sphäre gleichverteilte Punkte x_1, x_2, \dots, x_n , sowie einen zusätzlichen zufälligen Punkt n_E der 2-Sphäre. Durch n_E wird mittels

$$H = \{m \in \mathbb{R}^3 \mid \langle m, n_E \rangle \geq 0\} \cap \mathbb{S}^2$$

eine (a priori zufällige) Halbsphäre aufgespannt. Gilt nun für das Skalarprodukt eines Punktes x_i mit n_E die Ungleichung $\langle x_i, n_E \rangle < 0$, so multiplizieren wir ihn mit -1 , sodass er in H liegt, $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Diese Transformation ist eine Spiegelung an der, durch n_E erzeugten Ebene E . Der erzeugte Punkt ist dann nach Transformation, bedingt darauf, dass wir ihn transformieren müssen, so verteilt, als wäre er bereits ohne Spiegelung Element der Halbsphäre H gewesen. Auf diese Weise erhalten wir auf einer zufälligen Halbsphäre gleichverteilte Daten.

- (3) Durch die Punkte

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

wird ein, in die Sphäre \mathbb{S}^2 einbeschriebenes Tetraeder definiert. Wir erzeugen nun einen zufälligen, auf \mathbb{S}^2 uniform verteilten Vektor a , sowie einen zufälligen, auf $[-\pi, \pi)$ gleichverteilten Winkel α . Durch a und α wird eine Rotation R um die Ursprungsgerade $\text{span}\{a\}$ mit Winkel α definiert; für die explizite Form der Rotationsmatrix R verweisen wir auf [Koe97, Abschnitt § 3.8]. Die Punkte aus (5.2) bilden auch nach Rotation ein Tetraeder. Wir erhalten somit Daten aus der aus Abschnitt 5.1.2 (3) gewünschten Verteilung.

- (4) Zur Erzeugung von Daten des letzten Beispiels aus Abschnitt 5.1.2 genügt es, eine Realisierung x einer auf der 2-Sphäre gleichverteilten Zufallsvariable zu betrachten. Die Punkte $x_1 = x$, $x_2 = -x$ liegen sich dann diametral gegenüber.

5.3 Implementierungsdetails und numerische Aspekte

Wir gehen in diesem Abschnitt auf einige Gesichtspunkte ein, die bei der Implementation der Branch-and-Bound-Algorithmen zu beachten sind und sprechen darüber hinaus Aspekte hinsichtlich numerischer Effizienz an.

Die Implementation des Branch-and-Bound-Verfahrens für den Einheitskreis gestaltet sich als einfach. Die Abstände zwischen zwei Punkten berechnen wir als Abstände der zugehörigen Polarwinkel vermöge (2.8). Wir müssen folglich nur den Abstand zweier reeller Zahlen bestimmen. Da sich die untere Schranke für den Minimalwert der Fréchet-Funktion durch Summation von solchen Abständen ergibt, gibt es hierbei keine weiteren Besonderheiten bei der Implementation zu beachten.

Die Implementation des Branch-and-Bound-Verfahrens auf der Kugeloberfläche erweist sich dagegen als weitaus aufwendiger. Wir wollen nachstehend einige Punkte aufzeigen, die zu beachten sind.

Skalarprodukt

Die Bestimmung des Abstands zweier Vektoren der zweidimensionalen Einheitssphäre erfolgt durch Berechnung des Arkuskosinus des Skalarproduktes dieser beiden, vgl. (2.9). Dabei ist zu beachten, dass durch numerische Ungenauigkeiten dieses Skalarprodukt betragsmäßig geringfügig größer als eins werden kann, sofern die Vektoren nur einen sehr kleinen Winkel oder einen Winkel von annähernd π einschließen. In diesem Fall wäre der Arkuskosinus nicht definiert. Um Fehler durch diese Ungenauigkeiten abzufangen, wurde eine Sicherheitsabfrage implementiert. Diese gibt gemäß dem Falle, dass das Skalarprodukt betragsmäßig größer als eins ist, in Abhängigkeit vom Vorzeichen des Skalarproduktes den Winkel 0 bzw. π zurück. Eine entsprechende Anpassung wurde für die Bestimmung des Arkussinus, welcher zur Berechnung der unteren Schranke ggf. berechnet werden muss, implementiert.

QR-Zerlegung

Zur Bestimmung der unteren Schranke der Fréchet-Funktion auf einem gegebenen Kugeldreieck $\Delta = \Delta(d_1, d_2, d_3)$, müssen pro Datenpunkt x_ℓ , $\ell = 1, 2, \dots, n$ bis zu vier Tests durchgeführt werden, ob der Datenpunkt in einem entsprechenden Dreieck enthalten ist. Dies sind im Einzelnen der Test

(1) Ist $x_\ell \in \Delta(d_1, d_2, d_3)$?

und falls dies verneint wird, zusätzlich noch die Tests

(2) Ist $x_\ell \in \Lambda(d_i, d_j)$ mit $(i, j) \in \{(1, 2), (2, 3), (3, 1)\}$?

Da die Normaleneinheitsvektoren n_{ij} für (2) im Falle $x_\ell \notin \Delta(d_1, d_2, d_3)$ ohnehin berechnet werden müssen und dies zumeist für mindestens ein x_ℓ eintreten wird, können wir n_{ij} auch zu Beginn ermitteln und zur Überprüfung von (1) Satz 3.14 benutzen. Wir müssen dann nur drei Skalarprodukte berechnen, was sich numerisch effizienter gestaltet als das Lösen eines Gleichungssystems.

Um zu testen, ob $x_\ell \in \Lambda(d_i, d_j)$ gilt, können wir gemäß Lemma 3.24 das inhomogene lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} d_i & d_j & n_{ij} \end{pmatrix} \lambda = x_\ell \quad (5.3)$$

lösen und die Vorzeichen des Lösungsvektors überprüfen. Bestimmen wir die QR-Zerlegung der Matrix $\begin{pmatrix} d_i & d_j & n_{ij} \end{pmatrix} = QR$, so lässt sich durch Rückwärtseinsetzen des Systems $Rx = Q^\top x_\ell$ dieses Problem effizient lösen, vgl. [Mei15, Abschnitt 3.3]. Dabei ist Q eine orthogonale Matrix und R eine obere Dreiecksmatrix. De facto berechnet man bei der Multiplikation $Q^\top x_\ell$ nur drei Skalarprodukte; der Mehraufwand besteht also in der Bestimmung der QR-Zerlegung.

Offenbar ist die linke Seite des Gleichungssystems (5.3) für alle x_ℓ , $\ell = 1, 2, \dots, n$, identisch. Es genügt daher, die QR-Zerlegung der Matrix $\begin{pmatrix} d_i & d_j & n_{ij} \end{pmatrix}$ einmal zu berechnen. Wir können diese dann für alle x_ℓ , $\ell = 1, 2, \dots, n$, verwenden. Zur Bestimmung der Matrizen Q und R wurden die in R implementierten Funktionen `qr.Q` bzw. `qr.R`, zum Durchführen der Rückwärtssubstitution die Funktion `backsolve` verwendet.

Sicherheitspuffer

Die im Algorithmus verwendeten Vergleiche, wie etwa $\bar{u} \leq v_{glob}$, können numerisch nur bis auf eine gewisse Genauigkeit geprüft werden. Um zu verhindern, dass durch numerische Ungenauigkeiten in Zeile 8 bzw. Zeile 12 Teilbereiche von Algorithmus 4.2 eliminiert werden, welche potenziell noch (ε, δ) -minimale Punkte enthalten könnten, wurde bei den Vergleichsabfragen ein Sicherheitspuffer η eingebaut, dessen Wert ein zusätzlicher Eingangsparameter

des Verfahrens ist (vgl. Anhang A). Er ist vom Benutzer an die Gegebenheiten der Instanz individuell anzupassen. Die so vom Algorithmus ausgegebene Menge A ist folglich eine Obermenge einer (ε, δ) -Überdeckung.

5.4 Numerische Umsetzung der Testinstanzen

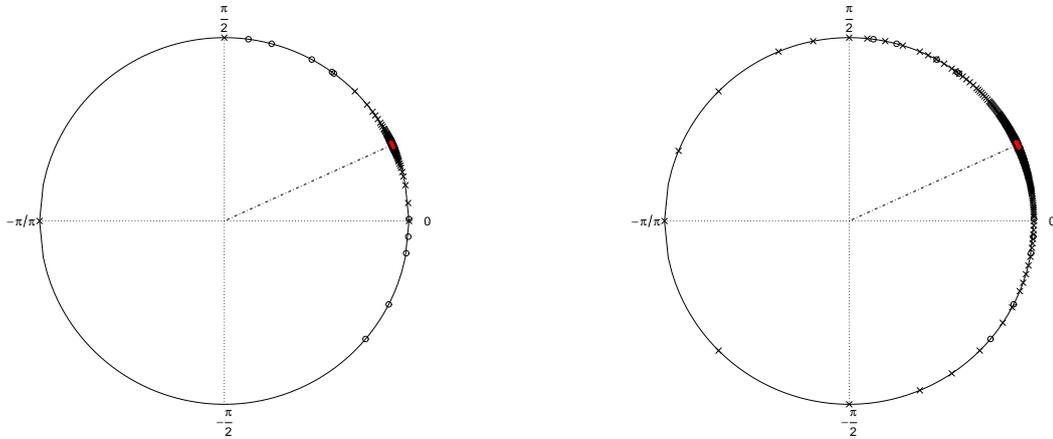
In diesem Abschnitt gehen wir auf die numerische Umsetzung der in Abschnitt 5.1 vorgestellten Testinstanzen ein und werten die Ergebnisse aus. Wir gehen auf die verschiedenen zugrunde liegenden Räume \mathbb{S}^1 und \mathbb{S}^2 jeweils separat ein. Als Vergleichskriterien für die Performance des Algorithmus auf den verschiedenen Testbeispielen dienen die Laufzeit in Sekunden, die Anzahl der benötigten Iterationen, sowie das Oberflächenmaß $\nu(A)$ der ausgegebenen Approximation A .

Alle Berechnungen wurden mit einer Rechengenauigkeit von 10^{-16} durchgeführt. Den Sicherheitspuffer η haben wir auf $\eta = 10^{-8}$ festgelegt, was angesichts der relativ geringen Genauigkeiten von $\varepsilon = 10^{-3}$ bzw. $\varepsilon = 10^{-1}$ und $\delta = 10^{-1}$ in den entsprechenden Instanzen, unserer Ansicht nach ausreichend ist. Für die Berechnungen wurde ein Computer mit Betriebssystem Windows 7, Intel Core™ i5-5200U 2,2 GHz Prozessor und 4 GB Arbeitsspeicher verwendet.

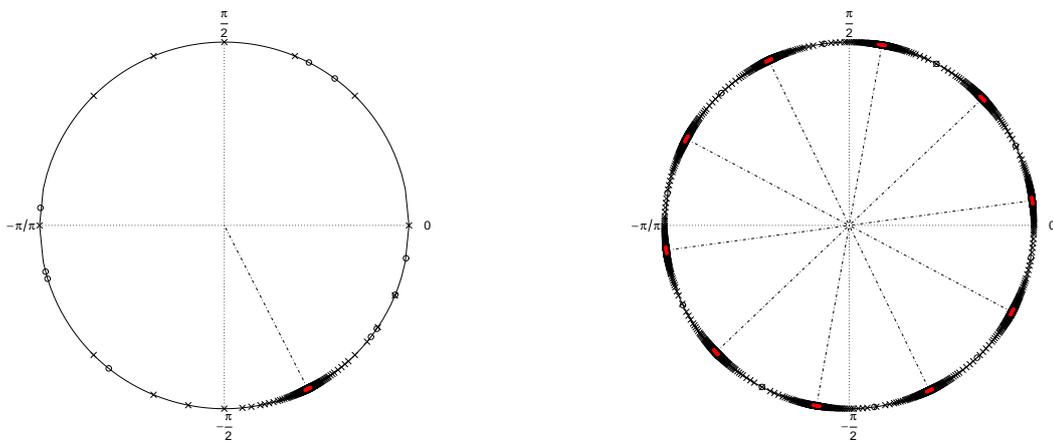
5.4.1 Numerik für Instanzen auf dem Einheitskreis

Wir betrachten die in Abschnitt 5.1.1 definierten Testinstanzen auf der Kreislinie. Für das Beispiel des regelmäßigen n -Ecks betrachten wir $n = 4$ und $n = 10$ Punkte, für die Testinstanzen der gleichverteilten Daten wurden $n = 10$ und $n = 100$ Datenpunkte, jeweils unabhängig aus einer Gleichverteilung auf einem entsprechenden Teilintervall von $[-\pi, \pi)$ gemäß Abschnitt 5.2 gezogen. Die Berechnung der Fréchet-Mittelwerte mithilfe des Algorithmus aus Abschnitt 4.3.1 wurde jeweils $r = 1.000$ mal wiederholt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.1 aufgelistet; die berechneten Approximationen jeweils einer Testinstanz sind in Abbildung 5.1 grafisch dargestellt. Die dort eingezeichneten Richtungen der Fréchet-Mittelwerte wurden mit dem Algorithmus aus [HH15] berechnet. Die theoretische Anzahl q an Fréchet-Mittelwerten (vgl. Abschnitt 5.1.1) wurde in der dritten Spalte in Tabelle 5.1 notiert. Alle weiteren, dort aufgeführten Angaben sind Durchschnittswerte. Zusätzlich dazu wurde die empirische Standardabweichung der beobachteten Werte angegeben. Für ε, δ wurden die Werte $\varepsilon = 10^{-3}$, sowie $\delta = 10^{-1}$ festgelegt.

Mit dem Lipschitz-Unterschätzer aus Beispiel 2.26 als untere Schranke, wurde der Branch-and-Bound-Algorithmus aus Abschnitt 4.3.1 ceteris paribus für das Beispiel der uniform auf dem Halbkreis verteilten Daten getestet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.1b aufgeführt.



(a) uniforme Verteilung auf einem Halbkreis (b) uniforme Verteilung auf einem Halbkreis
(mit Lipschitz-Unterschätzer)



(c) uniforme Verteilung auf dem Kreis

(d) Verteilung auf n -Eck

Abbildung 5.1: Vom Branch-and-Bound-Algorithmus berechnete Approximationen der Fréchet-Mittelwerte (rot) zu je $n = 10$ gegebenen Datenpunkten (\circ) mit Genauigkeiten $(\varepsilon, \delta) = (10^{-3}, 10^{-1})$. Die Stellen, an denen der Kreis unterteilt wurde, sind durch Kreuze (\times) markiert. Die Richtungen der Fréchet-Mittelwerte sind durch gestrichpunktete Linien ($- \cdot$) skizziert.

Verteilung	n	q	Laufzeit (in $s \pm$ s.d.)	Iterationen (\pm s.d.)	$\nu(A)$ (\pm s.d.)
uniform	10	1	$0,24 \pm 0,08$	193 ± 42	$2,1^\circ \pm 0,18^\circ$
Halbkreis	100	1	$0,82 \pm 0,04$	217 ± 7	$2,0^\circ \pm 0,06^\circ$
uniform	10	1	$0,56 \pm 0,23$	331 ± 85	$2,2^\circ \pm 0,25^\circ$
Kreis	100	1	$2,35 \pm 0,49$	530 ± 96	$1,9^\circ \pm 0,19^\circ$
n -Eck	4	4	$14,03 \pm 1,91$	1.723 ± 4	$7,9^\circ \pm 0,01^\circ$
	10	10	$79,25 \pm 2,94$	4.222 ± 2	$19,9^\circ \pm 0,01^\circ$

(a) Branch-and-Bound mit unterer Schranke aus geometrischer Konstruktion

Verteilung	n	q	Laufzeit (in $s \pm$ s.d.)	Iterationen (\pm s.d.)	$\nu(A)$ (\pm s.d.)
uniform	10	1	$13,92 \pm 2,71$	1.743 ± 2	$2,0^\circ \pm 0,01^\circ$
Halbkreis	100	1	$13,64 \pm 0,50$	1.746 ± 42	$2,0^\circ \pm 0,01^\circ$

(b) Branch-and-Bound mit Lipschitz-Unterschätzer

Tabelle 5.1: Durchschnittliche Performance des Branch-and-Bound-Algorithmus auf dem Kreis zur Ermittlung einer (ε, δ) -Überdeckung A der Menge der Minima (mit zugehöriger Standardabweichung), $\varepsilon = 10^{-3}$, $\delta = 10^{-1}$

Die Auflistung zeigt, dass bereits für das Beispiel der uniform auf einem Halbkreis verteilten Daten, das Branch-and-Bound-Verfahren unter Benutzung der unteren Schranke mit Lipschitz-Unterschätzer einen, im Vergleich zur unteren Schranke nach der geometrischen Konstruktion, unverhältnismäßig hohen Rechenaufwand zur Bestimmung des (eindeutigen) Fréchet-Mittelwertes benötigt. Die Anzahl der Eingangsdaten und damit die Dauer der Funktionsauswertung der Fréchet-Funktion fällt dabei offenbar kaum ins Gewicht.

Der hohe Rechenaufwand bei der Variante mit Lipschitz-Unterschätzer ist auf die schlechte Genauigkeit des Unterschätzers zurückzuführen. Durch eine Vielzahl an Unterteilungsschritten erhöht sich die Laufzeit. Dies wird beim Vergleich der Abbildungen 5.1a und 5.1b besonders deutlich. Es ist davon auszugehen, dass bei allen anderen Testinstanzen eine ähnlich schlechte Performance zu erwarten ist. Für sie haben wir daher keine weiteren numerischen Tests durchgeführt. Ferner verzichten wir darauf, Beispiele für die Kugeloberfläche mithilfe des Lipschitz-Unterschätzers zu untersuchen und fokussieren uns stattdessen auf die untere Schranke nach der geometrischen Konstruktion aus Kapitel 3.

Wir betrachten nun die Daten aus Tabelle 5.1a und dabei zunächst die Werte zu $n = 10$. Für das Beispiel der uniform auf einem Halbkreis verteilten Daten gibt der Algorithmus nach erwartungsgemäß kurzer Zeit und wenigen Iterationen eine (ε, δ) -Überdeckung des Fréchet-Mittelwertes aus. Für die uniform auf dem ganzen Kreis verteilten Daten fällt das Ergebnis nicht wesentlich schlechter aus. Nichtsdestotrotz benötigt das Verfahren etwa doppelt so lan-

ge. Dies ist auf eine Vielzahl lokaler Minimalstellen zurückzuführen, welche möglicherweise sehr lange in der Liste \mathcal{L} noch zu untersuchender Elemente verbleiben.

Für die Punkte, die ein gleichseitiges n -Eck auf dem Einheitskreis bilden, stellen wir eine um ein Vielfaches höhere Laufzeit fest. Dies liegt darin begründet, dass wir in diesem Beispiel keinen eindeutigen Fréchet-Mittelwert haben – der Algorithmus muss eine (ε, δ) -Überdeckung von n Minimierern berechnen, was sich in einer entsprechend höheren Anzahl von Iterationen (siehe auch Abbildung 5.1d) und, eingehend damit, höherem Zeitaufwand widerspiegelt.

Tabelle 5.1 lässt zudem, bei Betrachtung der Werte für mehr bzw. weniger als zehn Datenpunkte darauf schließen, dass die Laufzeit zwar von der Anzahl der Eingangsdaten abhängt, die Anzahl der Fréchet-Mittelwerte jedoch einen weitaus höheren Einfluss hat. Da bei allen angegebenen Werten die Standardabweichung relativ klein ist, können die Durchschnittswerte als repräsentativ für die Performance des Algorithmus bei Eingabe einer entsprechenden Testinstanz angesehen werden.

Die explizite Bestimmung der Fréchet-Mittelwerte aller Beispiele mit [HH15] benötigt hingegen für alle Instanzen nur wenige Zehntelsekunden und liefert darüber hinaus exakte Werte für diese. Sie ist daher zweifelsohne dem in Abschnitt 4.3.1 vorgestellten Branch-and-Bound-Algorithmus vorzuziehen.

5.4.2 Numerik für Instanzen auf der Kugeloberfläche

Wir betrachten die Testinstanzen aus Abschnitt 5.1.2. Für die uniform verteilten Daten wurden einmal je $n = 10$ und einmal je $n = 100$ Datenpunkte auf die in Abschnitt 5.2 beschriebene Weise gezogen. Die Berechnung der Fréchet-Mittelwerte wurde $r = 100$ mal wiederholt. Für die Fälle des Tetraeders und der diametral gegenüberliegenden Punkte haben wir, aufgrund des hohen Rechenaufwandes, lediglich $r = 10$ Wiederholungen durchgeführt. Die Genauigkeiten ε, δ wurden auf $\varepsilon = 10^{-1}$ und $\delta = 10^{-1}$ gesetzt. Die Ergebnisse der Berechnungen sind in Tabelle 5.2 zu sehen. Die theoretische Anzahl

$$q = \left| \operatorname{argmin}_{m \in \mathbb{S}^2} \hat{F}_n(m) \right| = \left| \left\{ \bar{m} \in \mathbb{S}^2 \mid \bar{m} \text{ ist Fréchet-Mittelwert zu } \hat{F}_n \right\} \right|$$

an Fréchet-Mittelwerten (vgl. Abschnitt 5.1.2) wurde in der dritten Spalte notiert. Alle weiteren, aufgeführten Werte sind Durchschnittswerte und jeweils mit zugehöriger empirischer Standardabweichung angegeben. Das Oberflächenmaß $\nu(A)$ der (ε, δ) -Approximation A findet sich in der letzten Spalte der Tabelle 5.2. Die Ergebnisse sind dabei zur besseren Interpretation im Verhältnis zur Gesamtoberfläche $\nu(\mathbb{S}^2) = 4\pi$ der Einheitskugel angegeben.

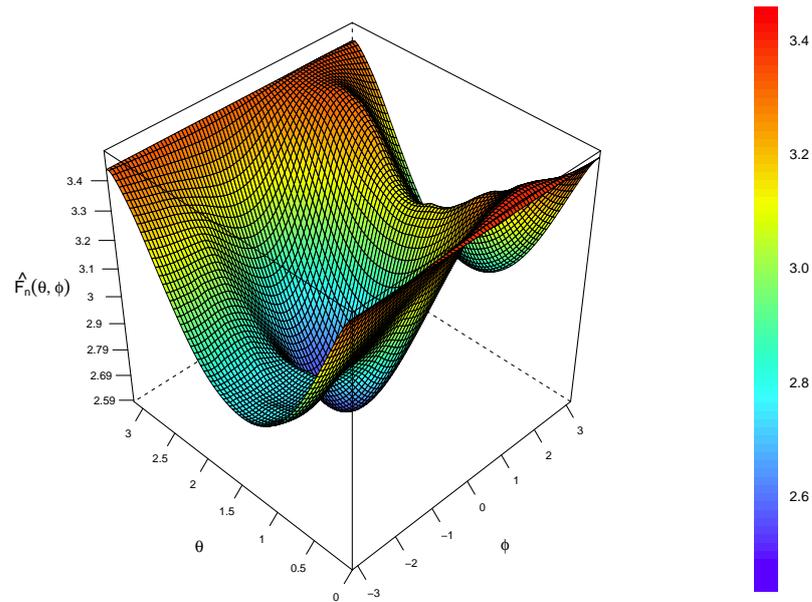
Verteilung	n	q	Laufzeit (in $s \pm$ s.d.)	Iterationen (\pm s.d.)	$\nu(A)$ (\pm s.d.)
uniform	10	1	$3,0 \pm 1,6$	468 ± 145	$1,3\% \pm 0,1\%$
Halbkugel	100	1	$13,8 \pm 2,2$	539 ± 44	$1,3\% \pm 0,1\%$
uniform	10	1	$23,1 \pm 22,5$	1.356 ± 696	$1,9\% \pm 0,5\%$
Kugel	100	1	$309,2 \pm 239,9$	5.142 ± 2.381	$4,7\% \pm 1,7\%$
Tetraeder	4	4	$1.202,0 \pm 96,2$	11.791 ± 106	$11,6\% \pm 0,1\%$
diametral	2	∞	$2.438,6 \pm 243,0$	13.927 ± 646	$19,1\% \pm 0,3\%$

Tabelle 5.2: Performance des Branch-and-Bound-Algorithmus auf der Kugel zur Ermittlung einer (ε, δ) -Überdeckung A der Menge der Fréchet-Mittelwerte, $\varepsilon = \delta = 10^{-1}$

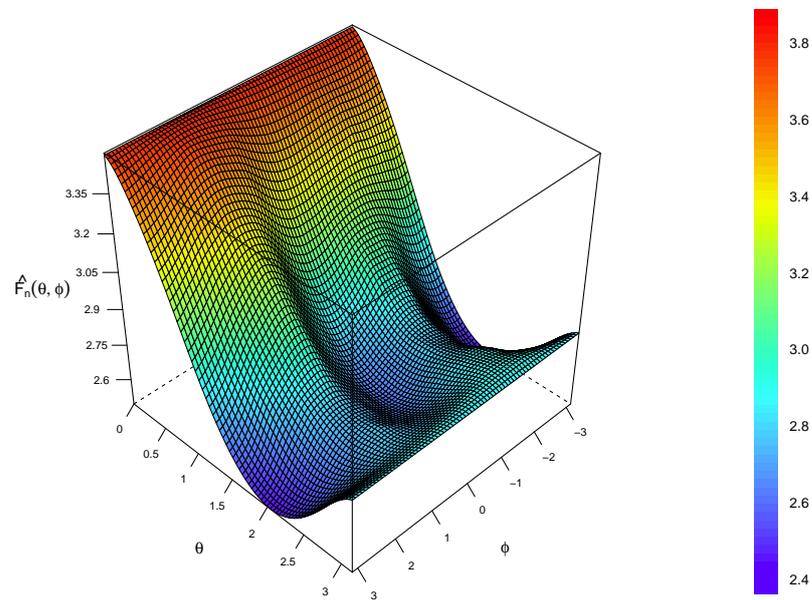
Es ist leicht zu erkennen, dass die Bestimmung der Fréchet-Mittelwerte auf der Kugeloberfläche, trotz geringerer Genauigkeit, einen erheblich höheren Rechenaufwand im Vergleich zum Einheitskreis erfordert. Dies liegt vor allem darin begründet, dass die untere Schranke wesentlich aufwendiger in der Berechnung ist, als im Falle der Kreislinie. Zudem ist die Unterteilung des zugrunde liegenden Raumes weitaus rechenintensiver. Um die Größe eines Teilbereiches (hier: den Durchmesser eines Dreiecks) zu halbieren, sind nach der von uns vorgeschlagenen Regel bis zu drei Schritte notwendig (vgl. Lemma 4.4). Für die Kreislinie reduziert sich die Größe eines Kreisbogens hingegen nach jeder Unterteilung um den Faktor $\frac{1}{2}$. Der Zeitaufwand, um die Approximation mit vorgegebener Genauigkeit δ zu berechnen, ist aus diesem Grund deutlich höher.

Überdies zeichnet sich ein ähnliches Bild, wie bei den Beispielen des Einheitskreises ab. Während das Verfahren bei uniform auf einer Halbsphäre verteilten Daten bereits nach wenigen Sekunden Ergebnisse liefert, ist die Laufzeit für uniform auf der ganzen Kugel verteilte Daten um ein Vielfaches höher. Dies ist erneut auf viele lokale Minimalstellen der Fréchet-Funktion zurückzuführen, welche erst sehr spät durch das Verfahren aus der Liste \mathcal{L} zu untersuchender Elemente eliminiert werden.

Man beachte, dass die Ergebnisse für uniform auf der Kugel verteilte Daten hohen Schwankungen unterliegen. Dies begründet sich damit, dass sich die Fréchet-Funktionen zu zwei verschiedenen Stichproben derselben Mächtigkeit aus derselben Verteilung enorm unterscheiden können. Während die Funktionswerte lokaler Minimierer von \hat{F}_n in einer Stichprobe sehr stark vom globalen Minimalwert abweichen können, kann bei einer anderen der Fall auftreten, dass es lokale Minimierer gibt, deren Funktionswert sich nur geringfügig vom globalen Minimalwert unterscheidet (vgl. Abbildung 5.2). Ist letzteres der Fall, können Gebiete um solche lokalen Minimalstellen erst sehr spät vom Algorithmus aus der Liste \mathcal{L} zu bearbeitenden Elemente eliminiert werden, was in einer beträchtlich höheren Laufzeit resultiert.



- (a) Funktionswerte lokaler Minima unterscheiden sich stark vom globalen Minimalwert, Laufzeit etwa 300s



- (b) Funktionswerte lokaler Minima unterscheiden sich nur geringfügig vom globalen Minimalwert, Laufzeit etwa 800s

Abbildung 5.2: Graphen von Fréchet-Funktionen \hat{F}_n zu $n = 100$ gegebenen, uniform auf der Sphäre \mathbb{S}^2 verteilten Punkten, $p = 2$

Für nicht-eindeutige Fréchet-Mittelwerte benötigt der Algorithmus eine noch weitaus höhere Anzahl an Iterationen zur Ermittlung der Approximation derer. Dies trifft insbesondere für den Fall der diametral gegenüberliegenden Punkte, in welchem ein ganzer Großkreis approximiert werden muss zu und spiegelt den erhöhten Aufwand wider, den das Verfahren zur Berechnung der (ε, δ) -Überdeckung einer Vielzahl von Minimierern, statt eines einzigen Punktes benötigt.

Abgesehen von den Daten, die einer uniformen Verteilung auf der Sphäre \mathbb{S}^2 entstammen, besitzen die Ergebnisse unserer Testbeispiele nur eine geringe Standardabweichung. Diese Durchschnittswerte können daher als repräsentativ für die Performance des Algorithmus bei Anwendung auf Daten aus der entsprechenden Verteilung angesehen werden.

Bemerkung 5.5 Die hier verwendete Genauigkeit $\varepsilon = 10^{-1}$ dient nur zu Demonstrationszwecken und ist für praktische Anwendungen kaum relevant. Dort wird meist mit einer höheren Genauigkeit gerechnet, um aussagekräftige Ergebnisse erzielen zu können. In diesem Fall wird man mit erheblich längeren Laufzeiten rechnen müssen.

5.5 Anwendungsbeispiel – Magnetische Remanenz

Abschließend wenden wir uns in diesem Kapitel zwei Anwendungsbeispielen zu. Das erste Beispiel, welches wir in diesem Abschnitt betrachten, behandelt einen Datensatz zum Thema „Magnetische Remanenz“ und ist in der Geologie von besonderer Bedeutung. Wir wollen zunächst den Hintergrund der Daten etwas näher erläutern.

Die Erde ist von einem Magnetfeld umgeben, welches langsamen zeitlichen Veränderungen unterliegt. Ein Bestandteil des Erdmagnetfelds, das Feld der *remanenten Magnetisierung*, ist lokal sehr unterschiedlich; zeitliche Veränderungen dieses Feldes finden jedoch nur in geologischen Skalen statt. Es ist besonders in den oberen Teilen der Erdkruste zu finden. Unter *magnetischer Remanenz* (auch: Restmagnetisierung) versteht man dabei die Magnetisierung, die zurückbleibt, wenn ein Material (bspw. Gestein) zeitweise einem Magnetfeld ausgesetzt war und magnetisiert wurde. Dieser Effekt ist speziell in erzhaltigen Gesteinsablagerungen oder Sedimenten zu finden.

In Rahmen dieser Arbeit handelt es sich bei dem betrachteten Material um Sedimentgesteine. Diese „können Träger eines „eingefrorenen“ Magnetismus sein, indem sich schon magnetisierte Mineralbestandteile [...] mit ihrer magnetischen Achse (wie kleine Kompassnadeln) unter Anpassung an das während der Sedimentation herrschende Magnetfeld ablagern.“ [Ric92, S. 256] Ist das Material erst einmal magnetisiert, so verbleibt die Magnetisierung bis zu einer Umpolung im Gestein erhalten. „Ein später entstehendes, abweichendes Magnetfeld

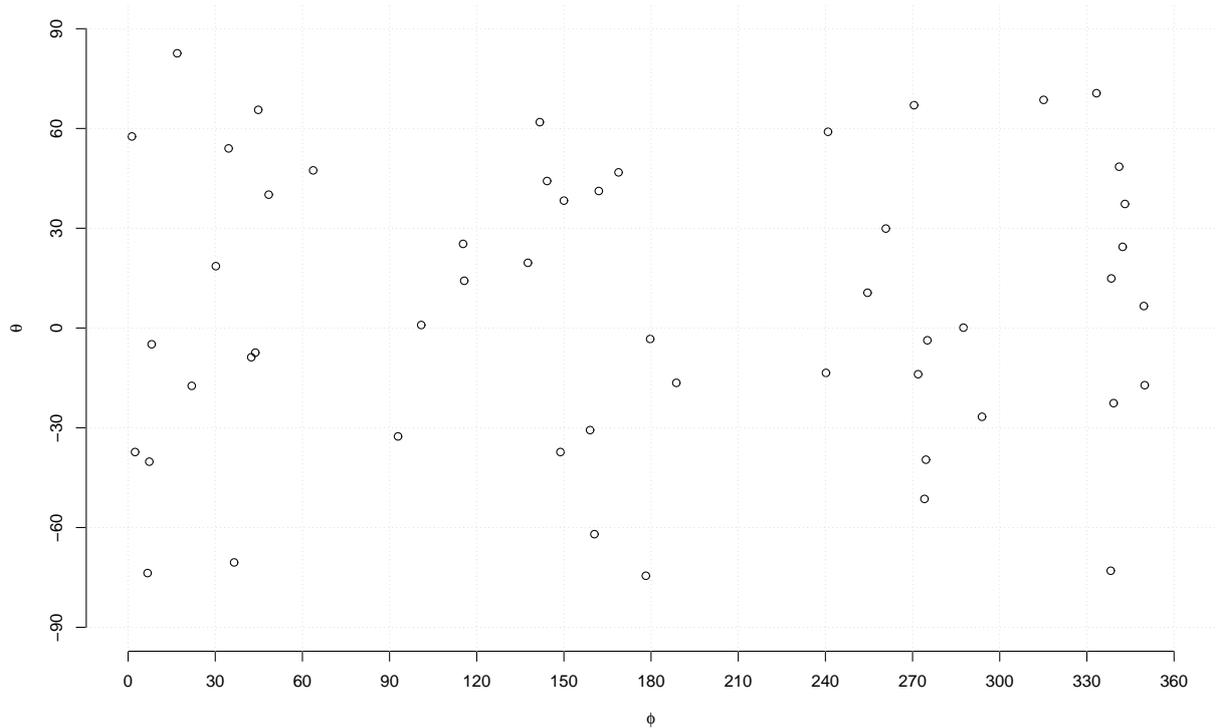
vermag dagegen [...] keine nennenswerte Veränderung [des bestehenden Magnetfeldes] hervorzurufen.“ [Ric92, S. 256] Man spricht in diesem Zusammenhang auch von *Paläomagnetismus* bzw. fossilem Magnetismus.

Da sich die Magnetisierung von Sedimentgesteinen über einen sehr langen Zeitraum hinweg erstreckt, enthält es Informationen über den ehemaligen Verlauf des Erdmagnetfeldes in der geologischen Vergangenheit. Folglich können wir Messungen magnetischer Remanenz als zirkuläre Daten mit Informationen über die Richtung des Erdmagnetfeldes zum Zeitpunkt der Gesteinsablagerung in früheren Erdperioden auffassen, vgl. [Ric92, Kapitel IV. 3].

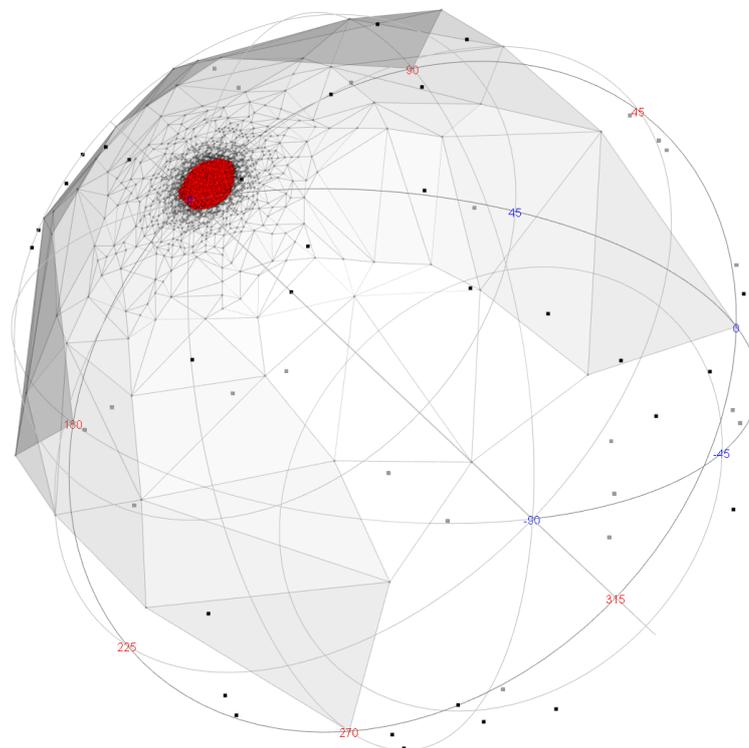
Wir betrachten einen Datensatz mit Messungen der magnetischen Remanenz aus $n = 52$ Proben aus Rotsedimentgesteinen aus dem Bowenbecken, Queensland (Australien). Die Daten sind in [FLE87, S. 284, Beispiel B5] zu finden und unter `DataB5FisherSpherical` im Paket `CircNNTSR` in R verfügbar. Zur Illustration sind die Winkelkoordinaten der Daten, sowie eine Darstellung als Punkte auf der Einheitskugel in Abbildung 5.3a bzw. 5.3b zu sehen. Die abgebildeten Punkte sind als Richtungen des Magnetfeldes (genauer: als die magnetischen Nordpole) der genommenen Proben zu verstehen; ausgegraute Punkte liegen auf der gegenüberliegenden Seite der Kugeloberfläche.

Wir möchten anhand dieser Daten die Richtung des Magnetfeldes zum Zeitpunkt des geologischen Alters des Gesteins ermitteln. Da die Proben alle derselben Region entstammen, wird die mittlere Richtung des Magnetfeldes der ermittelten Proben eine Näherung dafür ergeben. Wir bestimmen deshalb eine Approximation des Fréchet-1-Mittelwertes der gegebenen Messungen. Als Genauigkeiten sollen uns die Werte $(\varepsilon, \delta) = (10^{-2}, 10^{-1})$ genügen. Das Ergebnis, das wir mit dem in Abschnitt 4.3.2 vorgestellten Algorithmus erhalten, visualisieren wir in Abbildung 5.3b.

Die (ε, δ) -Approximation der Menge der Fréchet-1-Mittelwerte, in Abbildung 5.3b rot zu sehen, überdeckt einen Bereich rund um den geografischen Nordpol. Aufgrund der geringen Größe des Gebiets und der Tatsache, dass dieses zusammenhängend ist lässt sich darauf schließen, dass es für die gegebenen Daten wahrscheinlich einen eindeutigen Minimierer der Fréchet-Funktion in dieser Region gibt. Dieses Ergebnis legt nun nahe, dass sich der magnetische Nordpol zum Zeitpunkt der Polung der Proben, in jenem Bereich befand.



(a) Winkel des Datensatzes, gegeben im Gradmaß mit $(\theta, \varphi) \in [-90^\circ, 90^\circ] \times [0^\circ, 360^\circ)$, Längen- und Breitenkreise gepunktet angedeutet



(b) (ε, δ) -Approximation (rot) des Branch-and-Bound-Verfahrens mit $(\varepsilon, \delta) = (10^{-2}, 10^{-1})$, angewendet auf `DataB5FisherSpherical`, durch Unterteilung entstandene Dreiecke in grau angedeutet, gegebene Datenpunkte als (■) dargestellt; Längengrade in rot, Breitengrade in blau notiert

Abbildung 5.3: Daten des Datensatzes `DataB5FisherSpherical` in verschiedenen Perspektiven und Ausgabe des Branch-and-Bound-Algorithmus

5.6 Anwendungsbeispiel – Bau eines Verteilungszentrums

Das zweite Anwendungsbeispiel befasst sich mit unserem einführenden Beispiel aus (1.1). Dazu gehen wir von folgendem Szenario aus: Der Besitzer eines Unternehmens, das seine Produkte international vertreibt, möchte ein neues globales Verteilungszentrum v errichten. Dieses soll so gebaut werden, dass die mittlere Distanz zu seinen bereits existierenden, lokalen Umschlagplätzen in den Städten x_1, x_2, \dots, x_{15} minimal wird. Die Lage der Handelsplätze ist Tabelle 5.3 zu entnehmen. Sie sei durch die angegebenen Winkelkoordinaten definiert, wobei $(\theta_i, \varphi_i) \in [-90^\circ, 90^\circ] \times [-180^\circ, 180^\circ)$, $i = 1, 2, \dots, 15$, sei und ist wie üblich in geografischer Länge (die östliche/ westliche Entfernung vom Nullmeridian) und geografischer Breite (die nördliche/ südliche Entfernung vom Äquator) zu verstehen. Alle Städte sind in Abbildung 5.4 auf einer Weltkarte skizziert.

Nr.	Standort	θ_i	φ_i	Nr.	Standort	θ_i	φ_i
1	New York City	40,72°	-74,00°	9	Johannesburg	-26,20°	28,07°
2	Mexiko-Stadt	19,25°	-99,15°	10	Mumbai	18,97°	72,83°
3	Rio de Janeiro	-22,90°	-43,20°	11	Shanghai	31,23°	121,47°
4	Buenos Aires	-35,00°	-58,00°	12	Jakarta	-6,18°	106,83°
5	Paris	48,85°	2,35°	13	Seoul	37,57°	126,98°
6	London	51,52°	0,12°	14	Tokio	35,68°	139,77°
7	Moskau	55,75°	37,62°	15	Sydney	-33,85°	151,20°
8	Kairo	30,05°	31,23°				

Tabelle 5.3: Koordinaten der Standorte der lokalen Umschlagplätze x_1, x_2, \dots, x_n , angegeben in geografischer Länge θ_i und geografischer Breite φ_i

Wir modellieren die Erdkugel als perfekte Kugel und nehmen an, dass die Standorte x_1, x_2, \dots, x_{15} auf der Kugeloberfläche \mathbb{S}^2 verteilt seien. Den Abstand zweier Punkte messen wir in Bogenlänge. Die tatsächliche Distanz auf der Erdoberfläche ergibt sich unter diesen Annahmen durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor, welcher zur Ermittlung des Minimierers von

$$\min_{v \in \mathbb{S}^2} \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} d(x_i, v), \quad (5.4)$$

jedoch unerheblich ist. Zur Lösung des o. g. Problems (5.4) bestimmen wir eine Approxi-

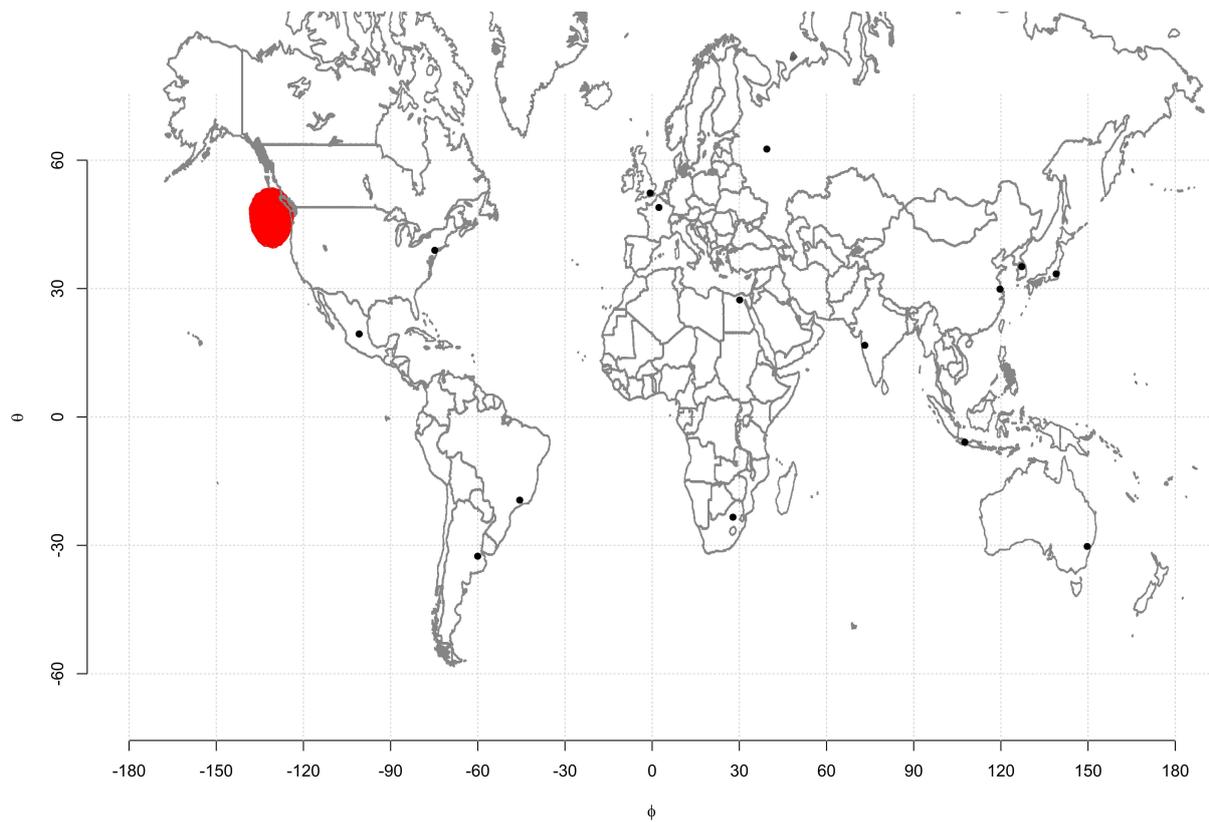


Abbildung 5.4: (ε, δ) -Approximation (rot) des Branch-and-Bound-Verfahrens für das oben dargestellte Transportproblem (5.4), $(\varepsilon, \delta) = (10^{-2}, 10^{-1})$, dargestellt auf einer Weltkarte (Mercator-Projektion), Lage der Datenpunkte durch schwarze Punkte (\bullet) skizziert

mation der Fréchet-1-Mittelwerte des zu x_1, x_2, \dots, x_{15} gehörigen Fréchet-Funktional mit dem Algorithmus aus Abschnitt 4.3.2 und den Genauigkeiten $(\varepsilon, \delta) = (10^{-2}, 10^{-1})$. Die Ausgabemenge ist in Abbildung 5.4 skizziert. Die abgebildete Weltkarte im Hintergrund dient lediglich der Illustration und besseren Orientierung. Man beachte, dass die Karte aufgrund der Erdkrümmung verzerrt ist und die Lage der Daten in der Grafik von ihrer tatsächlichen Position auf der Erde geringfügig abweichen kann.

Die Darstellung legt nahe, dass man ein Verteilungszentrum, welches den mittleren Abstand zu den gegebenen Standorten x_1, x_2, \dots, x_{15} minimiert, vor der Küste des US-Bundestaates Washington bzw. südwestlich von British Columbia errichten sollte. Da der Bau eines solchen Gebäudes auf hoher See jedoch aufgrund hoher Kosten und schlechter Anbindung an die Infrastruktur für praktische Zwecke eher ungeeignet ist, sollten bei der Modellierung des Transportproblems solche Nebenbedingungen des Optimierungsproblems gegebenenfalls mit in Betracht gezogen werden.

6 Fazit und Ausblick

Mit dem konstruierten Branch-and-Bound-Verfahren lässt sich deterministisch eine beliebig genaue Approximation aller Fréchet- p -Mittelwerte einer gegebenen Menge von Punkten auf der ein- oder zweidimensionalen Einheitssphäre bestimmen. Während eine Methode zur expliziten Berechnung der Minimierer von (2.3) auf der Kreislinie dabei bereits aus [HH15] bekannt gewesen ist, wird der vorgestellte Algorithmus für die Kugeloberfläche S^2 weitgehend neu entwickelt. Der gewählte Ansatz zur Bestimmung von Schranken beruht dabei allein auf den in Kapitel 3 dargelegten geometrischen Überlegungen. Daher müssen keine Einschränkungen über die Lage der Daten, wie etwa in [ATV13] getroffen werden und es kann auf Voraussetzungen an die Zielfunktion, wie etwa Differenzierbarkeit oder Konvexität, gänzlich verzichtet werden.

Aus den in Kapitel 5 durchgeführten numerischen Experimenten geht hervor, dass die Laufzeit des Algorithmus von der Anzahl der Datenpunkte, deren Verteilung auf der Sphäre und in erster Linie von der Anzahl der Fréchet-Mittelwerte abhängt. Während im Falle eindeutiger Minimierer das Verfahren nach relativ kurzer Zeit Ergebnisse liefert, dauert die Berechnung für nicht-eindeutige Fréchet-Mittelwerte erheblich länger.

In Kapitel 3 haben wir den Abstand eines gegebenen Punktes von einem Kreisbogen bzw. Kugeldreieck bestimmt. Damit ist es uns gelungen, eine untere Schranke des Minimalwertes der Fréchet-Funktion zu konstruieren. Diese ist für den Fall, dass nur ein Datenpunkt ($n = 1$) gegeben ist, scharf. Für $n > 1$ ist dies hingegen im Allgemeinen nicht zu erwarten. Eine bessere untere Schranke für mehr als einen gegebenen Datenpunkt kann man möglicherweise durch simultane Betrachtung mehrerer Punkte oder Einbezug von mehr Informationen, wie etwa stückweise Differenzierbarkeit der Zielfunktion erhalten. Eine Veränderung der Art und Weise der Unterteilung des Raumes oder der Auswahl des für einen Bereich repräsentativen Punktes, könnten sich zudem positiv auf die Laufzeit des Algorithmus auswirken. All diese Ideen gehen allerdings über den Rahmen dieser Arbeit hinaus.

Das in Abschnitt 4.1 vorgestellte Branch-and-Bound-Verfahren ist zur Bestimmung von Fréchet- p -Mittelwerten auf allgemeinen metrischen Räumen formuliert. Sofern geeignete Unterteilungsvorschriften und untere Schranken für die Fréchet-Funktion auf einem solchen Raum existieren, lässt sich der angegebene Algorithmus folglich leicht verallgemeinern.

Naheliegend für weitere Betrachtungen wären die nachstehenden beiden Beispiele.

- (1) Durch Betrachtung einer entsprechenden Halbsphäre ließe sich das vorgestellte Verfahren auf reelle projektive Räume \mathbb{RP}^k der Dimension $k = 1, 2$ übertragen. Die konstruierten unteren Schranken und Branch-Vorschriften ergeben sich ähnlich zu den hier angegebenen.
- (2) Eine Erweiterung des Algorithmus zur Bestimmung von Fréchet-Mittelwerten auf k -Sphären der Dimension $k \geq 3$ ist ebenfalls denkbar. Hierzu müssten entsprechende Branch-Vorschriften und untere Schranken konstruiert werden. Ein (rein) geometrischer Ansatz ist hierbei vermutlich aufwendiger.

Projektive Räume und k -dimensionale Sphären mit $k \geq 3$ wurden in dieser Arbeit nicht eingehender behandelt. Die Betrachtung von globalen Optimierungsproblemen über diesen Räumen und Berechnung von Fréchet- p -Mittelwerten darauf bieten jedoch Potential für weiterführende Untersuchungen.

A Anhang

```
1 ##### Allgemeine Funktionen #####
2
3 ### Zielfunktion
4 Fnhut <- function (m , d = darc, ...){
5
6   1/length(x) * sum( sapply(x, d, y = m)^p )
7 }
8
9 ### push haengt einen Vektor x (hinten) an eine Liste an
10 push <- function (liste, x){
11
12   c( liste, list(x) )
13 }
14
15 ### delete loescht das Element x aus einer Liste
16 delete <- function(liste, x){
17
18   liste[[ Position( function(y) identical(y, x), liste) ]] <- NULL
19   liste
20 }
21
22 ### get.index zur Bestimmung des Index des ersten Elements der liste mit
23   kleinstem/ groesstem Element des Eintrags entry
24 get.min.index <- function(liste, entry){
25
26   which.min( sapply(liste, function(x) x[[entry]]) ) [1]
27 }
28
29 get.max.index <- function(liste, entry){
30
31   which.max( sapply(liste, function(x) x[[entry]]) ) [1]
32 }
33 ##### Funktionen fuer die Berechnung von IM bei S^1 #####
34
35 ### set enthaelt eine Liste von Punkten, die eine Starttriangulation der
36   Manningfaltigkeit beschreibt
37 set <- list ( list(left = -pi, right = pi) )
```

```

37
38 ### branch berechnet bei Eingabe eines Intervalls eine Unterteilung dieses
39 branch <- function (intervall, init = INIT, mid = MID){
40
41   c( init( list( list( left = intervall$left, right = mid(intervall) ) ,
42             list( left = mid(intervall), right = intervall$right) )
43     )
44 }
45
46 ### mid berechnet den Mittelpunkt eines Intervalls
47 mid <- function( intervall ){
48
49   (intervall$left + intervall$right) / 2
50 }
51
52 ### darc berechnet den Abstand im Bogenmass
53 darc <- function (x, y) {
54
55   d <- abs( x - y )
56   ifelse( d <= pi, d, 2*pi - d )
57 }
58
59 ### init erzeugt bei Eingabe einer Menge (als Liste) eine Liste mit
60   Informationen, die vom Algorithmus bearbeitet werden kann, der Gestalt
61   (Punkinfos, size, ub, lb), untere Schranke mit Lipschitz
62
63 init.3ineq <- function( set, ... ) {
64
65   L <- list()
66   for( X in set ){
67     f <- Fnht( mid(X) )
68     L <- push(L, c(X, size = size(X), ub = f , lb = f - p * pi^(p-1) *
69                 size(X) ))
70   }
71   L
72 }
73
74 ### size berechnet die Groesse eines Intervalls
75 size <- function( intervall ){
76
77   intervall$right - intervall$left
78 }
79
80 ### init.acc wie init.3ineq, untere Schranke mit geom. Konstruktion
81 init.acc <- function( set, ... ) {
82
83   L <- list()

```

```

81  for( X in set ){
82    lb <- 0
83    for( i in 1:length(x)){
84
85      if( !(X$left <= x[[i]] && X$right >= x[[i]]) ){
86
87        lb <- lb + min( darc(X$left, x[[i]])^p, darc(X$right, x[[i]])^p )
88      }
89    }
90    L <- push(L, c(X, size = size(X), ub = Fnhut( mid(X) ) , lb = lb/
length(x)) )
91  }
92  L
93 }
94
95 ### Berechnung des Oberflaecheninhalts der Approximation ###
96 size_kreis <- function( A ) {
97
98   size <- 0
99   for ( X in A ){
100     size <- size + X$size
101   }
102   size
103 }
104
105 ##### Funktionen fuer die Berechnung von IM bei S^2 #####
106
107 ### set enthaelt eine Liste von Punkten, die eine Starttriangulation der
Manningfaltigkeit beschreibt, die Eckpunkte sind hierbei mit d1, d2, d3
bezeichnet.
108 set <- list ( list(d1 = c(1,0,0), d2 = c(0,1,0), d3 = c(0,0,1)),
109             list(d1 = c(0,1,0), d2 = c(-1,0,0), d3 = c(0,0,1)),
110             list(d1 = c(-1,0,0), d2 = c(0,-1,0), d3 = c(0,0,1)),
111             list(d1 = c(0,-1,0), d2 = c(1,0,0), d3 = c(0,0,1)),
112             list(d1 = c(1,0,0), d2 = c(0,1,0), d3 = c(0,0,-1)),
113             list(d1 = c(0,1,0), d2 = c(-1,0,0), d3 = c(0,0,-1)),
114             list(d1 = c(-1,0,0), d2 = c(0,-1,0), d3 = c(0,0,-1)),
115             list(d1 = c(0,-1,0), d2 = c(1,0,0), d3 = c(0,0,-1))
116 )
117
118 ### branch berechnet bei Eingabe eines Dreiecks eine Unterteilung
119
120 branch <- function (D, INIT, ...){
121
122   d12 <- darc( D$d1 , D$d2 )
123   d13 <- darc( D$d1 , D$d3 )
124   d23 <- darc( D$d2 , D$d3 )

```

```

125
126 if( d12 == max( d12, d13, d23 ) ) {
127
128   c( INIT( list( list( d1 = D$d1, d2 = norm.vec(D$d1+D$d2), d3 = D$d3 ),
129     list( d1 = norm.vec(D$d1 + D$d2), d2 = D$d2, d3 = D$d3 )))
129 )
130 } else if( d13 == max( d12, d13, d23 ) ){
131
132   c( INIT( list( list( d1 = D$d1, d2 = D$d2, d3 = norm.vec(D$d1 + D$d3)
133     ), list( d1 = norm.vec(D$d1 + D$d3), d2 = D$d2, d3 = D$d3 )))
133 )
134 } else {
135
136   c( INIT( list( list( d1 = D$d1, d2 = D$d2, d3 = norm.vec(D$d2 + D$d3)
137     ), list( d1 = D$d1, d2 = norm.vec(D$d2 + D$d3), d3 = D$d3 )))
137 )
138 }
139 }
140
141 ### mid berechnet den Mittelpunkt eines Intervalls
142 mid <- function( D ){
143
144   m <- ( D$d1 + D$d2 + D$d3 )/3
145   m <- norm.vec(m)
146 }
147
148
149 ### darc berechnet den Abstand im Bogenmass
150 darc <- function (x, y) {
151
152   dotprod <- x % * % y
153   if( abs( dotprod ) >= 1 ){
154     if( sign( dotprod ) == 1 ) 0 else pi
155   } else acos( dotprod )
156 }
157
158 arcsin <- function (x, y) {
159
160   dotprod <- abs( x % * % y )
161   if( dotprod >= 1 ) pi/2 else asin( dotprod )
162 }
163
164 ### size berechnet den Umkreisradius eines Dreiecks
165 size <- function (D) {
166
167   max( darc( D$d1, D$d2 ), darc( D$d1, D$d3 ), darc( D$d2, D$d3 ))
168 }

```

```

169
170 ### norm.vec normiert einen Vektor
171 norm.vec <- function( vector ){
172
173     1/sqrt( sum( vector^2) ) * vector
174 }
175
176 ### init erzeugt die Liste mit Informationen im Laufe des Algorithmus,
177     untere Schranke mit Dreiecksungleichung
178
179 init.3ineq <- function( set, ... ) {
180
181     L <- list()
182     for( X in set ){
183         f <- Fnhut( mid(X) )
184         L <- push(L, c(X, size = size(X), ub = f , lb = f - p * pi^(p-1) *
185             size(X) ))
186     }
187     L
188 }
189
190 ### init erzeugt die Liste mit Informationen im Laufe des Algorithmus
191     untere Schranke mit geometrischer Konstruktion
192
193 init.acc <- function( set, ... ) {
194
195     L <- list()
196     for( X in set ){
197         f <- 0
198         n12 <- norm.vec(X$d1 %x% X$d2)
199         if( n12 % * % X$d3 < 0) n12 <- -n12
200         n23 <- norm.vec(X$d2 %x% X$d3)
201         if( n23 % * % X$d1 < 0) n23 <- -n23
202         n31 <- norm.vec(X$d3 %x% X$d1)
203         if( n31 % * % X$d2 < 0) n31 <- -n31
204
205         QR12 <- qr(matrix( c( X$d1 , X$d2 , -n12 ), nrow = 3 ))
206         Q12 <- qr.Q(QR12)
207         R12 <- qr.R(QR12)
208         QR23 <- qr(matrix( c( X$d2 , X$d3 , -n23 ), nrow = 3 ))
209         Q23 <- qr.Q(QR23)
210         R23 <- qr.R(QR23)
211         QR31 <- qr(matrix( c( X$d3 , X$d1 , -n31 ), nrow = 3 ))
212         Q31 <- qr.Q(QR31)
213         R31 <- qr.R(QR31)
214
215         for( xi in x ){

```

```

213     g <- 0
214     if( !is.in.Delta.scalprods(n12, n23, n31, xi) ){
215
216         if( is.in.Lambda.qr(Q12, R12, xi) )
217             g12 <- arcsin( xi, -n12 )
218         else g12 <- min( darc(xi, X$d1), darc(xi, X$d2) )
219
220         if( is.in.Lambda.qr(Q23, R23, xi))
221             g23 <- arcsin( xi, -n23 )
222         else g23 <- min( darc(xi, X$d2), darc(xi, X$d3) )
223
224         if( is.in.Lambda.qr(Q31, R31, xi) )
225             g31 <- arcsin( xi, -n31 )
226         else g31 <- min( darc(xi, X$d3), darc(xi, X$d1) )
227
228         g <- min( g12, g23, g31 )
229     }
230     f <- f + g^p
231 }
232 f <- 1/length(x) * f
233 L <- push( L, c(X, size = size(X), ub = Fnhut(mid(X)), lb = f ) )
234 }
235 L
236 }
237
238 ### Kreuzprodukt zweier Vektoren a, b
239 '%x%' <- function ( a, b ){
240
241 c( a[[2]]*b[[3]] - a[[3]]*b[[2]], a[[3]]*b[[1]] - a[[1]]*b[[3]], a[[1]]*b
    [[2]] - a[[2]]*b[[1]])
242 }
243
244 ### Test, ob Punkt x im Dreieck D = D(d1, d2, d3) enthalten ist
245 # durch Loesen eines linearen Gleichungssystem
246 is.in.Delta.qr <- function( Q, R, y ){
247
248     X <- backsolve( R, t(Q) % * % y )
249     if( X[[1]] >= 0 && X[[2]] >= 0 && X[[3]] >= 0) TRUE else FALSE
250 }
251
252 # durch Berechnung von Skalarprodukten
253 is.in.Delta.scalprods <- function( n12, n23, n31, y ){
254
255     if( (y % * % n12) >= 0 && (y % * % n23) >= 0 && (y % * % n31) >= 0) TRUE
        else FALSE
256 }
257

```

```

258 ### Test, ob Punkt x im Zweieck Lambda = Lambda(d1, d2) enthalten ist
259 is.in.Lambda.qr <- function( Q, R, y ){
260
261   X <- backsolve( R, t(Q) % * % y )
262   if( X[[1]] >= 0 && X[[2]] >= 0 ) TRUE else FALSE
263 }
264 ### get.angles bestimmt die Winkel der Kugelkoordinaten
265 get.angles <- function(y){
266
267   list(phi = atan2(y[[2]], y[[1]]), theta = acos(y[[3]]) )
268 }
269
270 ### get.angles bestimmt die Winkel der Kugelkoordinaten, geografische
271   Laengen
272 get.angles.geo <- function( y ){
273
274   list(theta = pi / 2 - acos(y[[3]]), phi = atan2(y[[2]], y[[1]]))
275 }
276
277 ### get.vector bestimmt die kartesische Koordinaten aus Winkelkoordinaten
278 get.vector <- function( theta = 0, phi = 0 ){
279
280   c( sin(theta)*sin(phi), sin(theta)*cos(phi), cos(theta) )
281 }
282
283 ### size_kugel bestimmt das Oberflaechenmass einer gegebenen Liste von
284   Dreiecken
285 size_kugel <- function( A ){
286
287   size <- 0
288   for( X in A ){
289
290     size <- size + darc( norm.vec(X$d1 %x% X$d2), norm.vec(X$d1 %x% X$d3)
291       ) + darc( norm.vec(X$d2 %x% X$d3), norm.vec(X$d2 %x% X$d1) ) + darc(
292       norm.vec(X$d3 %x% X$d1), norm.vec(X$d3 %x% X$d2) ) - pi
293   }
294   size / ( 4 * pi ) * 100
295 }
296
297 ##### Wrapper fuer BB-Algorithmen zum Finden (eps,delta)-minimaler Punkte
298 #####
299
300 ## SET enthaelt eine Liste von Punkten, die eine Starttriangulation der
301   Manningfaltigkeit beschreibt
302 ## INIT erzeugt aus SET eine Liste mit den Attributen - Beschreibung des
303   Dreiecks,

```

```
298 ## Groesse (size), obere Schranke (ub) und untere Schranke (lb)
299 ## BRANCH enthaelt eine Funktion, die bei Eingabe eines Dreiecks, eine
    Unterteilung dieses ausgibt
300 ## MID bestimmt bei Eingabe eines Dreiecks dessen <Mittelpunkt> auf der
    Mannigfaltigkeit
301 ## SIZE bestimmt den <Umkreisradius> des Dreiecks
302 ## untere Schranken werden mit u bezeichne, Funktionswerte mit v
303
304 ##### Einbinden des Quellcodes der Funktionen fuer den betrachteten
    metrischen Raum #####
305
306 source("general_functions.R")
307 # source("functions_S1.R")
308 source("functions_S2.R")
309
310 ##### Formulierung des Branch-and-Bound-Verfahrens #####
311
312 BandB <- function ( SET, INIT, BRANCH, MID, p = 2, eps = 1e-3, delta = 1e
    -1, env = parent.frame(), eta = 1e-8, ... ){
313
314
315   function(data, ...){
316
317     ## Initialisierung ##
318     x     <- assign("x", data, pos = 1, envir = baseenv()) ## Definiere
    Input x als globale Variable
319     p     <- assign("p", p, pos = 1, envir = baseenv())   ## Definiere
    Input p als globale Variable
320     L     <- INIT( SET, x, ... )
321     A     <- list()           ## Liste der eps-optimalen Minima
322     ustar <- -Inf            ## aktuelle untere Schranke
323     vact  <- Inf             ## aktueller Funktionswert
324     vglob <- vact           ## aktuell bester Funktionswert
325     xstar <- L[[ get.min.index(L, "lb") ]] ## Startbox und aktuell
    betrachtete Box
326     xact  <- xstar           ## Box mit aktuell bestem Funktionswert
327     iter  <- 0               ## Anzahl durchgefuehrter Iterationen
328     time  <- Sys.time()     ## Stoppuhr
329     toplot<- list()         ## Liste der zu plottenden Punkte
330
331     ## Branch-and-Bound-Schleife ##
332
333     while ( length(L) > 0 ){
334
335       iter <- iter + 1
336       L    <- delete(L, xstar)
337
```

```
338     ## Branching-Schritt in Subboxen sB/ Teildreiecke ##
339     sB       <- BRANCH(xstar, INIT, MID)
340     toplot  <- c( toplot, list( MID(xstar)) ) ## Abspeichern der Punkte,
an denen unterteilt wird
341
342     for ( X in sB ){
343
344         ## Test ob neu erzeugte Boxen Minima enthalten koennen, ggf.
Aufnahme
345         if( X$lb <= vglob + eta ){
346
347             L <- push(L, X)
348
349             ## Aktualisieren der oberen Schranke
350             if( X$sub <= vact ){
351                 xact <- X
352                 vact <- X$sub
353                 vglob <- min( vact, vglob )
354
355                 ## Streichen von Boxen/ Dreiecken, die kein Minimum mehr
enthalten koennen
356                 for ( i in length(L):1 ) {
357
358                     if( L[[i]]$lb >= vglob + eta ){ L[[i]] <- NULL }
359
360                 }
361             }
362         }
363     }
364
365     if( length(L) > 0 ){
366
367
368         ## Waehle erstes Listenelement mit kleinster unteren Schranke
369         xstar <- L[[ get.min.index(L, "lb") ]]
370
371         ## Waehle kleinste, bisher gefundene untere Schranke
372         ustar <- xstar$lb
373
374
375         ## Bounding-Schritt - Untersuchung auf eps-Optimalitaet
376         while ( length(L) > 0 && (vact - ustar <= eps/2) ){
377
378             ## Aufnahme von xact in Liste A falls noch in L enthalten
379             if( list(xact) %in% L ){
380                 if( xact$size <= delta ){
381                     A <- push(A, xact)
```

```

382     L <- delete(L, xact)
383   }
384   else {
385     xstar <- xact
386     break
387   }
388 }
389
390 ## Wahl einer neuen Box/ Dreieck und neues xact
391 if ( length(L) > 0 ){
392
393     ### Definiere xstar als erstes Element von L mit ustar = min
394     aller unteren Schranken lb aus L
395     xstar <- L[[ get.min.index(L, "lb") ]]
396
397     ### Berechne xact mit kleinstem Funktionswert/ oberen Schranke
398     ub in L und aktualisiere obere Schranke
399     xact <- L[[ get.min.index(L, "ub") ]]
400     vact <- Fnhut(MID(xact))
401   }
402 }
403
404 # size <- size_kreis(A)
405 size <- size_kugel(A)
406
407 ##### Ausgabe aller eps-optimalen Dreiecke/ Boxen in Dataframe geordnet
408 nach erster Spalte
409 list( output = A, time = difftime(Sys.time(), time, units = "secs"),
410       iter = iter, length = length(A), size = size, toplot = toplot )
411 }
412
413 ##### Branch & Bound Algorithmus #####
414
415 bbalgo <- function(x, ...) BandB( SET = set, INIT = init.acc, BRANCH =
416   branch, MID = mid, p = 2, eps = 1e-3, eta = 1e-8 )(data = x)
417 #bbalgo <- function(x, ...) BandB( SET = set, INIT = init.3ineq, BRANCH =
418   branch, MID = mid, p = 2, eps = 1e-1, eta = 1e-8 )(data = x)

```

Literaturverzeichnis

- [AE01] AMANN, Herbert ; ESCHER, Joachim: *Analysis ; 3.* Bd. 3: *Analysis*. Basel [u.a.] : Birkhäuser, 2001.
- [AE10] AMANN, Herbert ; ESCHER, Joachim: *Analysis ; 1.* Bd. 1: *Analysis*. 3. Aufl., 2. Nachdr. Basel [u.a.] : Birkhäuser, 2010.
- [Afs11] AFSARI, Bijan: Riemannian L^p center of mass: Existence, uniqueness, and convexity. In: *Proceedings of the American Mathematical Society* 139 (2011), Nr. 2, S. 655–673.
- [AM14] ARNAUDON, Marc ; MICLO, Laurent: Means in complete manifolds: uniqueness and approximation. In: *ESAIM: Probability and Statistics* 18 (2014), S. 185–206.
- [ATV13] AFSARI, Bijan ; TRON, Roberto ; VIDAL, René: On the convergence of gradient descent for finding the Riemannian center of mass. In: *SIAM Journal on Control and Optimization* 51 (2013), Nr. 3, S. 2230–2260.
- [Bal15] BALLMANN, Werner: *Einführung in die Geometrie und Topologie*. Basel : Birkhäuser, 2015.
- [Ber96] BERGER, Marcel: *Geometry ; 2.* Bd. 2: *Geometry*. Corr. 2. printing. Berlin [u.a.] : Springer, 1996.
- [BP03] BHATTACHARYA, Rabi ; PATRANGENARU, Vic: Large Sample Theory of Intrinsic and Extrinsic Sample Means on Manifolds – I. In: *The Annals of Statistics* 31 (2003), Nr. 1, S. 1–29.
- [BSMM08] BRONSTEIN, Ilja N. ; SEMENDJAJEW, Konstantin A. ; MUSIOL, Gerhard ; MÜHLIG, Heiner: *Taschenbuch der Mathematik*. 7., korrigierte Auflage. Frankfurt am Main : Harri Deutsch, 2008.
- [EGS16] EICHFELDER, Gabriele ; GERLACH, Tobias ; SUMI, Susanne: A modification of the α BB method for box-constrained optimization and an application to inverse kinematics. In: *EURO Journal on Computational Optimization* 4 (2016), Nr. 1, S. 93–121.
-

-
- [FLE87] FISHER, Nicolas I. ; LEWIS, Toby ; EMBLETON, Brian J. J.: *Statistical Analysis of Spherical Data*. Cambridge [u.a.] : Cambridge University Press, 1987.
- [HH15] HOTZ, Thomas ; HUCKEMANN, Stephan: Intrinsic means on the circle: uniqueness, locus and asymptotics. In: *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* 67 (2015), Nr. 1, S. 177–193.
- [Hot13] HOTZ, Thomas: Extrinsic vs intrinsic means on the circle. In: *Geometric science of information. First international conference, GSI 2013, Paris, France, August 28–30, 2013. Proceedings*. Berlin : Springer, 2013, S. 433–440.
- [HP95] HORST, Reiner (Hrsg.) ; PARDALOS, Panos M. (Hrsg.): *Handbook of global optimization ; Vol. 1*. Bd. Vol. 1: *Handbook of global optimization*. Dordrecht [u.a.] : Kluwer, 1995.
- [HT90] HORST, Reiner ; TUY, Hoang: *Global optimization : deterministic approaches*. Berlin [u.a.] : Springer, 1990.
- [Hüb09] HÜBNER, Gerhard: *Stochastik: eine anwendungsorientierte Einführung für Informatiker, Ingenieure und Mathematiker*. 5., verb. Aufl. Wiesbaden : Vieweg + Teubner, 2009.
- [HW03] HANSEN, Eldon ; WALSTER, G. W.: *Global optimization using interval analysis: revised and expanded*. Bd. 264. CRC Press, 2003.
- [Jos13] JOST, Jürgen: *Compact Riemann surfaces: an introduction to contemporary mathematics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [Koe97] KOECHER, Max: *Lineare Algebra und analytische Geometrie*. 4., erg. und aktualisierte Aufl. Berlin [u.a.] : Springer, 1997.
- [LS13] LOCATELLI, Marco ; SCHOEN, Fabio: *Global optimization : theory, algorithms, and applications*. Philadelphia, Pa. : SIAM, 2013 (MOS-SIAM series on optimization ; 15).
- [Mei15] MEISTER, Andreas ; VÖMEL, C. (Hrsg.): *Numerik linearer Gleichungssysteme : eine Einführung in moderne Verfahren ; mit MATLAB-Implementierungen von C. Vömel*. 5., überarb. Aufl. Wiesbaden : Springer Spektrum, 2015.
- [MJ09] MARDIA, Kanti V. ; JUPP, Peter E.: *Directional statistics*. Bd. 494. John Wiley & Sons, 2009.
- [Pin96] PINTÉR, János D.: *Global optimization in action : continuous and Lipschitz optimization ; algorithms, implementations and applications*. Dordrecht [u.a.] : Kluwer, 1996 (Nonconvex optimization and its applications ; 6).
-

-
- [R C16] R CORE TEAM ; R FOUNDATION FOR STATISTICAL COMPUTING (Hrsg.): *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing, 2016.
- [Ric92] RICHTER, Dieter: *Allgemeine Geologie*. Walter de Gruyter, 1992.
- [Wer11] WERNER, Dirk: *Funktionalanalysis*. 7., korrigierte und erw. Aufl. Berlin [u.a.] : Springer, 2011.
- [Whi12] WHITNEY, Hassler: *Geometric integration theory*. Courier Corporation, 2012.
-

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe und, dass ich alle Stellen, die ich wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen entnommen habe, als solche kenntlich gemacht habe. Die Arbeit hat bisher in gleicher oder ähnlicher Form oder auszugsweise noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ilmenau, den 05. Januar 2017

Johannes Wieditz