

# Rigorese Fehlerschranken für das Elektronenstrukturproblem

Vom Promotionsausschuss der  
Technischen Universität Hamburg  
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

von  
Kai Torben Ohlhus

aus  
Elmshorn

2019

1. Gutachter: **Prof. Dr. Siegfried M. Rump**
  2. Gutachter: **Prof. Dr. Dr.h.c. Frerich Keil**
- Tag der mündlichen Prüfung: **23. April 2019**

## Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt rigorose Fehlerschranken für den Zielfunktionswert und rigorose Zertifikate der Unzulässigkeit für konische Optimierungsprobleme, insbesondere für das Elektronenstrukturproblem. Die konische Optimierung ist eine Spezialform der konvexen Optimierung, welche in einer Vielzahl von praktischen Anwendungen, z.B. in der Strukturoptimierung, Systemtheorie, Quantenchemie, Kombinatorik und für quadratische Zuordnungsprobleme, genutzt wird.

Das Elektronenstrukturproblem ist eine bis heute schwierig lösbare Problemstellung der Quantenchemie. Ausgehend von der bekannten zeitunabhängigen Schrödingergleichung kann es über physikalische und numerische Approximationen als relaxiertes konisches Optimierungsproblem formuliert werden. Die dabei entstehenden Optimierungsprobleme berechnen eine untere Schranke für die ursprüngliche Problemstellung. Der Aufwand wächst exponentiell mit der Anzahl der Elektronen und insbesondere mit der Anzahl der modellierten Elektronen-Orbitale. So hat ein Molekül mit 28 Elektronen-Orbitalen, als konisches Optimierungsproblem formuliert, bereits 19 Millionen Variable und 27 Tausend Nebenbedingungen. In einer Veröffentlichung von 2001 berichteten Nakata, Nakatsuji, Ehara, Fukuda, Nakata und Fujisawa von Überschätzungen in numerischen Berechnungen bei sieben Molekülen in der Größenordnung von einem Milli-Hartree.

Zur Behandlung von solchen numerischen Problemen wurde unter der Verwendung der Intervallarithmetik im Rahmen dieser Arbeit die GNU Octave/MATLAB<sup>®</sup> Software VSDP weiterentwickelt, welche die theoretischen Grundlagen für praktische Beispiele anwendbar macht. Neben einer kurzen Einführung in die Benutzung der Software werden in dieser Arbeit ausführliche Tests beschrieben. Auf vorherigen Arbeiten aufbauende verbesserte rigorosen Fehlerschranken berücksichtigen alle Rundungsfehler der Gleitkommaarithmetik und lassen sich unter dem a priori Wissen der Existenz einer Lösung auch auf schlecht gestellte Probleme und das Elektronenstrukturproblem anwenden.

Durch die numerischen Berechnungen dieser Arbeit wird Folgendes festgestellt: Erstens ist mit VSDP eine Verifikation des Elektronenstrukturproblems durch rigorose Fehlerschranken mit einer Genauigkeit von sieben bis neun dezimalen Nachkommastellen möglich. Zweitens erzeugte die Nutzung der hergeleiteten a priori Schranken bei der Berechnung von rigorosen Fehlerschranken keinen nennenswerten zeitlichen Mehraufwand und stellt somit ein nützliches Werkzeug für weitere Elektronenstrukturberechnungen dar.



## Danksagung

Zunächst möchte ich einigen Menschen danken, die diese Arbeit möglich gemacht haben.

An erster Stelle sind dies Prof. Dr. Siegfried M. Rump und Priv.-Doz. Dr. Christian Jansson, die mein Interesse für verifizierte numerische Berechnungen und die konvexe Optimierung geweckt haben. In meinen fünf Jahren als Wissenschaftlicher Mitarbeiter stellten sie mir außerdem ein wunderbares Arbeitsumfeld zur Verfügung. Bei Dr. Jansson bedanke ich mich insbesondere für die vielen Diskussionen, die mir einen klaren Zugang in die Quantenmechanik eröffneten und für die nicht immer einfachen Korrekturlesungen meiner Arbeit. Ohne Ihre Unterstützung hätte diese Arbeit nicht die jetzige Form annehmen können.

Ebenso möchte ich meinen Kollegen vom Institut für Zuverlässiges Rechnen für eine sehr schöne Zeit danken. Insbesondere Dr.-Ing. Marko Lange danke ich sehr für seine vielen Anregungen diese Arbeit lesbarer und verständlicher zu schreiben. Auch für die unzähligen wissenschaftlichen Herausforderungen bin ich ihm dankbar, mit denen er mich gerne in meinem Büro besuchte, um mein Wissen in die eine oder andere Richtung zu erweitern. Horst Meyer danke ich für ein immer offenes Ohr bei technischen und organisatorischen Schwierigkeiten jeder Art. Für unsere stets laufenden Systeme möchte ich besonders Siegfried Kubon danken. Mit Dirk Baack hatte ich bei Fragen rund um die Elektrotechnik und Linux immer einen guten Ansprechpartner. Dr. Florian Bünger, Priv.-Doz. Dr. Prashant Batra und Florian Kerkhoff danke ich für viele interessante Gespräche während den notwendigen Kaffeepausen. Für stets frischen Kaffee, praktische Lösungen bei bürokratischen Aufgaben und für ein immer offenes Sekretariat möchte ich unserer wunderbaren Ulrike Schneider danken, die meine Zeit am Institut perfekt machte.

Abschließend danke ich ganz besonders meinen Eltern, meiner Familie und meiner liebsten Julia. Für Eure Liebe, Unterstützung und Geduld mit mir gibt es kein Maß und keine Worte.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Motivation	1
1.2. Gliederung	2
<b>2. Konische Optimierung und Verifikation</b>	<b>3</b>
2.1. Notation	3
2.2. Konvexe Kegel und reelle Intervalle	6
2.3. Das konische Optimierungsproblem	12
2.4. Block-strukturierte Variablen	14
2.5. Zertifikate der Unzulässigkeit	15
2.6. Rigorose Fehlerschranken für konische Optimierungsprobleme	16
2.7. Rigorose Zertifikate der Unzulässigkeit für konische Optimierungsprobleme	19
<b>3. VSDP, Implementierungen und Resultate</b>	<b>21</b>
3.1. Gleitkommaarithmetik	21
3.2. Konkrete konische Optimierungsprobleme	22
3.2.1. Lineare Programme (LP)	22
3.2.2. Semidefinite Programme (SDP)	25
3.3. Numerische Resultate	28
3.3.1. SDPLIB-Bibliothek	30
3.3.2. SPARSE-SDP-Bibliothek	32
3.3.3. DIMACS-Bibliothek	34
<b>4. Anwendungen in der Quantenchemie</b>	<b>37</b>
4.1. Berechnung der Grundzustandsenergie von Molekülen	37
4.1.1. Quantenmechanische Grundlagen	37
4.1.2. Die Bedingungen der N-Darstellbarkeit	42
4.1.3. Formulierung von SDP-Relaxationen	47
4.2. Historische Anmerkungen	48
4.3. Eigenschaften der SDP-Relaxationen	50
4.3.1. Eigenwertschranken für die SDP-Formulierung	50
4.3.2. Schranken für die DSDP-Formulierung	52
4.3.3. Kompaktifizierte Matrizen	53
4.4. Numerische Resultate	57
4.4.1. ESC-Bibliothek	57
4.4.2. RDM-Bibliothek	58

<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>62</b>
<b>A. VSDP-2018 Benutzungseinführung</b>	<b>64</b>
A.1. Installation . . . . .	64
A.2. Dateneingabe . . . . .	65
A.3. Rigorose Fehlerschranken . . . . .	68
A.4. Rigorose Zertifikate der Unzulässigkeit . . . . .	70
A.5. Die wichtigsten Funktionen . . . . .	74
<b>B. Tabellen</b>	<b>75</b>
<b>Literatur</b>	<b>99</b>
<b>Index</b>	<b>108</b>

# Symbole

$\mathcal{K}$	Konvexer Kegel.
$e_i$	$i$ -ter Einheitsvektor.
$\bullet$	Hadamard-Produkt.
$\hat{H}$	Hamiltonoperator.
$I$	Einheitsmatrix.
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta.
<b>NaN</b>	Undefiniertes Element ( <i>engl. not a number</i> ).
$\mathbb{C}$	Menge der komplexen Zahlen.
$\mathbb{F}$	Menge der binären Gleitkommazahlen.
$\mathbb{L}_+^n$	Lorentz-Kegel.
$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen $\{0, 1, 2, \dots\}$ .
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen.
$\mathbb{R}_+$	Menge der nicht-negativen reellen Zahlen.
$\mathbb{S}^n$	Menge der symmetrischen $n \times n$ Matrizen.
$\mathbb{S}_+^n$	Menge der symmetrisch positiv semidefiniten $n \times n$ Matrizen.
$\mathbb{IR}$	Intervallgröße in $\mathbb{R}$ .

# Operatoren

$\Sigma([A], [b])$	Lösungsmenge eines linearen Intervallgleichungssystems. <a href="#">10</a> , <a href="#">20</a>
Bild( $\cdot$ )	Bild einer Matrix. <a href="#">6</a> , <a href="#">55</a>
diag( $\cdot$ )	Vektor mit Hauptdiagonalen einer Matrix. <a href="#">4</a> , <a href="#">28</a> , <a href="#">52</a>
diag( $\cdot, \dots$ )	Blockdiagonalmatrix. <a href="#">4</a> , <a href="#">47</a> , <a href="#">50</a>
$fl(\cdot)$ , $fl_{\Delta}(\cdot)$ , $fl_{\nabla}(\cdot)$	Gerichtete Rundung einer Zahl zur nächstgelegenen, nächstgrößeren und nächstkleineren Gleitkommazahl. <a href="#">21</a> , <a href="#">22</a>
inf( $\cdot$ )	Infimum einer Intervallgröße. <a href="#">24</a> , <a href="#">28</a>
$\lambda(\cdot)$	Nicht aufsteigend sortierter Vektor mit den reellen Eigenwerten einer Matrix. <a href="#">x</a> , <a href="#">5</a> , <a href="#">55</a> , <a href="#">56</a>
$\lambda_i(\cdot)$	Von $\lambda(\cdot)$ der $i$ -größte Eigenwert. <a href="#">5</a> , <a href="#">26</a> , <a href="#">27</a>
$\lambda_{\min}(\cdot)$ , $\lambda_{\max}(\cdot)$	Minimaler und maximaler Eigenwert einer Matrix. <a href="#">5</a> , <a href="#">10</a> , <a href="#">26</a> , <a href="#">28</a> , <a href="#">51–53</a>
mat( $\cdot$ )	Inverse Operation zu <a href="#">vec(<math>\cdot</math>)</a> für quadratische Matrizen. <a href="#">3</a> , <a href="#">55</a>
mid( $\cdot$ )	Mittelpunkt einer Intervallgröße. <a href="#">9–11</a> , <a href="#">27</a>
rad( $\cdot$ )	Radius einer Intervallgröße. <a href="#">9–11</a>
smat( $\cdot, \alpha$ )	Inverse Operation zu <a href="#">svec(<math>\cdot, \alpha</math>)</a> . <a href="#">4</a> , <a href="#">25</a> , <a href="#">28</a>
Spur( $\cdot$ )	Summe der Diagonaleinträge einer quadratischen Matrix. <a href="#">4</a> , <a href="#">5</a> , <a href="#">10</a> , <a href="#">40</a> , <a href="#">51</a> , <a href="#">52</a>
svec( $\cdot, \alpha$ )	Skalierte spaltenweise Vektorisierung einer symmetrischen Matrix. <a href="#">x</a> , <a href="#">4</a> , <a href="#">5</a> , <a href="#">7</a> , <a href="#">25</a> , <a href="#">28</a> , <a href="#">48</a>
triu( $\cdot$ ), tril( $\cdot$ )	Obere und untere Dreiecksmatrix. <a href="#">5</a> , <a href="#">55</a>
vec( $\cdot$ )	Spaltenweise Vektorisierung einer Matrix. <a href="#">x</a> , <a href="#">3</a>

# 1. Einleitung

## 1.1. Motivation

Die Quantenchemie nutzt als Teilgebiet der theoretischen Chemie die Quantenmechanik um grundlegende Eigenschaften von Atomen und Molekülen beschrieben. Zu diesen Eigenschaften zählen z.B. die Grundzustandsenergie von Molekülen, sowie die Energie in angeregten oder Übergangszuständen, wie sie bei chemischen Reaktionen auftreten.

Das Elektronenstrukturproblem ist eine quantenchemische Problemstellung, welche mit einer der grundlegenden Gleichungen der Quantenmechanik, der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, formuliert wird. Die Lösungsvariable der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, die Wellenfunktion, stellt die Wahrscheinlichkeiten der Elektronenzustände eines Moleküls dar. Mit der Wellenfunktion, oder in einer anderen Formulierung mit der Dichtematrix, kann die Energie des Elektronengrundzustands berechnet werden. Bis heute ist das Elektronenstrukturproblem schwierig zu lösen. Die Wellenfunktionen und Dichtematrizen enthalten Informationen, die für die Berechnung der Grundzustandsenergie nicht benötigt werden. Daher sind physikalische sowie numerische Approximationen erforderlich, um mit vertretbarem Aufwand computergestützte Berechnungen durchzuführen.

Ein seit den 1950er Jahren entwickelter Ansatz nutzt sogenannte „reduzierte Dichtematrizen“ für die Lösung des Elektronenstrukturproblems. Dabei ist die Frage nach der „ $N$ -Darstellbarkeit“, die von Coleman [17] als „Coulson’s Challenge“ bezeichnet wurde, nach wie vor offen. Das bedeutet, es sind keine hinreichenden Bedingungen bekannt, die sicherstellen, dass die Ergebnisse der reduzierten Dichtematrizen äquivalent zu denen der vollen Dichtematrix sind.

Mit der wachsenden Popularität der Innere-Punkte-Methoden seit Mitte der 1980er Jahre wurden viele effiziente Verfahren entwickelt, um konische Optimierungsprobleme zu lösen. Mit den bereits bekannten und stets verbesserten Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit wurde seit den 2000er Jahren das Elektronenstrukturproblem, als konisches Optimierungsproblem formuliert. Durch zwei Forschungsgruppen, die erste mit Braams, Ehara, Fujisawa, Fukuda, Nakata, Nakatsuji, Overton, Percus, Yamashita und Zhao [10, 28, 73, 74, 110] und die zweite mit Mazziotti und Veeraraghavan [55, 56, 59, 100], wurde auf diese Weise das Elektronenstrukturproblem nach anfänglichen Schwierigkeiten mit Überschätzungen numerisch hoch genau gelöst. Zum Beispiel berichteten Nakata *et al.* [74] von Überschätzungen in numerischen Berechnungen bei sieben Molekülen in der Größenordnung von einem Milli-Hartree.

Zur Behandlung von solchen numerischen Problemen und für die Verifikation konischer Optimierungsprobleme entwickelte Jansson [35, 37, 38] eine Technik zur Berechnung rigoroser Fehlerschranken. In dieser Arbeit werden diese rigorosen Fehlerschranken genutzt, um mit Vorüberlegungen von Chaykin [12] rigorose untere Fehlerschranken für das Elektronenstrukturproblem zu berechnen.

## 1.2. Gliederung

Im zweiten Kapitel der vorliegenden Arbeit wird zunächst die für die gesamte Arbeit benötigte Notation eingeführt. Dazu zählen insbesondere die konvexen Kegel und die Intervallarithmetik, welche im Abschnitt 2.2 vorgestellt werden. Mit dem konischen Optimierungsproblem (Abschnitt 2.3) wird in den folgenden Abschnitten eine von Jansson für konische Optimierungsprobleme generalisierte Theorie von Zertifikaten der Unzulässigkeit (Abschnitt 2.5) und rigorosen oberen und unteren Fehlerschranken (Abschnitt 2.6) eingeführt.

Das dritte Kapitel behandelt die konkrete Umsetzung der allgemeinen Theorie des zweiten Kapitels durch die Software VSDP, die im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelt wurde. Nach einer kurzen Einführung in die Gleitkommaarithmetik in Abschnitt 3.1, werden lineare und semidefinite Programme als konkrete konische Optimierungsprobleme im Abschnitt 3.2 vorgestellt und erste numerische Resultate der Software VSDP in Abschnitt 3.3 betrachtet.

Eine spezielle Problemstellung aus der Quantenchemie wird im vierten Kapitel behandelt. Die Elektronenstrukturprobleme können als hermitesche Eigenwertproblem formuliert werden und dienen der Berechnung der Grundzustandsenergie. Eine numerische Lösung dieser Eigenwertprobleme kann auf verschiedene Arten berechnet werden. Diese Arbeit nutzt die Problemformulierung mittels reduzierter Dichtematrizen. Die ursprüngliche Problemstellung wird dadurch relaxiert und es resultieren große konische Optimierungsprobleme, die schon für eine Vielzahl interessanter Moleküle gelöst werden konnten. Nach der Vorstellung einer Methode für die Berechnung der Grundzustandsenergie im Abschnitt 4.1 folgt eine kurze historische Einordnung dieser Methode in Abschnitt 4.2. Das Ziel dieser Arbeit, die Berechnung rigoroser Fehlerschranken für die Grundzustandsenergie eines  $N$ -Elektronen Moleküls, wird in Abschnitt 4.3 erreicht. Diese Fehlerschranken nutzen die Eigenschaften der relaxierten Optimierungsprobleme aus, berücksichtigen alle Rundungsfehler der numerischen Berechnungen und sichern somit den Anwender gegen fehlerhafte numerische Ergebnisse ab. In den numerischen Ergebnissen in Abschnitt 4.4 wurde für alle modellierten Moleküle eine rigorose untere Fehlerschranke berechnet. Dabei hat das kleinste berücksichtigte Optimierungsproblem bereits über hunderttausend Variablen und neunhundert Nebenbedingungen und das größte Optimierungsproblem hat über zwanzig Millionen Variablen und dreißigtausend Nebenbedingungen.

Mit dem fünften Kapitel werden die Ergebnisse zusammengefasst und es wird ein Ausblick für zukünftige Verbesserungen gegeben.

## 2. Konische Optimierung und Verifikation

### 2.1. Notation

In dieser Arbeit seien  $\mathbb{N}$ ,  $\mathbb{R}$  und  $\mathbb{C}$  jeweils die Mengen der natürlichen, reellen und komplexen Zahlen. Zu einer komplexen Zahl  $z = x + iy$  mit  $i^2 = -1$  sei  $z^*$  die komplex konjugierte Zahl. Eine allgemeine  $m \times n$  Matrix bezeichne eine zweidimensionale Anordnung eines  $(m \cdot n)$ -dimensionalen Vektorraums über den Körper  $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$  und sei mit

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{m1} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix}, \quad A_{ij} \in \mathbb{K},$$

bezeichnet. Die *adjungierte* Matrix zu  $A$  sei durch  $A^* = B$  definiert, d.h. für alle  $i \in \{1, 2, \dots, m\}$  und alle  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$  gilt  $B_{ij} = A_{ji}^*$ . Die *transponierte* Matrix  $A^T$  sei analog ohne komplexe Konjugation der Elemente definiert. Gilt für eine quadratische Matrix  $A = A^*$ , so nennt man die Matrix *selbstadjungiert* oder *hermitesch*. Eine hermitesche Matrix mit reellen Einträgen ist symmetrisch und ist ein Element aus der Menge der symmetrischen Matrizen  $\mathbb{S}^n$ . Seien  $\Omega \subseteq \{1, 2, \dots, m\}$  und  $\Omega' \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$  Indexmengen, dann sei  $A_{\Omega\Omega'}$  die Matrix, die aus der ursprünglichen Matrix  $A$  resultiert, wenn die Zeilen und Spalten, die nicht zu  $\Omega$  und  $\Omega'$  gehören, gestrichen werden.

Vektoren

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad x_j \in \mathbb{K},$$

können mit  $n \times 1$  Matrizen identifiziert werden und Skalare mit  $1 \times 1$  Matrizen. Bei Vektoren wird lediglich ein Index angegeben. Generell werden Skalare und Vektoren mit Kleinbuchstaben, Matrizen und Tensoren mit Großbuchstaben notiert. Großbuchstaben mit Doppelstrich stellen Mengen dar und mit einem Zirkumflex ausgezeichnete Großbuchstaben seien Operatoren, wie z.B. der Hamiltonoperator  $\hat{H}$ .

Eine  $m \times n$  Matrix lässt sich mit  $\Omega := \{1, 2, \dots, m\}$  als Vektor schreiben

$$\text{vec}(A) := \begin{pmatrix} A_{\Omega 1} \\ \vdots \\ A_{\Omega n} \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

wobei  $A_{\Omega j}$  die  $j$ -te Spalte von  $A$  darstellt. Offensichtlich kann für quadratische Matrizen eine inverse Operation in der Form

$$A = \text{mat}(\text{vec}(A)) \quad (2.2)$$

definiert werden.

Für eine symmetrische Matrix  $A \in \mathbb{S}^n$  kann die Vektorisierung (2.1) unter Ausnutzung der Symmetrie in der Form eines  $n(n+1)/2$  dimensionalen Vektors

$$\text{svec}(A, \alpha) := \left( A_{11} \quad \alpha A_{12} \quad A_{22} \quad \alpha A_{13} \quad \alpha A_{23} \quad A_{33} \quad \cdots \quad A_{nn} \right)^T \quad (2.3)$$

definiert werden. Redundante Elemente  $A_{ij}$  mit  $i > j$  treten nicht auf. Zusätzlich werden die Nebendiagonalelemente in (2.3) mit  $\alpha > 0$  skaliert, was sich im Folgenden als vorteilhaft erweisen wird. Mit der Kenntnis des Skalierungsfaktors  $\alpha$  kann die ursprüngliche Matrix  $A$  analog zu (2.2) wiederhergestellt werden<sup>1</sup>

$$A = \text{smat}(\text{svec}(A, \alpha), 1/\alpha). \quad (2.4)$$

Der Vektor mit den Hauptdiagonalelementen einer  $m \times n$  Matrix  $A$  mit  $k = \min\{m, n\}$  ist definiert durch

$$\text{diag}(A) := \begin{pmatrix} A_{11} \\ \vdots \\ A_{kk} \end{pmatrix}.$$

Eine Blockdiagonalmatrix mit Blockmatrizen  $A^{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, k$  ist durch

$$\text{diag}(A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(k)}) := \begin{pmatrix} A^{(1)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A^{(2)} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A^{(k)} \end{pmatrix}$$

gegeben.

Für  $m \times n$  Matrizen  $A, B \in \mathbb{K}^{m \times n}$  gilt die übliche elementweise Addition. Die Matrix  $A \bullet B$  bezeichne das *Hadamard-Produkt*, das durch elementweise Multiplikation ( $A_{ij} \cdot B_{ij}$ ) entsteht. Ebenso gilt für eine Matrix die elementweise Skalarmultiplikation. Die zweistelligen Operationen ( $=, \geq, >, \leq$  und  $<$ ), sowie die einstelligen Operationen ( $\min, \max, \inf, \sup$  und der Betrag  $|\cdot|$ ) werden ebenfalls elementweise angewendet.

Das Matrixprodukt für  $A \in \mathbb{K}^{m \times k}$  und  $B \in \mathbb{K}^{k \times n}$  ist eine  $m \times n$  Matrix und ist elementweise durch

$$(AB)_{ij} = (A \cdot B)_{ij} := \sum_{l=1}^k A_{il} \cdot B_{lj}$$

definiert.

Für zwei Matrizen  $A, B \in \mathbb{K}^{m \times n}$  ist das *Standardskalarprodukt*<sup>2</sup> in der Form

$$\langle A, B \rangle := \text{Spur}(A^* B) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n A_{ij}^* \cdot B_{ij} \quad (2.5)$$

<sup>1</sup>Bei Rechnungen in Gleitkommaarithmetik mit endlicher Genauigkeit kann, abhängig von der gewählten Skalierung  $\alpha$ , die ursprüngliche Matrix gegebenenfalls nur näherungsweise wiederhergestellt werden, vgl. Abschnitt 3.1.

<sup>2</sup>Auch als „Frobenius-Skalarprodukt“ bekannt, vgl. Ben-Tal und Nemirovski [5, S. 321].

definiert, wobei  $\text{Spur}(\cdot)$  die Summe der Hauptdiagonaleinträge der resultierenden  $n \times n$  Matrix  $A^*B$  bezeichnet. Für zwei Vektoren  $x, y$  reduziert sich (2.5) zu der gewohnten Darstellung des Standardskalarprodukts  $\langle x, y \rangle := x^*y = \sum_{i=1}^n x_i^* \cdot y_i$ . Die Vektorform des Standardskalarprodukts kann auch für zwei hermitesche Matrizen  $A, B \in \mathbb{S}^n$  durch die Vektorisierung der Argumente genutzt werden:  $\langle A, B \rangle = \langle \text{svec}(A, 1), \text{svec}(B, 2) \rangle$ .

Mit  $I$  sei die quadratische Einheitsmatrix beliebiger Dimension bezeichnet, die auf einfache Weise mit dem *Kronecker-Delta*

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

definiert werden kann. Die  $i$ -te Spalte der Einheitsmatrix sei der Vektor  $e_i$ .

Symmetrische Matrizen haben reelle Eigenwerte. Für  $A \in \mathbb{S}^n$  sei daher

$$\lambda(A) := \left( \lambda_1(A) \quad \lambda_2(A) \quad \dots \quad \lambda_n(A) \right)^T$$

ein Vektor mit  $\lambda_{\max}(A) = \lambda_1(A) \geq \lambda_2(A) \geq \dots \geq \lambda_n(A) = \lambda_{\min}(A)$  mit den nicht-aufsteigend sortierten Eigenwerten von  $A$ , wobei  $\lambda_{\min}(\cdot)$ ,  $\lambda_{\max}(\cdot)$  und  $\lambda_i(\cdot)$  den kleinsten, größten, beziehungsweise den  $i$ -ten Eigenwert bezeichnen. Die Determinante von  $A \in \mathbb{S}^n$  ist das Produkt der Eigenwerte:

$$\det(A) := \prod_{i=1}^n \lambda_i(A).$$

Für einen Vektor  $x$ ,  $p \in \mathbb{N}$  und  $p \geq 1$  sei die  $p$ -Norm durch

$$\|x\|_p := \left( |x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

gegeben. Sie induziert für eine Matrix  $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$  durch den bekannten Zusammenhang

$$\|A\|_p := \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p$$

ebenfalls eine Matrixnorm. Das Standardskalarprodukt (2.5) induziert die Frobeniusnorm  $\|A\|_F = \langle A, A \rangle^{\frac{1}{2}}$ .

Obere und untere Dreiecksmatrizen werden mit den Operatoren

$$\text{triu}(A) := \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ 0 & A_{22} & & A_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \end{pmatrix}$$

und

$$\text{tril}(A) := \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & \dots & 0 \\ A_{21} & A_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & \end{pmatrix}$$

beschrieben. Weiter sei für eine Matrix  $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$

$$\text{Bild}(A) := \{y \in \mathbb{K}^m : \exists x \in \mathbb{K}^n (y = Ax)\}$$

und

$$\text{Kern}(A) := \{x \in \mathbb{K}^n : Ax = 0\}.$$

## 2.2. Konvexe Kegel und reelle Intervalle

Sei  $\mathcal{X}$  ein reeller *Hilbertraum* mit einem Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , das die Norm  $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$  induziert. Weiter sei  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{X}$  ein *konvexer Kegel*, d.h. eine konvexe Menge, die bezüglich der Addition und der Multiplikation mit einem nicht-negativen Skalar abgeschlossen ist. Demnach gilt für alle  $x, y \in \mathcal{K}$

$$x + y \in \mathcal{K} \quad \text{und} \quad \alpha \cdot x \in \mathcal{K} \quad \text{für} \quad \alpha \in \mathbb{R}_+,$$

wobei  $\mathbb{R}_+$  die Menge der nicht-negativen reellen Zahlen beschreibt. Ein konvexer Kegel  $\mathcal{K}$  induziert eine Halbordnung

$$x \succeq_{\mathcal{K}} y \quad \iff \quad x - y \in \mathcal{K}. \quad (2.6)$$

Mit anderen Worten definiert (2.6) unter welchen Umständen  $x$  „größer“ als  $y$  bezüglich des konvexen Kegels  $\mathcal{K}$  ist. Weitere Eigenschaften der Halbordnung (2.6) sind:

$$\text{Reflexivität:} \quad a \succeq_{\mathcal{K}} a, \quad (2.7a)$$

$$\text{Homogenität:} \quad a \succeq_{\mathcal{K}} b \implies \alpha \cdot a \succeq_{\mathcal{K}} \alpha \cdot b, \quad (2.7b)$$

$$\text{Additivität:} \quad a \succeq_{\mathcal{K}} b \quad \text{und} \quad c \succeq_{\mathcal{K}} d \implies a + c \succeq_{\mathcal{K}} b + d, \quad (2.7c)$$

$$\text{Transitivität:} \quad a \succeq_{\mathcal{K}} b \quad \text{und} \quad b \succeq_{\mathcal{K}} c \implies a \succeq_{\mathcal{K}} c, \quad (2.7d)$$

wobei  $a, b, c, d \in \mathcal{K}$  und  $\alpha \in \mathbb{R}_+$ . Umgekehrt definiert eine Halbordnung mit den Eigenschaften (2.7) einen nicht-negativen Kegel

$$\mathcal{K} := \{x \in \mathcal{X} : x \succeq_{\mathcal{K}} 0\}.$$

Eine Halbordnung ist antisymmetrisch, wenn

$$a \succeq_{\mathcal{K}} b \quad \text{und} \quad b \succeq_{\mathcal{K}} a \quad \implies \quad a = b \quad (2.8)$$

gilt.

Eine antisymmetrische Halbordnung (2.8) definiert echte Kegel<sup>3</sup>, d.h. wenn  $a \in \mathcal{K}$  und  $-a \in \mathcal{K}$  gilt, muss  $a$  gleich dem Nullvektor sein. Dies sieht man wie folgt. Sei die Halbordnung  $\succeq_{\mathcal{K}}$  antisymmetrisch (2.8). Weiter seien  $a \in \mathcal{K}$  und  $-a \in \mathcal{K}$ . Somit gilt per Definition

$$a \succeq_{\mathcal{K}} 0 \quad \text{und} \quad -a \succeq_{\mathcal{K}} 0.$$

<sup>3</sup>In der Literatur auch als „spitze“ Kegel bezeichnet, vgl. Zeidler [108, S. 328].

Aus der Addition von  $a \succeq_{\mathcal{K}} a$  zu  $-a \succeq_{\mathcal{K}} 0$  folgt

$$0 \succeq_{\mathcal{K}} a.$$

Wegen der Antisymmetrie folgt die Eigenschaft eines echten Kegels:

$$a \succeq_{\mathcal{K}} 0 \quad \text{und} \quad 0 \succeq_{\mathcal{K}} a \quad \implies \quad a = 0.$$

Die geometrische Konsequenz ist, dass keine Gerade durch den Ursprung verläuft und der Ursprung die „Spitze“ des Kegels darstellt. Generell wird in dieser Arbeit für eine Halbordnung keine Antisymmetrie gefordert und andernfalls wie bei den echten Kegeln explizit erwähnt.

Sei  $\mathcal{X}^*$  der Dualraum der stetigen, linearen Funktionale auf dem Hilbertraum  $\mathcal{X}$ . Nach dem Darstellungssatz von Riesz (vgl. Werner [102, S. 228]) kann jedes stetige, lineare Funktional  $x^* \in \mathcal{X}^*$  als Skalarprodukt  $x^*(x) = \langle y, x \rangle$  für alle  $x \in \mathcal{X}$  geschrieben werden, wobei  $y$  in  $\mathcal{X}$  liegt und eindeutig durch  $x^*$  definiert ist. Es gilt  $\|x^*\| = \|y\|$ . Daher werden  $x^*$  und  $y$  miteinander identifiziert. Mathematisch bedeutet dies, dass der Dualraum eines Hilbertraums  $\mathcal{X}^*$  isometrisch isomorph zum Hilbertraum  $\mathcal{X}$  selbst ist. Aus diesem Grund werden beide Hilberträume miteinander identifiziert, und es wird häufig  $\mathcal{X} = \mathcal{X}^*$  geschrieben.

Die Menge  $\mathcal{K}^*$  aller positiven, linearen Funktionale

$$\mathcal{K}^* := \{y \in \mathcal{X}^* : \langle y, x \rangle \geq 0 \quad \text{für alle} \quad x \in \mathcal{K}\}$$

ist ebenfalls ein konvexer Kegel in  $\mathcal{X}^* = \mathcal{X}$  und induziert eine Halbordnung im Dualraum. Gilt  $\mathcal{K}^* = \mathcal{K}$ , so wird von einem selbstdualen Kegel gesprochen.

Im Folgenden wird lediglich  $\succeq$  für die Beschreibung einer Halbordnung verwendet, wenn der definierende Kegel  $\mathcal{K}$  aus dem Kontext ersichtlich ist.

Die in Anwendungen häufig auftretenden selbstdualen Kegel sind der nicht-negative Orthant

$$\mathbb{R}_+^n := \{x \in \mathbb{R}^n : x_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n\},$$

der Lorentz-Kegel<sup>4</sup>

$$\mathbb{L}_+^n := \{x \in \mathbb{R}^n : x_1 \geq \|x_{\mathcal{I}}\|_2\},$$

wobei  $\mathcal{I} = \{2, \dots, n\}$  die Indizes ungleich 1 bezeichnen, und der Kegel der reellen symmetrisch positiv semidefiniten Matrizen

$$\mathbb{S}_+^n := \{X \in \mathbb{S}^n : v^* X v \geq 0, \quad \text{für alle} \quad v \in \mathbb{R}^n\}.$$

Die Bezeichnung  $X \in \mathbb{S}_+^n$  wird in dieser Arbeit auch in der Form  $x \in \mathbb{S}_+^n$  geschrieben, wobei  $x = \text{svec}(X, \alpha)$  ist. Die durch  $\mathbb{S}_+^n$  beschriebene Halbordnung wird auch *Löwner-Halbordnung* genannt.

Zu einer Halbordnung wird die Menge

$$[x] = [\underline{x}, \bar{x}] := \{x \in \mathcal{X} : \underline{x} \preceq x \preceq \bar{x}\} = (\underline{x} + \mathcal{K}) \cap (\bar{x} - \mathcal{K})$$

<sup>4</sup>Wegen seiner Form oft auch als „ice-cream cone“ bezeichnet.

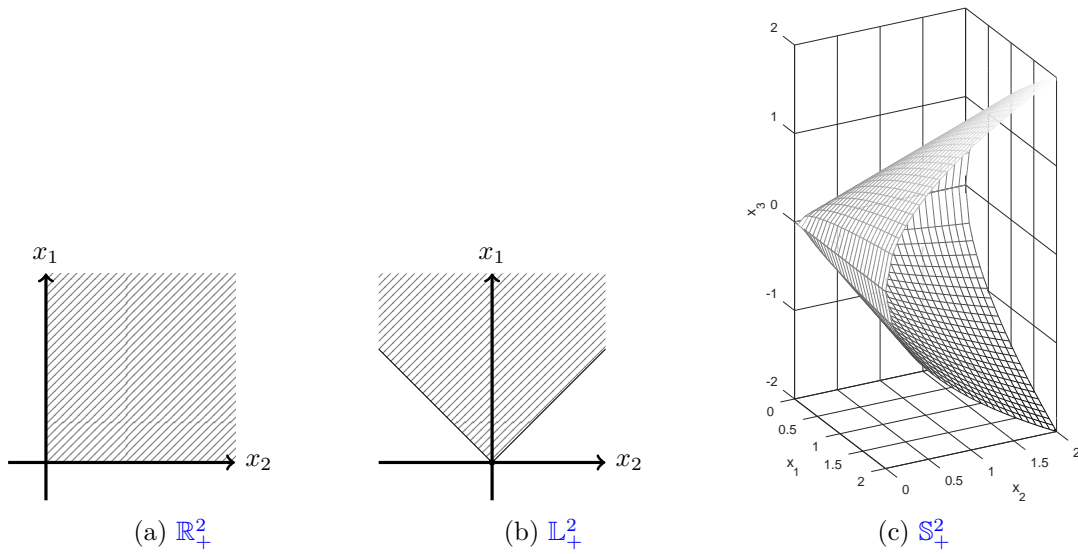


Abbildung 2.1.: Die Kegle  $\mathbb{R}_+^2 := \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1, x_2 \geq 0\}$ ,  $\mathbb{L}_+^2 := \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 \geq \|x_2\|_2\}$  und  $\mathbb{S}_+^2 := \begin{pmatrix} x_1 & x_3 \\ x_3 & x_2 \end{pmatrix} \succeq 0 \iff x_1, x_2 \geq 0, x_1 \cdot x_2 \geq x_3^2$  als grafische Darstellungen.

Intervall genannt. Für eine Untermenge  $\mathcal{M}$  eines reellen Hilbertraums  $\mathcal{X}$  mit einer Halbordnung wird der Vektor  $\underline{x}$  untere Schranke von  $\mathcal{M}$  genannt, wenn  $\underline{x} \preceq m$  für alle  $m \in \mathcal{M}$ . In diesem Fall wird  $\underline{x} \leq \mathcal{M}$  geschrieben. Wenn für jede andere untere Schranke  $\underline{y}$  von  $\mathcal{M}$  zusätzlich auch  $\underline{y} \preceq \underline{x}$  gilt, wird  $\underline{x} = \inf\{\mathcal{M}\}$  als das *Infimum* von  $\mathcal{M}$  bezeichnet. Analog werden obere Schranken und das *Supremum*  $\bar{x} = \sup\{\mathcal{M}\}$  von  $\mathcal{M}$  definiert.

Auf einem reellen Hilbertraum  $\mathcal{X}$  mit einer Halbordnung seien für  $x \in \mathcal{X}$  die Operationen

$$x^+ := \sup\{x, 0\}, \quad (2.9a)$$

$$x^- := \inf\{x, 0\} \quad \text{und} \quad (2.9b)$$

$$|x| := \sup\{x, -x\} = x^+ - x^- \quad (2.9c)$$

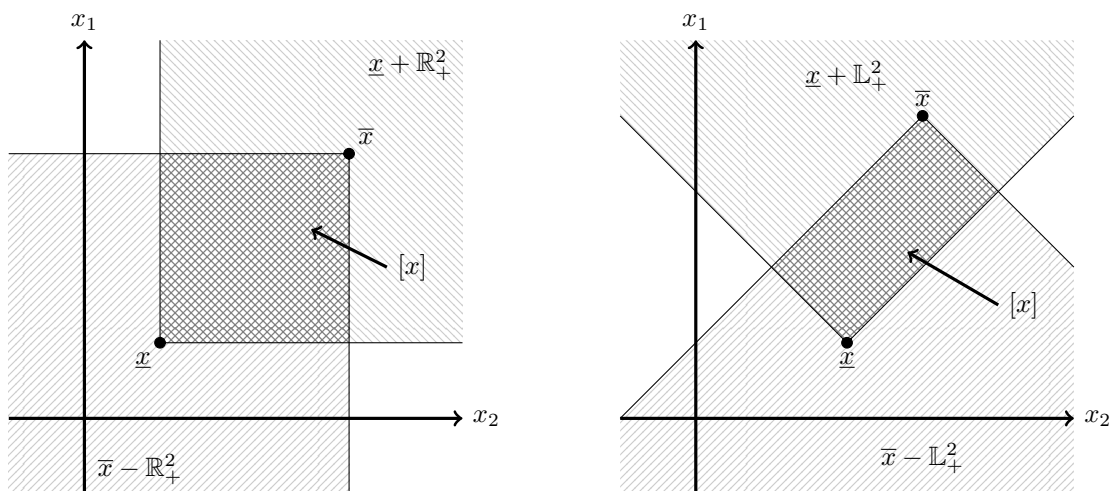
definiert. Es gilt  $x = x^+ + x^-$ ,  $|x| = 0$  genau dann wenn  $x = 0$ ,  $|\lambda x| = |\lambda||x|$  für reelle  $\lambda$ , und  $|x + y| \leq |x| + |y|$  für  $y \in \mathcal{X}$ .

Im eindimensionalen Spezialfall  $\mathcal{X} = \mathbb{R}$  und  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+$  bezeichnet  $\mathbb{IR}$  die Menge der reellen Intervalle. Für  $\mathbb{IR}$  wird die Arithmetik der reellen Zahlen zur Intervallarithmetik erweitert.

**Definition 1.** *Binäre Intervalloperationen.*

Seien  $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ ,  $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$  und für die Division  $0 \notin [b]$ . Dann gilt

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



(a)  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+^2 := \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1, x_2 \geq 0\}$ .

(b)  $\mathcal{K} = \mathbb{L}_+^2 := \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 \geq \|x_2\|_2\}$ .

Abbildung 2.2.: Intervalle bezüglich der Halbordnungen  $\mathbb{R}_+^2$  und  $\mathbb{L}_+^2$ .

Aus der Definition 1 ergibt sich für die einfachen Fälle der Addition und Subtraktion

$$[a] + [b] = [\underline{a} + \underline{b}, \bar{a} + \bar{b}] \quad \text{und} \quad [a] - [b] = [\underline{a} - \bar{b}, \bar{a} - \underline{b}].$$

Eine fundamentale Eigenschaft der Intervallarithmetik ist die Inklusionsmonotonie:

**Theorem 1.** *Einschließungseigenschaft.*

Seien  $[a], [b] \in \mathbb{IIR}$ ,  $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$  mit  $a \in [a]$  und  $b \in [b]$  und für die Division  $0 \notin [b]$ . Dann gilt  $a \circ b \in [a] \circ [b]$ .

*Beweis.* Das Theorem folgt direkt aus Definition 1. □

Die Regeln der Kommutativität und Assoziativität für die Grundrechenarten bleiben für Intervallgrößen erhalten. Lediglich die Distributivität muss in der Intervallarithmetik durch die Subdistributivität

$$[a] \cdot ([b] + [c]) \subseteq [a] \cdot [b] + [a] \cdot [c]$$

ersetzt werden. Die einzigen neutralen Elemente bezüglich der Addition und Multiplikation sind jeweils  $[0] = \{0\}$  und  $[1] = \{1\}$ .

Des Weiteren sei durch

$$[A] \leq [B] \iff \bar{A} \leq \underline{B},$$

eine Ordnung für  $\mathbb{IIR}$  definiert.

Der Mittelpunkt und der Radius eines Intervalls  $[x]$  seien durch

$$\begin{aligned} \text{mid}([x]) &:= (\bar{x} + \underline{x})/2 \quad \text{und} \\ \text{rad}([x]) &:= (\bar{x} - \underline{x})/2 \end{aligned}$$

gegeben. Mit dem Mittelpunkt  $m = \text{mid}([x])$  und dem Radius  $r = \text{rad}([x])$  erhält man eine weitere Darstellung für ein reelles Intervall  $[x]$ :

$$[x] = [x, \bar{x}] = \langle m, r \rangle. \quad (2.10)$$

Wie bei den reellen Zahlen können die Operationen zwischen reellen Vektoren und Matrizen ebenfalls zu Intervalloperationen erweitert werden. Eine Möglichkeit ist das einfache Ersetzen der reellen Größen und Operationen durch ihr jeweiliges Intervall-Pendant. Zum Beispiel ist für zwei Intervallmatrizen  $[C], [X] \in \mathbb{IR}^{n \times n}$  die  $i, j$ -Komponente des Matrixproduktes definiert durch

$$([C][X])_{ij} := \sum_{k=1}^n [C]_{ik}[X]_{kj}$$

und für das Standardskalarprodukt gilt

$$\langle [C], [X] \rangle = \text{Spur}([C]^T[X]) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [C]_{ij}[X]_{ij}.$$

Eine Intervallmatrix  $[A] \in \mathbb{IR}^{n \times n}$  ist symmetrisch, wenn  $[A]_{ij} = [A]_{ji}$  für alle  $i, j$  gilt. Ferner ist  $[A]$  positiv semidefinit, wenn alle  $A \in [A]$  mit  $A = A^T$  ebenfalls positiv semidefinit sind. Für eine symmetrische Intervallmatrix  $[A]$  sei der minimale Eigenwert

$$\lambda_{\min}([A]) := \min \left\{ \lambda_{\min}(A) : A \in [A], A = A^T \right\}.$$

In der Intervallarithmetik wurden verschiedene Methoden entwickelt, um alle oder einige Eigenwerte von Intervallmatrizen zu berechnen. Einige wichtige Referenzen sind Floudas [25, S. 342–361], Mayer [52] und Rump [85, 86].

Für lineare Gleichungssysteme mit Intervalleingabedaten  $[A] \in \mathbb{IR}^{m \times n}$  und  $[b] \in \mathbb{IR}^m$  wird häufig ein Intervallvektor  $[x] \in \mathbb{IR}^n$  gesucht, der die *Lösungsmenge*

$$\Sigma([A], [b]) := \left\{ x \in \mathbb{R}^n : Ax = b \text{ für } A \in [A] \text{ und } b \in [b] \right\} \quad (2.11)$$

enthält. Für den Fall, dass alle  $A \in [A]$  regulär sind, ist die Lösungsmenge (2.11) beschränkt und erfüllt per Definition die Eigenschaft

$$\forall A \in [A], \forall b \in [b] \quad \exists x \in [x] : Ax = b. \quad (2.12)$$

Generell ist die Berechnung einer scharfen Einschließung  $[x] \in \mathbb{IR}^n$  ein NP-hartes Problem. Es gibt jedoch einige Methoden, die effizient eine Einschließung  $[x]$  der Lösungsmenge für Intervalleingabedaten mit kleinem Radius berechnen können. Eine genaue Beschreibung dieser Methoden, die notwendigen Voraussetzungen und Approximationseigenschaften, sowie (2.12), können zum Beispiel in dem Buch von Neumaier [78, S. 91–98] gefunden werden. Grob gesagt stellt sich heraus, dass es für Intervallmatrizen für die es ein  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$  gibt, sodass  $\|I - R \cdot [A]\| < 1$  gilt, verschiedene Methoden mit  $\mathcal{O}(n^3)$

Operationen gibt, eine Einschließung  $[x]$  zu berechnen. Dabei ist  $R$  eine approximative Inverse von  $\text{mid}([A])$ . Im Allgemeinen überschätzt die Einschließung  $[x]$  die exakte Lösungsmenge und der Radius  $\text{rad}([x])$  schrumpft linear mit schrumpfenden Radii  $\text{rad}([A])$  und  $\text{rad}([b])$ .

Im Fall der Berechnung von Einschließungen linearer Systeme größerer Dimension sei der Leser auf Rump [85] verwiesen. Eine Einschließung der Lösungsmenge für Intervallmatrizen mit großem Radius, welche die Bedingung  $\|I - R \cdot [A]\| < 1$  nicht erfüllen, kann mit der Methode von Jansson [36] berechnet werden. In diesem Fall können mit VSDP [43] verifiziert Einschließungen mit vernachlässigbarer Überschätzung berechnet werden.

Als Beispiel für ein solches lineares Intervallgleichungssystem sei das viel zitierte Titelbild von Neumaier [78] genannt

$$\begin{pmatrix} 3.5 & [0, 2] & [0, 2] \\ [0, 2] & 3.5 & [0, 2] \\ [0, 2] & [0, 2] & 3.5 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} [-1, 1] \\ [-1, 1] \\ [-1, 1] \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

welches in Abbildung 2.3 veranschaulicht<sup>5</sup> wird.

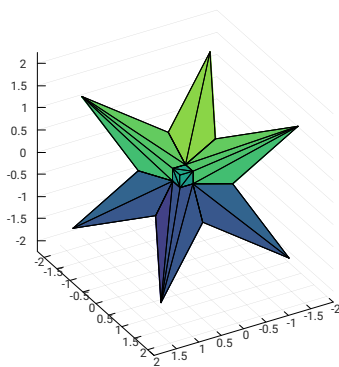


Abbildung 2.3.: Die Lösungsmenge des linearen Intervallgleichungssystems (2.13).

<sup>5</sup>Zur Darstellung wurde die INTLAB-Funktion `plotlinsol` verwendet.

## 2.3. Das konische Optimierungsproblem

In der mathematischen Optimierung hat sich eine Klasse von Optimierungsproblemen, die konvexen Optimierungsprobleme, durch Anwendbarkeit auf viele Problemstellungen sowie durch effiziente Lösungsmethoden hervorgerufen. Eine Vielzahl von Beispielen ist in den exzellenten Büchern von Boyd und Vandenberghe [9, Part II], Ben-Tal und Nemirovski [5, S. 2–11, 159–276] und Terlaky *et al.* [90] zu finden. Ein sehr umfangreicher Vergleich von Optimierungsalgorithmen für konische Optimierungsprobleme ist in Mittelmann [67] zu finden. Allgemein wird das mathematische Optimierungsproblem als die Aufgabe verstanden, diejenigen Elemente einer gegebenen Menge zu finden, die eine *Zielfunktion* minimieren oder maximieren. Im Falle der konvexen Optimierungsprobleme ist die Zielfunktion und die gegebene Menge konvex. Ein Spezialfall der konvexen Optimierung ist die konische Optimierung. Bei dieser wird als Zielfunktion das Standardskalarprodukt gewählt. Zur Beschreibung der Menge der zulässigen Elemente eines konischen Optimierungsproblems wird der in Abschnitt 2.2 eingeführte konvexe Kegel benötigt.

Die primale Standardform für das *konische Optimierungsproblem* ist

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & \langle c, x \rangle \\ \text{u.d.N.} \quad & Ax = b, \\ & x \in \mathcal{K}. \end{aligned} \tag{CP}$$

Dabei ist  $A$  ein stetiger linearer Operator von dem Hilbertraum  $\mathcal{X}$  in einen Hilbertraum  $\mathcal{Y}$ ,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{X}$  ist ein konvexer Kegel, der die Halbordnung definiert,  $c \in \mathcal{X}$  und  $b \in \mathcal{Y}$ .

Somit ist die Menge der zulässigen Punkte eines konischen Optimierungsproblems die Schnittmenge eines konvexen Kegels mit einem durch die lineare Gleichung  $Ax = b$  beschriebenen affinen Raum.

Der primal optimale Zielfunktionswert von (CP) wird mit  $\hat{f}_p$  bezeichnet. Ist die Zielfunktion  $\langle c, x \rangle$  über der zulässigen Menge nach unten *unbeschränkt*, wird  $\hat{f}_p := -\infty$  geschrieben. Existieren keine zulässigen Punkte wird  $\hat{f}_p := +\infty$  geschrieben.

Zu jedem primalen konischen Optimierungsproblem existiert ein duales Problem. Ausgangspunkt dieser Dualität ist die *Lagrange-Funktion* von (CP):

$$L(x, y) := \langle c, x \rangle + \langle y, b - Ax \rangle \tag{2.14a}$$

$$= \langle c, x \rangle + \langle y, b \rangle - \langle y, Ax \rangle \tag{2.14b}$$

$$= \langle y, b \rangle + \langle c - A^*y, x \rangle, \tag{2.14c}$$

wobei  $y \in \mathcal{Y}$  und  $A^*$  der adjungierte Operator ist. Das lineare Funktional  $y$  wird *Lagrange-Vektor* genannt. Mit der Lagrange-Funktion kann wegen (2.14a) ein zu (CP) äquivalentes Problem formuliert werden:

$$\inf_{x \in \mathcal{K}} \sup_{y \in \mathcal{Y}} L(x, y) = \begin{cases} \inf_{x \in \mathcal{K}} \langle c, x \rangle & \text{wenn } b - Ax = 0 \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases} \tag{2.15}$$

Mit (2.14c) und der Vertauschung von Infimum und Supremum in (2.15) kann eine untere Schranke für den primalen optimalen Zielfunktionswert von (CP) formuliert werden

$$\sup_{y \in \mathcal{Y}} \inf_{x \in \mathcal{K}} L(x, y) = \begin{cases} \sup_{y \in \mathcal{Y}} \langle y, b \rangle & \text{wenn } c - A^*y \in \mathcal{K}^* \\ -\infty & \text{sonst,} \end{cases}$$

wie unten gezeigt wird. Die duale Standardform eines konischen Optimierungsproblems ist somit:

$$\begin{aligned} & \text{Maximiere} && \langle y, b \rangle \\ & \text{u.d.N.} && c - A^*y \in \mathcal{K}^*, \\ & && y \in \mathcal{Y}. \end{aligned} \tag{DCP}$$

Analog zu (CP) bezeichnet  $\hat{f}_d$  den dualen optimalen Zielfunktionswert von (DCP), bei Unbeschränktheit von  $\langle y, b \rangle$  nach oben wird  $\hat{f}_d := +\infty$  geschrieben, und bei Unzulässigkeit wird  $\hat{f}_d := -\infty$  geschrieben.

Die folgende Betrachtung zeigt, warum (DCP) den primalen optimalen Zielfunktionswert nach unten beschränkt: Sei  $x$  ein primal zulässiger Punkt und sei  $y$  ein dual zulässiger Punkt. Beide seien nicht notwendigerweise optimal. Dann gilt analog zu (2.14) für alle konischen Optimierungsprobleme

$$\langle c, x \rangle = \langle c, x \rangle + \underbrace{\langle y, b - Ax \rangle}_{=0} = \langle y, b \rangle + \underbrace{\langle c - A^*y, x \rangle}_{\geq 0} \geq \langle y, b \rangle.$$

Die Ungleichung  $\langle c, x \rangle \geq \langle y, b \rangle$  wird *schwache Dualität* genannt und die Differenz  $\hat{f}_p - \hat{f}_d$  *Dualitätslücke*.

*Starke Dualität*, d.h.  $\hat{f}_p = \hat{f}_d$ , gilt nur, wenn die *Komplementärbedingung*

$$\langle c - A^*y, x \rangle = 0 \tag{2.16}$$

erfüllt ist. Ein primal und dual zulässiges Punktepaar  $x, y$ , welches (2.16) erfüllt, ist ein Sattelpunkt der Lagrange-Funktion (2.14). Die Dualitätslücke zwischen dem primalen und dualen Problem ist in diesem Fall gleich Null und beide Probleme besitzen genau dann eine optimale Lösung, wenn ein solches primal und dual zulässiges Punktepaar existiert, welches die Komplementärbedingung (2.16) erfüllt. Andernfalls, wenn kein primal und dual zulässiges Punktepaar existiert, muss nicht notwendigerweise starke Dualität vorliegen. Allerdings kann für lineare Optimierungsprobleme generell starke Dualität gezeigt werden.

Grundsätzlich kann eines der Probleme (CP) oder (DCP) optimale Lösungen besitzen, während das jeweils duale unzulässig ist. Ebenso kann die Dualitätslücke im Optimum positiv sein. In diesen beiden Fällen gilt jedoch keine starke Dualität.

In Ben-Tal und Nemirovski [5, S. 57–58] werden weitere hinreichende Bedingungen für starke Dualität gegeben. Im Folgenden wird  $x \succ_{\mathcal{K}} y$  geschrieben, wenn  $x - y$  im relativen Inneren des Kegels  $\mathcal{K}$  liegt.

**Theorem 2.** *Starke Dualität (Slater-Bedingung)*

- a) Existiert für (CP) ein streng zulässiger primaler Punkt  $\hat{x} \succ 0$  und der optimale Zielfunktionswert  $\hat{f}_p$  ist endlich, dann gilt  $\hat{f}_p = \hat{f}_d$ , und das duale Supremum  $\hat{y}$  wird angenommen.
- b) Existiert für (DCP) ein  $\hat{y} \in \mathcal{Y}$ , sodass  $c - A^*\hat{y} \succ 0$  gilt, und der optimale Zielfunktionswert  $\hat{f}_d$  ist endlich, dann gilt  $\hat{f}_p = \hat{f}_d$ , und das primale Infimum  $\hat{x}$  wird angenommen.

Nach Theorem 2 reicht lediglich ein primaler oder dualer strikt zulässiger optimaler Punkt mit endlichem Zielfunktionswert aus, um die Existenz eines primalen und dualen optimalen Punktes mit Dualitätslücke gleich Null sicherzustellen. Die Aussage von Theorem 2 wird als *Slater-Bedingung* (engl. Slater's constraint qualification) bezeichnet, siehe Boyd und Vandenberghe [9, S. 226–227, 269–271].

Die Lagrange-Dualität hat einen großen Stellenwert in der mathematischen Optimierung. Zum Auffinden von primal und dual zulässigen und optimalen Lösungen werden häufig *Innere-Punkte-Verfahren* verwendet. Die optimale Lösung erfüllt die *Karush-Kuhn-Tucker-Optimalitätsbedingungen* oder kurz *KKT-Bedingungen* (vgl. Jansson [38, S. 342] und Anjos [2, S. 115–116]):

$$\begin{aligned} Ax &= b, \\ s + A^*y &= c, \\ \langle s, x \rangle &= 0, \\ x \in \mathcal{K}, s \in \mathcal{K}^*, y &\in \mathcal{Y}. \end{aligned} \tag{2.17}$$

In (2.17) wird  $s$  als *Schlupfvariable* bezeichnet. Somit ermöglicht die Lagrange-Dualität die Überprüfung, ob eine gegebene zulässige Lösung optimal ist.

Die konische Optimierung kann als eine Erweiterung der Linearen Programmierung mit Kegel-Nebenbedingungen angesehen werden. Für den Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+^n$  entsprechen (CP) und (DCP) genau einem primalen und dualen Linearen Programm. Die in dieser Arbeit verwendeten Spezialfälle von konischen Optimierungsproblemen werden in Abschnitt 3.2 eingeführt.

Zum Abschluss dieses Abschnitts sei noch angemerkt, dass das konische Optimierungsproblem, egal ob in primaler (CP) oder dualer (DCP) Standardform, vollständig durch die Problemdaten beschrieben wird. Aus diesem Grund kann abgekürzt

$$\mathcal{P}_{\mathcal{K}} = (A, b, c)$$

geschrieben werden. Für eine Software zum Lösen von konischen Optimierungsproblemen entspricht das Eingabeformat meist einer der Standardformen (CP) oder (DCP).

## 2.4. Block-strukturierte Variablen

Bei vielen konischen Optimierungsproblemen ist die Optimierungsvariable in Blöcken strukturiert. Jeder Block ist dabei einem konvexen Kegel zugeordnet. Somit ist die Op-

Optimierungsvariable ein Element des Kartesischen Produktes dieser unterschiedlichen Kegel.

Das heißt für  $n$  Blöcke gibt es  $n$  reelle Hilberträume  $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_n$ , die konvexen Kegel  $\mathcal{K}_1 \subseteq \mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{K}_n \subseteq \mathcal{X}_n$ , einen reellen Hilbertraum  $\mathcal{Y}$  und  $n$  stetige lineare Operatoren  $A_j: \mathcal{X}_j \rightarrow \mathcal{Y}$ . Seien  $\mathcal{X}$  und  $\mathcal{K}$  die Kartesischen Produkte der Hilberträume  $\mathcal{X}_j$  und der konvexen Kegel  $\mathcal{K}_j$  mit  $j = 1, \dots, n$ , dann kann das Block-strukturierte konische Optimierungsproblem in der in Abschnitt 2.3 bereits eingeführten Form

$$\begin{aligned} &\text{Minimiere} && \langle c, x \rangle \\ &\text{u.d.N.} && Ax = b, \\ &&& x \in \mathcal{K} \end{aligned} \tag{CP}$$

geschrieben werden, wobei

$$\begin{aligned} x &= (x_1, \dots, x_n)^T && \text{mit } x_j \in \mathcal{X}_j, \\ c &= (c_1, \dots, c_n)^T && \text{mit } c_j \in \mathcal{X}_j^*, \\ A &= (A_1, \dots, A_n) : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}. \end{aligned}$$

Genauer erhalten wir

$$Ax := \sum_{j=1}^n \langle A_j, x_j \rangle \quad \text{und} \quad \langle c, x \rangle := \sum_{j=1}^n \langle c_j, x_j \rangle,$$

sowie das primale konische Optimierungsproblem mit Block-strukturierten Variablen

$$\begin{aligned} &\text{Minimiere} && \langle c_1, x_1 \rangle + \dots + \langle c_n, x_n \rangle \\ &\text{u.d.N.} && \langle A_1, x_1 \rangle + \dots + \langle A_n, x_n \rangle = b, \\ &&& x_j \in \mathcal{K}_j, \quad j = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

und das duale Problem

$$\begin{aligned} &\text{Maximiere} && \langle y, b \rangle \\ &\text{u.d.N.} && \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} A_1^* \\ \vdots \\ A_n^* \end{pmatrix} y \in \mathcal{K}_1^* \times \dots \times \mathcal{K}_n^*, \\ &&& y \in \mathcal{Y}. \end{aligned}$$

## 2.5. Zertifikate der Unzulässigkeit

*Alternativsätze* besagen, dass für gewisse Systeme von Gleichungen und Ungleichungen jeweils nur eines eine Lösung besitzt, jedoch nicht beide. Eine Lösung des einen Systems ist ein *Zertifikat der Unzulässigkeit* des jeweils anderen Systems. Demnach kann durch einen Alternativsatz die Unzulässigkeit eines Systems bewiesen werden. Solche Zertifikate der Unzulässigkeit werden häufig in Optimierungsalgorithmen, insbesondere für globale Optimierungsprobleme, verwendet, wenn keine zulässigen Lösungen für die primalen oder dualen Nebenbedingungen berechnet werden können.

Im Folgenden wird für das konische Optimierungsproblem kurz gezeigt, wie solche Zertifikate berechnet werden können, indem zwei bekannte Alternativsätze mit kurzem Beweis vorgestellt werden:

**Satz 1.** *Erfüllt  $\hat{y} \in \mathcal{Y}$  eines der Systeme*

$$A^*\hat{y} \in \mathcal{K}^*, \quad \langle \hat{y}, b \rangle < 0, \quad (2.18a)$$

$$-A^*\hat{y} \in \mathcal{K}^*, \quad \langle \hat{y}, b \rangle > 0, \quad (2.18b)$$

*so besitzt das System der primalen Nebenbedingungen*

$$Ax = b, \quad x \in \mathcal{K} \quad (2.19)$$

*keine Lösung.*

*Beweis.* Für (2.18a) sei  $x$  ein zulässiger Punkt von (2.19), dann gilt  $0 \leq \langle A^*\hat{y}, x \rangle = \langle \hat{y}, Ax \rangle = \langle \hat{y}, b \rangle$  und steht im Widerspruch zu der Annahme  $\langle \hat{y}, b \rangle < 0$ . Für (2.18b) folgt analog ein Widerspruch.  $\square$

Das lineare Funktional  $\hat{y}$  wird *Zertifikat primaler Unzulässigkeit* genannt.

**Satz 2.** *Erfüllt  $\hat{x} \in \mathcal{X}$  das System*

$$A\hat{x} = 0, \quad \hat{x} \in \mathcal{K}, \quad \langle c, \hat{x} \rangle < 0, \quad (2.20)$$

*so besitzt das System der dualen Nebenbedingungen*

$$c - A^*y \in \mathcal{K}^*, \quad y \in \mathcal{Y} \quad (2.21)$$

*keine Lösung.*

*Beweis.* Sei  $y$  ein zulässiger Punkt von (2.21), dann gilt  $0 \leq \langle c - A^*y, \hat{x} \rangle = -\langle y, A\hat{x} \rangle + \langle c, \hat{x} \rangle$  und steht im Widerspruch zur Annahme  $\langle c, \hat{x} \rangle < 0$ . Das System (2.21) besitzt keine Lösung.  $\square$

Der Vektor  $\hat{x}$  wird *Zertifikat dualer Unzulässigkeit* genannt.

## 2.6. Rigorose Fehlerschranken für konische Optimierungsprobleme

Dieser Abschnitt beschreibt die theoretischen Grundlagen von rigorosen a posteriori Fehlerschranken. Es stellt sich heraus, dass für die Berechnung dieser Fehlerschranken lediglich approximative primale und duale Lösungen  $\tilde{x}$  und  $\tilde{y}$  benötigt werden. Weitere Annahmen über die Genauigkeit der Approximationen sind nicht notwendig, nicht einmal primale oder duale Zulässigkeit wird für die Approximationen gefordert. Jedoch führen schlechte Approximationen zu Überschätzungen bei den Fehlerschranken.

Besonders effizient kann der optimale Zielfunktionswert rigoros eingeschlossen werden, wenn neben den Eingabedaten  $\mathcal{P}_{\mathcal{K}} = (A, b, c)$  zusätzlich Schranken für die Größenordnung der Lösung angegeben werden können. Diese werden „boundedness qualifications“ genannt. Im Gegensatz zu der strengen Forderung der starken Dualität der Slater-Bedingung (Theorem 2), können solche Bedingungen für viele praktische Probleme angegeben werden.

**Definition 2** (Primal Boundedness Qualification (PBQ)).

- (i) Entweder ist das primale Problem (CP) unzulässig,
- (ii) oder  $\hat{f}_p$  ist endlich, und es existiert eine einfache Schranke  $\bar{x} \in \mathcal{K}$  sodass für jedes  $\varepsilon > 0$  ein primal zulässiges  $x(\varepsilon)$  existiert, mit  $\bar{x} \succeq x(\varepsilon)$  und  $\langle c, x(\varepsilon) \rangle - \hat{f}_p \leq \varepsilon$ .

Das folgende Theorem beschreibt eine endliche untere Schranke  $\underline{f}_p$  des primalen optimalen Zielfunktionswertes.

**Theorem 3.** Sei Definition 2 erfüllt,  $\tilde{y} \in \mathcal{Y}$  und sei  $d := c - A^*\tilde{y}$ . Weiter sei  $\underline{d}^- \leq \{d, 0\}$ , dann gilt:

- a) Der primale optimale Zielfunktionswert ist von unten durch

$$\hat{f}_p \geq \langle \tilde{y}, b \rangle + \langle \underline{d}^-, \bar{x} \rangle =: \underline{f}_p$$

beschränkt.

- b) Wenn  $\underline{d}^- = 0$ , dann ist  $\tilde{y}$  dual zulässig und es gilt  $\hat{f}_d \geq \underline{f}_p = \langle \tilde{y}, b \rangle$ . Ist  $\tilde{y}$  zusätzlich optimal, dann gilt  $\hat{f}_d = \underline{f}_p$ .

Für einen Beweis siehe Jansson [37, S. 11]. Grundsätzlich impliziert eine approximative Lösung  $\tilde{y}$  in der Nähe der optimalen Lösung eine untere Schranke  $\underline{d}^-$  nahe beim Nullvektor. Die Überschätzung ist daher gering.

Um eine rigorose obere Fehlerschranke für den optimalen Zielfunktionswert eines konischen Optimierungsproblems zu berechnen, werden Schranken für die duale Lösung benutzt.

**Definition 3** (Dual boundedness qualification (DBQ)).

- (i) Entweder ist das duale Problem (DCP) unzulässig,
- (ii) oder  $\hat{f}_d$  ist endlich, und es existiert eine Schranke  $\bar{y}$ , sodass für jedes  $\varepsilon > 0$  ein dual zulässiges  $y(\varepsilon)$  existiert, mit  $\bar{y} \geq |y(\varepsilon)|$  und  $\hat{f}_d - \langle y(\varepsilon), b \rangle \leq \varepsilon$ .

**Theorem 4.** Sei die Definition 3 erfüllt,  $\tilde{x} \in \mathcal{X}$ ,  $\tilde{x}^+ = \sup\{\tilde{x}, 0\}$  und

$$|A\tilde{x}^+ - b| \leq \bar{r}.$$

Dann gilt:

a) Der dual optimale Zielfunktionswert ist von oben durch

$$\hat{f}_d \leq \langle c, \tilde{x}^+ \rangle + \langle \bar{y}, \bar{r} \rangle =: \bar{f}_d$$

beschränkt.

b) Wenn  $\bar{r} = 0$  und  $\tilde{x} = \tilde{x}^+$ , dann ist  $\tilde{x}$  primal zulässig und  $\hat{f}_p \leq \bar{f}_d = \langle c, \tilde{x}^+ \rangle = \langle c, \tilde{x} \rangle$ .  
Wenn  $\tilde{x}$  zusätzlich optimal ist, dann gilt  $\hat{f}_p = \bar{f}_d$ .

Für einen Beweis siehe Jansson [37, S. 13].

Ähnlich wie die untere Fehlerschranke, nutzt die obere Fehlerschranke die Approximation  $\langle c, \tilde{x}^+ \rangle$  aus und addiert die Korrektur  $\langle \bar{y}, \bar{r} \rangle$ , welche die Verletzung der linearen Gleichung berücksichtigt.

Unter der Voraussetzung, dass gute Approximationen berechnet wurden, gilt  $\tilde{x} \in \mathcal{K}$  oder zumindest ist  $\tilde{x}$  nahe bei  $\mathcal{K}$ . Dies bedeutet, dass die Abstände  $\|\tilde{x} - \tilde{x}^+\|$  und  $|\langle c, \tilde{x}^+ \rangle - \langle c, \tilde{x} \rangle|$  klein sind. Daher wird in Theorem 4 das Supremum  $\tilde{x}^+$  anstelle von  $\tilde{x}$  verwendet.

Grundsätzlich ist es nicht möglich  $\tilde{x}^+$  exakt zu berechnen, jedoch ist jede dichte obere Schranke  $\tilde{\tilde{x}} \geq \tilde{x}^+$  ausreichend.

Die Theoreme 3 und 4 setzen die Existenz von  $\varepsilon$ -optimalen Punkten und einfache Schranken (PBQ bzw. DBQ) voraus. Sind für ein Optimierungsproblem a priori keine solche einfachen Schranken bekannt, können in vielen Fällen dennoch verifizierte primal und dual zulässige Lösungen berechnet werden, die dicht am Optimum liegen. Mithilfe dieser Lösungen können in vielen Fällen ebenfalls angemessene Fehlerschranken für den optimalen Zielfunktionswert berechnet werden. Allerdings ist der numerische Aufwand höher. In Jansson [37, S. 14] wird dazu ein Algorithmus vorgestellt, welcher hier kurz skizziert wird:

---

**Algorithmus 1** Verifizierte Fehlerschranken ohne a priori Schranken.

---

**Eingabe:**  $\mathcal{P}_{\mathcal{K}} = (A, b, c)$  und approximative Lösung.

**Ausgabe:** Verifizierte Fehlerschranke und Einschließung einer zulässigen Lösung.

- 1: Die Eingabedaten  $\mathcal{P}_{\mathcal{K}}$  des ursprünglichen Optimierungsproblems werden gezielt gestört, so dass die exakte optimale Lösung des gestörten Problems eine innere zulässige Lösung des ursprünglichen Optimierungsproblems ist.
  - 2: Eine approximative Lösung des gestörten Optimierungsproblems wird berechnet.
  - 3: Mit dieser Approximation wird eine Einschließung (d.h. geeignete Intervallgrößen) berechnet, die eine zulässige Lösung enthalten.
  - 4: Die Zielfunktion wird für die Einschließung ausgewertet.
- 

Details zur Realisierung von Algorithmus 1 für den Spezialfall linearer Programme sind in Jansson [40] zu finden. Für glatte konvexe Optimierungsprobleme vergleiche Jansson [35] und für semidefinite Programme siehe Jansson *et al.* [42].

## 2.7. Rigorose Zertifikate der Unzulässigkeit für konische Optimierungsprobleme

Viele Lösungsverfahren für konische Optimierungsprobleme berechnen approximative Zertifikate der Unzulässigkeit, falls sie keine approximativ zulässigen optimalen Lösungen finden.

Die primale Unzulässigkeit eines konischen Optimierungsproblems kann mit einem approximativen Zertifikat primaler Unzulässigkeit  $\tilde{y} \in \mathcal{Y}$  bewiesen werden:

**Korollar 1.** *Ist in Satz 1 die verifizierte Auswertung der Bedingung (2.18) mit  $\hat{y} = \tilde{y}$  erfüllt, d.h.  $\langle \tilde{y}, b \rangle$  ist negativ und  $A^*\tilde{y}$  liegt im Kegel  $\mathcal{K}^*$ , bzw.  $\langle \tilde{y}, b \rangle$  ist positiv und  $-A^*\tilde{y}$  liegt im Kegel  $\mathcal{K}^*$ , dann ist  $\tilde{y}$  ein rigoroses Zertifikat primaler Unzulässigkeit.*

*Beweis.* Der Beweis erfolgt analog zu Satz 1. □

Die verifizierte Auswertung der Bedingung (2.18) hängt von der Problemstellung ab und benötigt Informationen über den Operator  $A^*$  und den Kegel  $\mathcal{K}^*$ . Konkrete Beispiele werden im Abschnitt 3.2 gegeben.

Mit einem approximativen Zertifikat dualer Unzulässigkeit  $\tilde{x} \in \mathcal{X}$  kann das Gleichungssystem und die Vorzeichenbedingung (2.20) rigoros geprüft werden, um duale Unzulässigkeit zu beweisen. Das unterbestimmte Gleichungssystem  $A\tilde{x} = 0$  ist im Allgemeinen nicht exakt erfüllt. Um ein rigoroses Zertifikat dualer Unzulässigkeit zu erhalten, wird in Jansson [37] folgender Algorithmus vorgeschlagen:

---

**Algorithmus 2** Einschließung eines rigorosen Zertifikates dualer Unzulässigkeit.

---

**Eingabe:**  $A$  und  $c$  aus  $\mathcal{P}_{\mathcal{K}}$  und  $\tilde{x} \in \mathcal{X}$ .

**Ausgabe:** Eine Einschließung  $[x]$  oder eine Warnung.

- 1: Wenn  $\langle c, \tilde{x} \rangle$  nicht-negativ ist, wird der Algorithmus mit der Warnung beendet, dass ein Zertifikat dualer Unzulässigkeit nicht berechnet werden kann.
- 2: Andernfalls, wenn  $\langle c, \tilde{x} \rangle$  negativ ist, wird eine Einschließung  $[x]$  der Lösung des unterbestimmten linearen Systems

$$\begin{aligned} Ax &= 0, \\ \langle c, x \rangle &< 0, \end{aligned} \tag{2.22}$$

berechnet.

- 3: Wenn  $[x] \subseteq \mathcal{K}$  gilt, dann existiert ein  $\hat{x} \in [x]$ , das die Bedingung (2.20) erfüllt, und ein rigoroses Zertifikat dualer Unzulässigkeit ist. In diesem Fall gebe  $[x]$  zurück. Andernfalls gebe eine Warnung aus, dass ein Zertifikat dualer Unzulässigkeit nicht berechnet werden kann.
- 

Aufgrund der Unterbestimmtheit des linearen Systems (2.22) ist die Lösungsmenge nicht notwendigerweise beschränkt. Nach (2.12) ist es lediglich erforderlich eine Einschließung für ein Teilsystem von (2.22) zu bestimmen. Dazu schlägt Jansson [40, S. 919–920] eine Trennung des linearen Systems (2.22) in einen approximativ regulären Anteil und eine

Restmatrix vor, bei entsprechender Anpassung der rechten Seite. Die Lösungsmenge des resultierenden quadratischen Systems kann mit einem Algorithmus zur Einschließung quadratischer Intervall-Gleichungssysteme rigoros eingeschlossen werden. Ein aus  $\tilde{x}$  und der Einschließung des quadratischen Systems rekonstruiertes  $[x]$  erfüllt die Eigenschaft (2.12). Das Vorgehen sei durch folgenden Algorithmus beschrieben:

---

**Algorithmus 3** Einschließung für ein unterbestimmtes lineares System.

---

**Eingabe:**  $[A] \in \mathbb{IR}^{m \times n}$  mit  $m < n$ ,  $[b] \in \mathbb{IR}^m$  und  $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ .

**Ausgabe:** Eine Einschließung  $[x] \in \mathbb{IR}^n$  oder eine Warnung.

- 1: Setze  $\Omega := \{1, \dots, m\}$  und  $\Omega' := \{1, \dots, n\}$ .
- 2: Bestimme eine Indexmenge  $\mathcal{I} := \{i_1, \dots, i_m\} \subseteq \Omega'$ , sodass  $[A'] := [A_{\Omega\mathcal{I}}] \in \mathbb{IR}^{m \times m}$  approximativ regulär ist.  $\mathcal{I}$  kann z.B. mithilfe einer LU- oder QR-Zerlegung bestimmt werden.
- 3: Setze  $[b'] := [b] - \sum_{j=1, j \notin \mathcal{I}}^n [A_{\Omega j}] \tilde{x}_j$ .
- 4: Bestimme eine Einschließung  $[x'] \in \mathbb{IR}^m$  des quadratischen Systems<sup>6</sup>  $\Sigma([A'], [b'])$ .
- 5: Konnte keine Einschließung  $[x']$  gefunden werden, wird der Algorithmus mit einer Warnung beendet. Ansonsten setze für alle  $j \in \Omega'$

$$[x_j] := \begin{cases} [x'_k] & \text{wenn } j = i_k, \\ \tilde{x}_j & \text{sonst.} \end{cases}$$

---

Wie beim Zertifikat primaler Unzulässigkeit, hängt die Überprüfung der dualen Unzulässigkeit von der Problemstellung ab und benötigt weitere Informationen über den Operator  $A$ , sowie den Kegel  $\mathcal{K}$ .

---

<sup>6</sup>Die INTLAB [84] Funktion `verifylss` implementiert z.B. einen solchen Algorithmus.

## 3. VSDP, Implementierungen und Resultate

### 3.1. Gleitkommaarithmetik

Beim Übergang von den theoretischen Überlegungen zu einer praktischen Implementierung müssen einige Einschränkungen berücksichtigt werden.

Die heute verwendeten Rechner nutzen für numerische Berechnungen lediglich eine Untermenge der reellen Zahlen, die Gleitkommazahlen  $\mathbb{F} \subset \mathbb{R} \cup \{\pm\infty, \text{NaN}\}$ , wobei die zwei Symbole  $\pm\infty$  für unendliche positive und negative Elemente stehen und **NaN** (*engl. not a number*) ist ein Symbol für das Ergebnis einer undefinierten Operation. Für diese Gleitkommazahlen stellt der „IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic“ in der Revision von 2008 [34], im Folgenden mit *IEEE-754* abgekürzt, die wichtigste normative Grundlage dar. Der *IEEE-754* Standard definiert Formate, die Konvertierung zwischen diesen Formaten, grundlegende Rechenoperationen, sowie Ausnahmebehandlungen. Für eine sehr ausführliche und lesenswerte Einführung in die Gleitkommaarithmetik, sowie den *IEEE-754* Standard, sei der Leser auf Muller *et al.* [71] verwiesen.

Bei der Implementierung von numerischen Algorithmen ist insbesondere darauf zu achten, dass die Menge der Gleitkommazahlen endlich ist. Im Allgemeinen sind daher Ein- und Ausgaben von numerischen Algorithmen nur Approximationen.

Mithilfe von Rundungsfunktionen können reellen Zahlen auf die Gleitkommazahlen abgebildet werden. Für die folgenden Abschnitte ist besonders die vom *IEEE-754* spezifizierte gerichtete Rundung zur nächstkleineren bzw. zur nächstgrößeren Gleitkommazahl<sup>1</sup> von Bedeutung:

$$\forall r \in \mathbb{R}: \quad fl_{\nabla}(r) := \max\{f \in \mathbb{F}: f \leq r\} \quad (3.1a)$$

$$\forall r \in \mathbb{R}: \quad fl_{\Delta}(r) := \min\{f \in \mathbb{F}: r \leq f\}. \quad (3.1b)$$

Ebenso gelten grundlegende Eigenschaften der reellen Zahlen, wie das Assoziativ- oder Distributivgesetz, für die Gleitkommazahlen nicht mehr. Die bei den einzelnen Operationen entstehenden unvermeidlichen Fehler müssen entsprechend berücksichtigt werden.

Die *Intervallarithmetik* ist ein Ansatz um die Unzulänglichkeiten der Gleitkommaarithmetik durch rigorose Einschließungen zu behandeln. Die Intervallarithmetik auf Basis der Gleitpunktarithmetik, wird z.B. in Rump [87, S. 27–29] und Tucker [94, S. 37–45] vorgestellt. Für einen tiefer gehenden thematischen Einstieg in die reelle und komplexe

---

<sup>1</sup>Die für die folgenden Implementierungen verwendete Intervalltoolbox INTLAB [84] stellt für die Umschaltung der gerichteten Rundung die Befehle `setround(-1)` für (3.1a) und `setround(+1)` für (3.1b) zur Verfügung. Mit der Identität, dass  $fl_{\nabla}(-r) = -fl_{\Delta}(r)$  für alle  $r \in \mathbb{R}$  gilt, ist effektiv nur eine gerichtete Rundung nötig, siehe Muller *et al.* [71, S. 467].

Intervallararithmetik stehen eine Vielzahl von empfehlenswerten Büchern und Zeitschriftenartikeln zur Verfügung. Zu diesen zählen Alefeld und Herzberger [33], Moore [69], Moore *et al.* [70], Neumaier [78, 79], Rump [83, 87] und Tucker [94].

Die in Abschnitt 2.2 vorgestellten reellen Intervalle  $[x] \in \mathbb{IR}$  werden zu reellen Intervallen mit Gleitkommaschranken:

$$[x] := [\underline{x}, \bar{x}] := \left\{ x \in \mathbb{R} : \underline{x} \leq x \leq \bar{x} \right\},$$

wobei  $\underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{F}$ . Mittels gerichteter Rundung (3.1) sind kleinstmögliche rigorose Einschließungen von reellen Zahlen  $r \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{F}$ , die also nicht als exakte Gleitkommazahlen darstellbar sind, durch  $[r] := [fl_{\nabla}(r), fl_{\Delta}(r)] = [\underline{r}, \bar{r}]$  gegeben.

Um diese Einschließungseigenschaft (Theorem 1) für die jeweiligen Operationen zu erfüllen, werden die entsprechenden Operationen der Gleitkommaarithmetik unter Verwendung von gerichteter Rundung (3.1) auf das Infimum und Supremum, bzw. auf den Mittelpunkt und Radius angewendet. Für eine detaillierte Ausformulierung der Operationen, siehe Rump [87, S. 24–25]. Eine einfache und für den Benutzer transparente Implementierung<sup>2</sup> der arithmetischen Operationen für Intervallgrößen ist besonders für objektorientierten Programmiersprachen mit überladbaren Operatoren geeignet.

Unter der Voraussetzung gerichteter Rundungen (3.1) gilt die Einschließungseigenschaft (Theorem 1) ebenfalls für die Matrix-Intervalloperationen und gleichermaßen auch für Intervallerweiterungen allgemeiner Funktionen, siehe Moore [69] und Moore *et al.* [70, Theorem 5.1].

## 3.2. Konkrete konische Optimierungsprobleme

In diesem Abschnitt werden lineare und semidefinite Optimierungsprobleme betrachtet, welche konische Optimierungsprobleme bezüglich der selbstdualen Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+^n$ , bzw.  $\mathcal{K} = \mathbb{S}_+^n$ , sind. Insbesondere werden die rigorosen Fehlerschranken für den optimalen Zielfunktionswert sowie die rigorosen Zertifikate der Unzulässigkeit diskutiert. Darüber hinausgehend werden die wichtigsten Implementierungen der im Zuge dieser Arbeit weiterentwickelten Software VSDP [43] vorgestellt. Eine kurze Einführung in die Benutzung von VSDP ist im Anhang A gegeben.

Für die von VSDP ebenfalls durchführbaren Berechnungen für konische Optimierungsprobleme bezüglich des selbstdualen Lorentz-Kegels  $\mathcal{K} = \mathbb{L}_+^n$  sei der Leser auf Jansson [37, S. 15–17] verwiesen.

### 3.2.1. Lineare Programme (LP)

Für den Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+^n$  wird aus (CP) ein *lineares Programm* in primaler Standardform

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & c^T x \\ \text{u.d.N.} \quad & Ax = b, \\ & x \in \mathbb{R}_+^n, \end{aligned} \tag{LP}$$

<sup>2</sup>Eine konkrete Implementierung ist z.B. in INTLAB [84] oder im Interval Package [31] gegeben.

wobei  $c \in \mathbb{R}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  und  $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ . Die zugehörige duale Standardform (DCP) hat die Gestalt

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & b^T y \\ \text{u.d.N.} & c - A^T y \in \mathbb{R}_+^n, \\ & y \in \mathbb{R}^m. \end{array} \quad (\text{DLP})$$

Für lineare Programme gilt bekanntermaßen ohne Voraussetzungen starke Dualität  $\hat{f}_p = \hat{f}_d$ . Aus Theorem 3 folgt direkt für eine approximative duale Lösung  $\tilde{y} \in \mathbb{R}^m$  und eine einfache Schranke  $\bar{x} \in \mathbb{R}_+^n$  die folgende untere Fehlerschranke:

$$\hat{f}_p = \hat{f}_d \geq b^T \tilde{y} + (\underline{d}^-)^T \bar{x} =: \underline{f}_p,$$

wobei  $\underline{d}_j^- \leq \min\{0, (c - A^T \tilde{y})_j\}$  für  $j = 1, \dots, n$ . Das folgende kurze INTLAB-Programm berechnet eine rigorose untere Fehlerschranke  $\underline{f}_p$ , wobei `f_low` :=  $\underline{f}_p$ , `yt` :=  $\tilde{y}$  und `xb` :=  $\bar{x}$ :

**Programm 3.1** Rigorose untere Fehlerschranke (LP).

```

1 function f_low = lower_error_bound_LP(A,b,c,yt,xb)
2   setround(-1);
3   d_low = min(0, c - A' * yt);
4   f_low = b' * yt + d_low' * xb;
5 end

```

Für die obere Fehlerschranke eines linearen Programms ergibt sich aus Theorem 4 mit einer approximativen Lösung  $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$  und einer einfachen Schranke  $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$ :

$$\hat{f}_p = \hat{f}_d \leq c^T \tilde{x}^+ + \bar{y}^T \bar{r} = \bar{f}_d,$$

wobei  $\tilde{x}_j^+ \geq \max(0, \tilde{x}_j)$  für  $j = 1, \dots, n$ . Auch diese Fehlerschranke kann durch das folgende kurze INTLAB-Programm realisiert werden, wobei `f_up` :=  $\bar{f}_d$ , `xt` :=  $\tilde{x}$  und `yb` :=  $\bar{y}$ :

**Programm 3.2** Rigorose obere Fehlerschranke (LP).

```

1 function f_up = upper_error_bound_LP(A,b,c,xt,yb)
2   x = max(0, xt);
3   setround(-1);
4   rn = abs(A*x - b);
5   setround(+1);
6   rp = abs(A*x - b);
7   r_up = max(rn, rp);
8   f_up = c' * x + yb' * r_up;
9 end

```

Die Prüfung der primalen Unzulässigkeit durch ein gegebenes rigoroses Zertifikat primaler Unzulässigkeit  $yt = \tilde{y}$  (Korollar 1) kann durch das folgende INTLAB-Programm mit boolescher Ausgabe<sup>3</sup> `tf` erfolgen:

---

**Programm 3.3** Zertifikat primaler Unzulässigkeit (LP).

---

```

1 function tf = is_primal_infeasible_LP(A,b,yt)
2     setround(-1);
3     lb = -A' * yt;
4     tf = ((b' * yt > 0) && all (lb >= 0));
5 end

```

---

Die Programme 3.1, 3.2 und 3.3 stellen eine grundsätzliche Implementierung dar, welche ohne größeren Mehraufwand auf beliebige Programmiersprachen, die gerichtete Rundungsumschaltung (3.1) unterstützten, adaptiert werden kann. Für VSDP wurden die Programme zusätzlich für Intervalleingabedaten angepasst<sup>4</sup>, sodass eine untere Schranke für alle Optimalwerte von Eingabedaten  $(A, b, c) \in ([A], [b], [c])$  innerhalb der jeweiligen Intervalle berechnet wird.

Für die Implementierung der Einschließung eines rigorosen Zertifikats dualer Unzulässigkeit (Algorithmus 2) ist die Verwendung von Gleitkommaarithmetik und gerichteter Rundung alleine nicht ausreichend. In Gleitkommaarithmetik können nur Approximationen der Zertifikate berechnet werden, welche die Gleichungsnebenbedingungen nur mit einer Toleranz erfüllen können. Rundungsfehler verstärken zusätzlich dieses Problem. Es stellt sich jedoch heraus, dass mithilfe der Intervallarithmetic ein rigoroses Zertifikat der Unzulässigkeit eingeschlossen werden kann, welches die duale Unzulässigkeit beweist.

Eine mögliche Realisierung in INTLAB [84] von Algorithmus 2 unter Verwendung von Algorithmus 3 ist folgendes Programm mit der Ausgabe einer Einschließung `xI`<sup>5</sup>:

---

**Programm 3.4** Zertifikat dualer Unzulässigkeit (LP).

---

```

1 function xI = is_dual_infeasible_LP(A,c,xt)
2     beta = c' * xt;
3     if (sup (beta) < 0)
4         m = size (A, 1);
5         b = [zeros(m,1); inf_(beta)];
6         xI = Algorithmus_3([A; c'], b, xt);
7         lb = inf_(xI);
8         if (all (lb >= 0))

```

---

<sup>3</sup>Die Ausgabe `tf = false` bedeutet nicht, dass das gegebene Problem primal zulässig ist. Nur die primale Unzulässigkeit konnte mit dem gegebenen Zertifikat `yt` nicht verifiziert werden.

<sup>4</sup>Die notwendigen Anpassung sind mit INTLAB [84] einfach zu realisieren. Um den Abstraktionsgrad der gelisteten Programme zu wahren, wurden diese Anpassung nicht miteinbezogen.

<sup>5</sup>Wie in Programm 3.3 bedeutet die Ausgabe `xI = NaN` nicht, dass das gegebene Problem dual zulässig ist. Ein rigoroses Zertifikat der dualen Unzulässigkeit konnte in diesem Fall nicht eingeschlossen werden.

```

9         return; % Success.
10     end
11 end
12 xI = NaN; % Warning: no inclusion found.
13 end

```

Die Berechnung von rigorosen Fehlerschranken für allgemeine lineare Programme, auch mit freien Variablen, werden ausführlich in Jansson [40] vorgestellt.

### 3.2.2. Semidefinite Programme (SDP)

Für den Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{S}_+^n$  wird aus (CP) ein *semidefinites Programm* in primaler Standardform

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimiere} && \langle C, X \rangle \\
 \text{u.d.N.} &&& \langle A_i, X \rangle = b_i, \quad i = 1, \dots, m, \\
 &&& X \in \mathbb{S}_+^n.
 \end{aligned} \tag{SDP}$$

wobei  $C, A_i \in \mathbb{S}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ , und  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist das Standardskalarprodukt (2.5) für symmetrische Matrizen. Mithilfe des *svec*-Operators (2.3), dem Skalierungsfaktor<sup>6</sup>  $\alpha = \sqrt{2}$  und

$$c = \text{svec}(C, \alpha), \quad x = \text{svec}(X, \alpha), \quad a_i = \text{svec}(A_i, \alpha),$$

kann das semidefinite Optimierungsproblem äquivalent geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimiere} && c^T x \\
 \text{u.d.N.} &&& Ax = b, \\
 &&& X = \text{smat}(x, 1/\alpha) \in \mathbb{S}_+^n.
 \end{aligned}$$

Häufig wird auch einfach  $x \in \mathbb{S}_+^n$  geschrieben. Die Zeilen der Matrix  $A$  sind durch  $a_i^T$  gegeben. Das Optimierungsproblem (SDP) entspricht somit (CP) für den Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{S}_+^n$ .

Das zugehörige duale Optimierungsproblem (DCP) hat die Gestalt

$$\begin{aligned}
 & \text{Maximiere} && b^T y \\
 \text{u.d.N.} &&& c - A^T y \in \mathbb{S}_+^n, \\
 &&& y \in \mathbb{R}^m,
 \end{aligned} \tag{DSDP}$$

wobei der Vektor  $c - A^T y$  wie oben als die Matrix  $C - \sum_{i=1}^m y_i A_i$  zu interpretieren ist, d.h.  $C - \sum_{i=1}^m y_i A_i = \text{smat}(c - A^T y, 1/\alpha)$ . In Matrix-Schreibweise erhält man daher

$$\begin{aligned}
 & \text{Maximiere} && b^T y \\
 \text{u.d.N.} &&& C - \sum_{i=1}^m y_i A_i \in \mathbb{S}_+^n, \\
 &&& y \in \mathbb{R}^m.
 \end{aligned}$$

<sup>6</sup>Für verifizierte Berechnungen ist die Wahl von  $\sqrt{2} \notin \mathbb{F}$  unvorteilhaft. Darum wird in VSDP für  $A$  und  $c$  der Faktor  $\alpha = 1$  und für  $x$  der Faktor  $\alpha = 2$  gewählt.

Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einer linearen Matrixungleichung (*engl.* linear matrix inequality (LMI)).

Theorem 3 liefert für das semidefinite Programm (SDP) die folgende untere Fehler-schranke:

**Korollar 2.** *Es sei die Primal Boundedness Qualification (PBQ, Definition 2) erfüllt, d.h. für den maximalen Eigenwert eines primal zulässigen Punktes  $X$  von (SDP) existiert eine obere Schranke  $\lambda_{\max}(X) \leq \bar{x} \in \mathbb{R}_+$ .*

*Für ein beliebiges  $\tilde{y} \in \mathbb{R}^m$  sei  $D = C - \sum_{i=1}^m \tilde{y}_i A_i$ ,  $\underline{d}^- \leq \min\{\lambda_{\min}(D), 0\}$  und  $D$  habe höchstens  $l$  negative Eigenwerte. Dann gilt:*

a) *Der primale optimale Zielfunktionswert ist von unten durch*

$$\hat{f}_p \geq b^T \tilde{y} + l \cdot \underline{d}^- \cdot \bar{x} =: \underline{f}_p \quad (3.2)$$

*beschränkt.*

b) *Wenn  $\underline{d}^- = 0$  dann ist  $\tilde{y}$  dual zulässig und es gilt  $\hat{f}_p \geq \underline{f}_p = b^T \tilde{y}$ . Wenn  $\tilde{y}$  zusätzlich optimal ist, gilt  $\hat{f}_p = \underline{f}_p$ .*

Für einen Beweis, siehe Jansson [37, S. 19]. Die PBQ-Bedingung ist deutlich schwächer als Slater-Bedingung (Theorem 2). Innere zulässige Punkte werden nicht vorausgesetzt. Daher ist es auch möglich schlecht gestellte Probleme zu verifizieren.

Die verifizierte Auswertung von (3.2) unter der Berücksichtigung aller Rundungsfehler erfordert die Berechnung einer rigorosen unteren Schranke für den kleinsten Eigenwert einer symmetrischen Matrix. Eine auf dem Satz von Gerschgorin basierende Methode wird in Floudas [25, S. 344–345] vorgestellt. Andere interessante Referenzen zur Bestimmung von Eigenwertschranken findet man bei Mayer [51, 52], Neumaier [77] und Rump [85, 86]. Weitere Eigenschaften von semidefiniten Programmen sind in den Textbüchern von Anjos und Lasserre [3], Boyd und Vandenberghe [9], Wolkowicz *et al.* [103] und dem Zeitschriftenartikel Vandenberghe und Boyd [98] zu finden.

In VSDP wurden die Größen  $l$  und  $\underline{d}^-$  mittels Weyl's Perturbations Theorem für symmetrische Matrizen bestimmt: Zu einer approximativen Eigenwertzerlegung  $\tilde{A} = \tilde{Q}^T \tilde{\Lambda} \tilde{Q}$  von  $A$  mit den Eigenwerten  $\tilde{\lambda}_i$  auf der Diagonalen der Matrix  $\tilde{\Lambda}$ , wird mittels gerichteter Rundung oder Intervallarithmetik die symmetrische Fehlermatrix  $E \geq |A - \tilde{A}|$  berechnet. Nach dem Theorem von Weyl gilt für jeden Eigenwert  $\lambda_i(A)$

$$|\lambda_i(A) - \tilde{\lambda}_i| \leq \|E\|_2. \quad (3.3)$$

Mit dem bekannten Zusammenhang  $\|E\|_2 \leq \sqrt{\|E\|_1 \|E\|_\infty}$  folgt für symmetrische Matrizen  $\|E\|_2 \leq \|E\|_\infty$  und es ergibt sich für alle Eigenwerte die Schranke

$$\tilde{\lambda}_i - \|E\|_\infty \leq \lambda_i(A) \leq \tilde{\lambda}_i + \|E\|_\infty$$

und die Größen  $\underline{d}^-$  und  $l$  können berechnet werden. Das folgende kurze INTLAB-Programm bestimmt diese Eigenwertschranken einer symmetrischen Intervallmatrix  $D$ ,

wobei `eig`, `mag` und `midrad` jeweils die MATLAB<sup>®</sup> und INTLAB Funktionen für die approximative Eigenwertzerlegung, die Magnitude (2.9c) und die Mittelpunkt-Radius Darstellung (2.10) eines Intervalls sind, vgl. Abschnitt 2.2.

---

**Programm 3.5** Rigorose Einschließung aller Eigenwerte einer symmetrischen Matrix.

---

```

1 function lambda = verify_eigsym (A)
2   [Q,L] = eig(full(mid(A)));
3   E = A - Q * intval(L) * Q';
4   r = mag(norm(E, inf));
5   lambda = midrad(diag(L), r);
6 end

```

---

Bei der approximativen Eigenwertzerlegung  $\tilde{A} = \tilde{Q}^T \tilde{\Lambda} \tilde{Q}$  bildet die Matrix  $\tilde{Q}$  nicht notwendigerweise eine Orthonormalbasis<sup>7</sup>, d.h. es gilt nicht notwendigerweise  $I = \tilde{Q}^T \tilde{Q}$ . Für die in dieser Arbeit behandelten Optimierungsprobleme wurden diesbezüglich keine numerischen Probleme festgestellt. In Miyajima *et al.* [68, S. 307] wird eine Fehlerabschätzung („Rump’s bound“) für (3.3) gegeben, die lediglich eine approximative Orthonormalbasis benötigt. Mit  $R = A\tilde{Q} - \tilde{Q}\tilde{\Lambda}$  und  $G = I - \tilde{Q}^T \tilde{Q}$  gilt

$$|\lambda_i(A) - \tilde{\lambda}_i| \leq \frac{\|R\|_2}{1 - \|G\|_2}.$$

Diese Schranke berücksichtigt Ergebnisse von Cao *et al.* [11], die eine Verbesserung von Davis *et al.* [21, S. 466–469] darstellen. Schlussendlich wird in Miyajima *et al.* [68, S. 307] die folgende Schranke für eine Implementierung z.B. in Programm 3.5 vorgeschlagen:

$$|\lambda_i(A) - \tilde{\lambda}_i| \leq \frac{\sqrt{\|R\|_1 \|R\|_\infty}}{1 - \|G\|_\infty}.$$

Die Berechnung einer rigorosen oberen Fehlerschranke für semidefinite Programme folgt aus dem Theorem 4.

**Korollar 3.** *Die Dual Boundedness Qualification (DBQ, Definition 3) wird vorausgesetzt, d.h. für einen dual zulässigen Vektor  $y$  von (DSDP) existieren elementweise obere Schranken  $|y_i| \leq \bar{y}_i$  für  $i = 1, \dots, m$ , welche auch Unendlich sein können.*

Sei  $\tilde{X} \in \mathbb{S}_+^n$  und sei

$$|\langle A_i, \tilde{X} \rangle - b_i| \leq \bar{r}_i \quad \text{für alle } i = 1, \dots, m.$$

Dann gilt:

a) *Der duale Zielfunktionswert ist von oben beschränkt:*

$$\hat{f}_d \leq \langle C, \tilde{X} \rangle + \bar{y}^T \bar{r} =: \bar{f}_d. \quad (3.4)$$

---

<sup>7</sup>Vielen Dank an Dr. Lange für den Hinweis. Siehe dazu Parlett [81, S. 253–260].

- b) Gilt  $\bar{r} = 0$ , dann ist  $\tilde{X}$  primal zulässig und  $\hat{f}_p \leq \bar{f}_d = \langle C, \tilde{X} \rangle$ . Ist  $\tilde{X}$  außerdem optimal, dann gilt  $\hat{f}_p = \bar{f}_d$ .

Allgemein berechnen Programme zur Lösung semidefiniter Optimierungsprobleme eine Approximation  $\tilde{X}$ , welche nicht notwendigerweise eine symmetrisch positiv semidefinite Matrix ist. Oft häufen sich in der Approximation  $\tilde{X}$  die Eigenwerte in der Nähe von Null. Um eine positiv semidefinite Approximation zu erhalten, wird eine elementweise rigorose untere Schranke  $\underline{x} \leq \{\lambda_{\min}(\tilde{X}), 0\}$  berechnet. Mit dieser Schranke folgt, dass  $\tilde{X} - \underline{x} \cdot I$  im Kegel  $\mathbb{S}_+^n$  liegt, also eine symmetrisch positiv semidefinite Matrix ist. Mit dieser Matrix kann Korollar 3 angewendet werden, d.h. die obere Schranke  $\bar{f}_d$  kann unter Verwendung von Intervallarithmetik oder gerichteter Rundung direkt berechnet werden.

Zum Abschluss dieses Abschnitts seien die notwendigen Änderungen an den Programme 3.1–3.4 für die Anwendung semidefiniter Optimierungsprobleme aufgelistet:

- Programm 3.1 (Zeile 3):

```
d_low = inf_ (verify_eigsym (c - A' * yt));
d_low = min (d_low) * sum (d_low < 0);
```

- Programm 3.2 (Zeile 2) Projektion der `svec`-Matrix `xt` in den Kegel  $\mathbb{S}_+^n$ :

```
x_low = min (inf_ (verify_eigsym (xt)), 0);
x      = smat (xt, 1/2) - diag (x_low);
x      = svec (x, 2);
```

- Programm 3.3 (Zeile 3): `lb = inf_ (verify_eigsym (-A' * yt));`

- Programm 3.4 (Zeile 7): `lb = inf_ (verify_eigsym (xI));`

Es sei wiederholt angemerkt, dass die Programme 3.1–3.4 und die gelisteten Modifikationen nur vereinfachte Implementierungen von VSDP darstellen. Die entsprechenden Funktionen in VSDP können Eingabedaten verarbeiten, die ein kartesisches Produkt<sup>8</sup> aus linearen und symmetrisch positiv semidefiniten Kegeln sind.

### 3.3. Numerische Resultate

Zur Sicherstellung der Funktionalität von VSDP wurden rigorose Fehlerschranken für insgesamt fünf geeignete Testbibliotheken von der bekannten Webseite von Mittelmann [66] berechnet. Aufgrund der Modellierung der einzelnen konischen Optimierungsprobleme dieser Testbibliotheken konnte nicht für alle Testfälle eine rigorose obere und untere Fehlerschranke ermittelt werden. Die Testbibliotheken SDPLIB, SPARSE-SDP und DIMACS werden in den Unterabschnitten 3.3.1 bis 3.3.3 genauer beschrieben. Die Testbibliotheken ESC und RDM beinhalten Modellierungen des Elektronenstrukturproblems. Aus diesem Grund werden diese beiden Testbibliotheken im nächsten Kapitel in

<sup>8</sup>Vgl. Abschnitt 2.4.

	System 1	System 2
	GNU Octave (4.4.1) [23]	MATLAB <sup>®</sup> (R2018b)
CPU:	Intel <sup>®</sup> Xeon <sup>®</sup> E3-1220 (4 Kerne)	Intel <sup>®</sup> Xeon <sup>®</sup> E5-2640v3 (8 Kerne)
RAM:	12 GB	128 GB
Betriebssystem:	Linux (openSUSE 15.0)	Linux (Ubuntu 18.04)
Intervallarithmetik:	INTLAB 11 [84]	INTLAB 11 [84]
Software zur Lösung konischer Optimierungs- probleme:	CSDP (6.2.0) [7] SDPA (7.3.8) [27, 106] SDPT3 (4.0) [91, 95] SeDuMi (1.32) [88]	MOSEK (8.1.0.62) [4] SDPT3 (4.0) [91, 95]

Tabelle 3.1.: Für die numerischen Berechnungen verwendete Hard- und Software.

den Unterabschnitten 4.4.1 und 4.4.2 nach einer theoretischen Einführung in die Problemmodellierung detaillierter betrachtet.

Alle für die Berechnungen genutzten Systeme und Computerprogramme sind in der Tabelle 3.1 aufgeführt. Das „System 1“ stellt zur Zeit der Erstellung dieser Arbeit bezüglich der Hardware ein durchschnittlich performantes System dar und arbeitet ausschließlich mit quelloffener Software. Dies stellt eine einfache Reproduzierbarkeit der numerischen Resultate sicher.

Aufgrund der großen Problemdimensionen der Testbibliotheken DIMACS, ESC und RDM reichen die Hardwareressourcen von „System 1“ nicht aus. Daher wurden die Berechnungen dieser drei Testbibliotheken auf dem leistungsfähigeren „System 2“ mit MATLAB<sup>®</sup> durchgeführt, weil insbesondere das Lösungsprogramm MOSEK keine Unterstützung für GNU Octave anbietet.

Für die folgenden Resultate berechnet die Größe

$$\mu(a, b) := \frac{a - b}{\max\{1.0, (|a| + |b|)/2\}} \quad (3.5)$$

die relative Genauigkeit.

Die Spalten in den Tabellen B.1 – B.5 im Anhang haben die folgende Bedeutung:

- $m$  und  $n$  sind jeweils die Anzahl der Nebenbedingungen und Variablen,
- $\underline{f}_p$  und  $\overline{f}_d$  sind die rigorosen unteren und oberen Fehlerschranken,
- $\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$  berechnet die relative Genauigkeit (3.5) der rigorosen Fehlerschranken,
- $t_s$  ist die Zeit in Sekunden für die approximative Lösung
- und  $\underline{t}/t_s$  und  $\overline{t}/t_s$  sind die Zeiten für die Berechnung der unteren und oberen Fehlerschranken relativ zur approximativen Lösung.

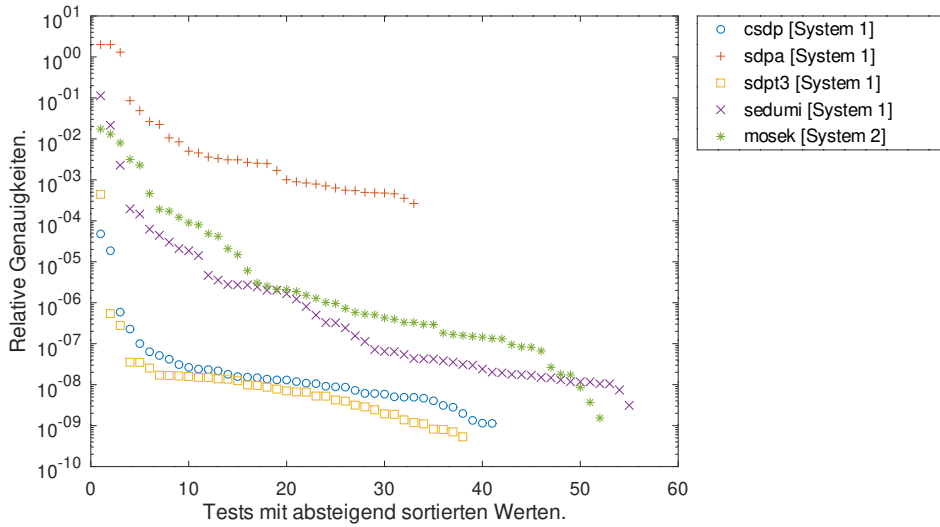


Abbildung 3.1.: Relative Genauigkeiten  $\mu(\overline{f_d}, \underline{f_p})$  für die SDPLIB-Bibliothek.

### 3.3.1. SDPLIB-Bibliothek

Die SDPLIB ist eine von Borchers [8] angelegte Sammlung von 92 semidefiniten Programmen, um verschiedene Lösungsprogramme auf Robustheit, Genauigkeit, sowie Geschwindigkeit zu testen. Die einzelnen Problemmodellierungen stammen aus Anwendungen der Mechanik, Systemtheorie, sowie Relaxationen kombinatorischer Optimierungsprobleme. Der größte Testfall `maxG60` hat 24 Millionen Variable und sieben Tausend Nebenbedingungen.

Eine Untersuchung von Freund *et al.* [26] ergab, dass 32 der gegebenen Probleme schlecht gestellt<sup>9</sup> sind und dass vier weitere `infd1`, `infd2`, `infp1` und `infp2` unzulässig sind. Die 32 schlecht gestellten Probleme besitzen keine Lösung im relativen Inneren des primalen Kegels und verletzen somit die Slater-Bedingung (Theorem 2). Dies betrifft 13 `gpp`-, 13 `hinf`- (bis auf `hinf2` und `hinf9`) und 6 `qap`-Probleme. Aus diesem Grund kann VSDP lediglich für 56 der 92 gegebenen Problemstellungen obere und untere Fehlerschranken bestimmen, wenn wie in diesem Fall a priori keine Schranken  $\bar{y}$  gegeben sind, vgl. Theorem 4.

Die Abbildung 3.1 zeigt, dass VSDP mit dem approximativen Löser SeDuMi 55 der 56 möglichen Probleme rigoros einschließen konnte<sup>10</sup>. Mit MOSEK gelang dies für 52 Problemstellungen. Die mit CSDP und SDPT3 berechneten Fehlerschranken wiesen die kleinsten relativen Genauigkeiten besser als  $10^{-7}$  für fast 40 Probleme auf.

Aus der Abbildung 3.2 ist ersichtlich, dass mit der Ausnahme von SDPA die Berechnung einer rigorosen unteren Fehlerschranke unabhängig vom Erfolg im schlimmsten

<sup>9</sup> engl. ill-posed.

<sup>10</sup> Lediglich für das Problem `ss30` konnte mit keinem in dieser Arbeit verwendeten Lösungsprogramm eine rigorose obere Schranke berechnet werden.

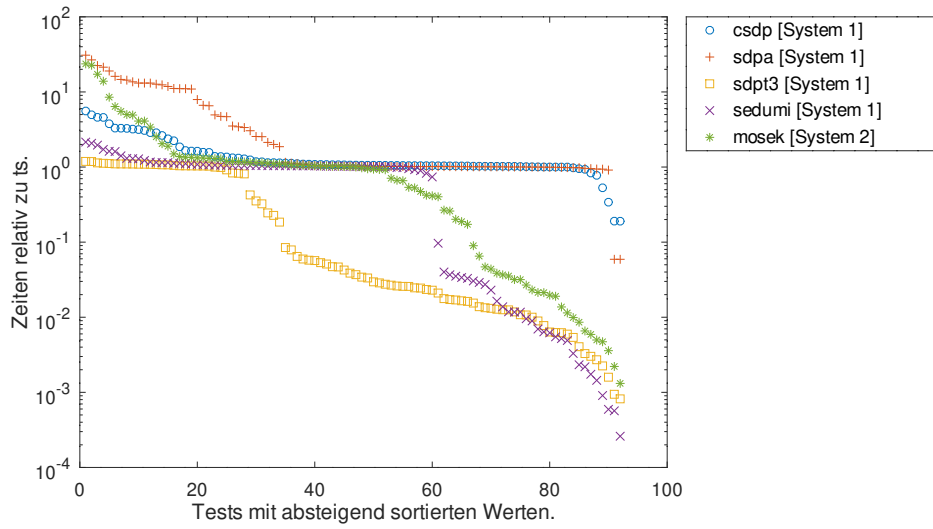


Abbildung 3.2.: Zeiten für die Berechnung der unteren Fehlerschranke  $\bar{t}$  der SDPLIB-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

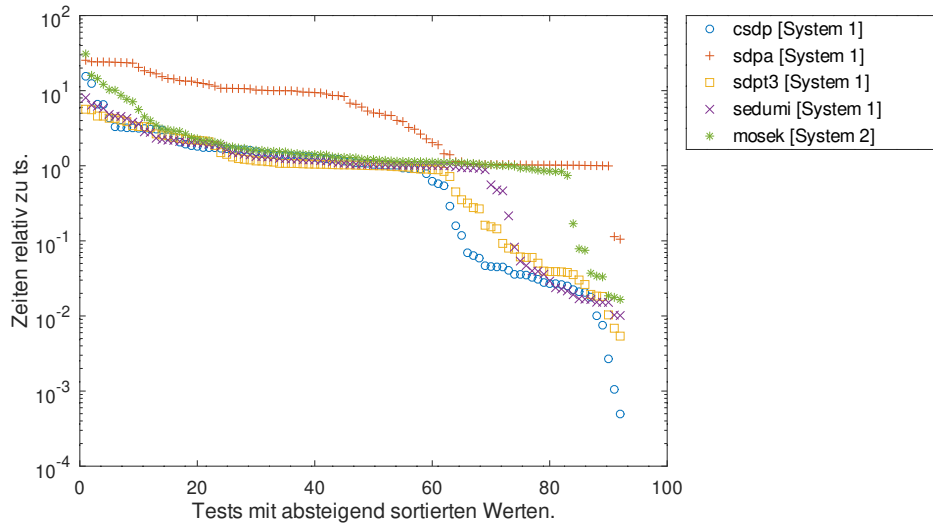


Abbildung 3.3.: Zeiten für die Berechnung der oberen Fehlerschranke  $\bar{t}$  der SDPLIB-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

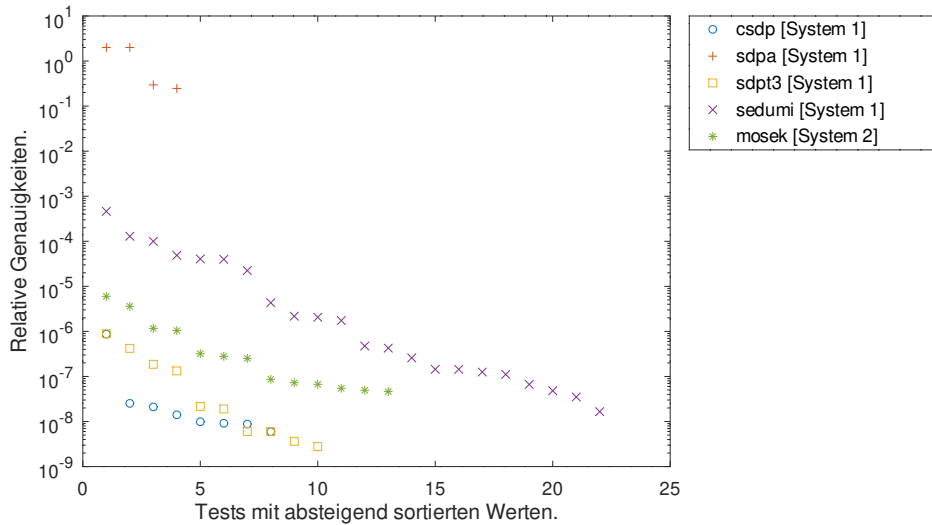


Abbildung 3.4.: Relative Genauigkeiten  $\mu(\overline{f_d}, \underline{f_p})$  für die SPARSE-SDP-Bibliothek.

Fall genau so viel Zeit in Anspruch nimmt, wie die approximative Lösung. SDPT3 und MOSEK benötigten für die Hälfte der Probleme sogar nur ein Hundertstel der approximativen Lösungszeit. Ähnliche Beobachtungen können für die rigorose obere Fehler-schranke in Abbildung 3.3 gemacht werden. In diesem Fall waren die Berechnungen mit CSDP und MOSEK am schnellsten.

Detaillierte Lösungen der SDPLIB-Bibliothek sind in den Tabellen B.1 und B.2 im Anhang dieser Arbeit zu finden.

### 3.3.2. SPARSE-SDP-Bibliothek

Eine der SDPLIB sehr ähnliche Sammlung von 26 semidefiniten Programmen ist auf der Webseite von Kočvara<sup>11</sup> zu finden. Auch in dieser Sammlung stammen die gegebenen Optimierungsprobleme aus Anwendungen der Mechanik (Material- und Strukturoptimierung). Genauere Informationen zur Modellierung sind in [6, 44, 111] zu finden. Die größten Testfälle dieser Bibliothek sind `shmup5` mit 13 Millionen Variablen und 1800 Nebenbedingungen und `mater-6` mit mehr als 300 Tausend Variablen und 20 Tausend Nebenbedingungen.

Nicht alle Probleme der SPARSE-SDP-Bibliothek konnten mithilfe von VSDP rigoros eingeschlossen werden. Die Berechnungen mit CSDP brachen für die Probleme `trto4`, `trto5` und `vibra5` gänzlich ab. Gleiches bei SDPT3 für `mater-3`, `mater-4`, `mater-5` und `mater-6`. Mit dem approximativen Lösungsprogramm SeDuMi gelang dies in 22 von 26 Fällen mit einer relativen Genauigkeit von durchschnittlich  $10^{-5}$ , wie die Abbildung 3.4 zeigt. Genauere, jedoch von der Anzahl her weniger rigorose Fehlerschranken konnten mit CSDP und SDPT3 berechnet werden.

<sup>11</sup><http://web.mat.bham.ac.uk/kocvara/pennon/problems.html>

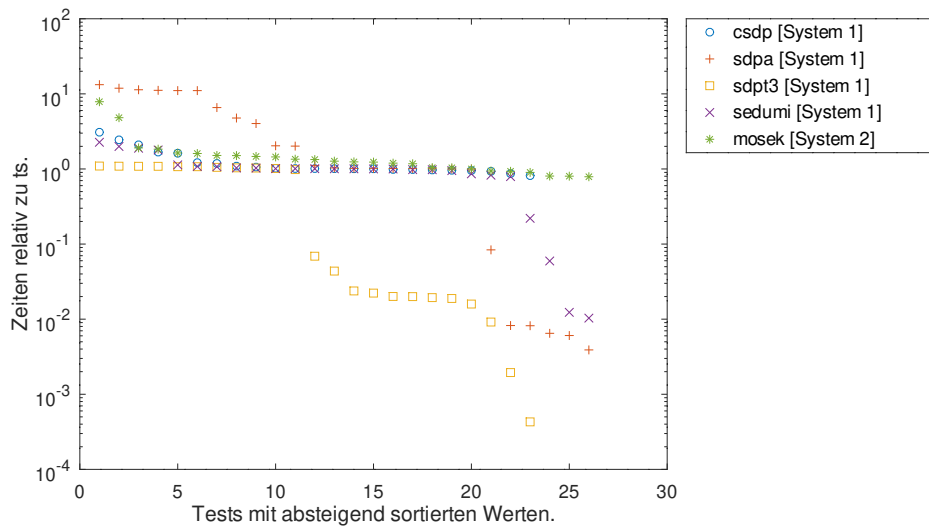


Abbildung 3.5.: Zeiten für die Berechnung der unteren Fehlerschranke  $\underline{t}$  der SPARSE-SDP-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

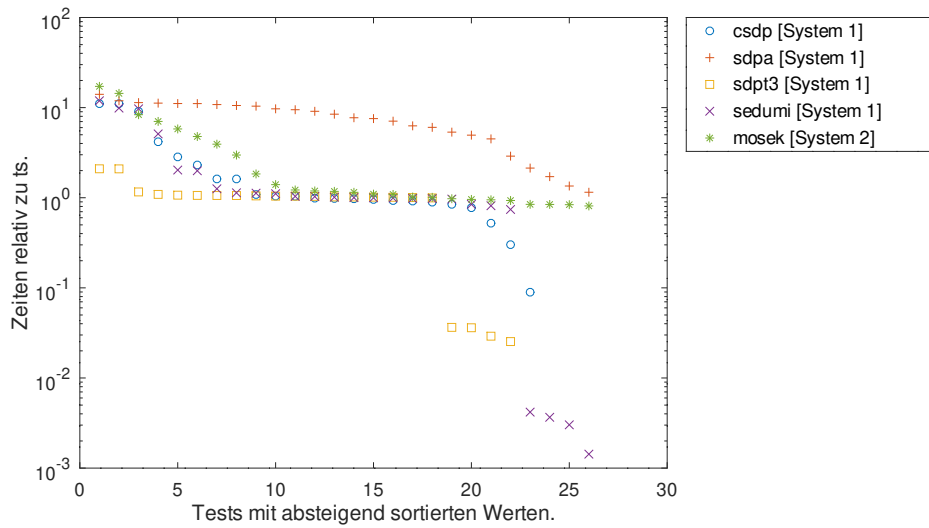


Abbildung 3.6.: Zeiten für die Berechnung der oberen Fehlerschranke  $\bar{t}$  der SPARSE-SDP-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

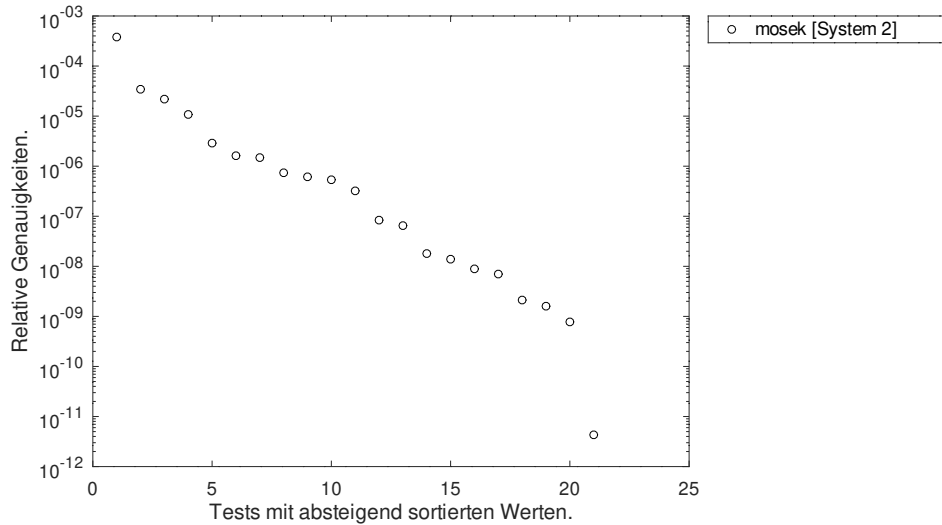


Abbildung 3.7.: Relative Genauigkeiten  $\mu(\overline{f_d}, \underline{f_p})$  für die DIMACS-Bibliothek.

Für die Berechnungszeiten der rigorosen Fehlerschranken relativ zur approximativen Lösung können in den Abbildungen 3.5 und 3.6 analoge Beobachtungen zur SDPLIB-Bibliothek gemacht werden. Der Aufwand entspricht im schlimmsten Fall in etwa dem der approximativen Lösung.

Detaillierte Lösungen der SPARSE-SDP-Bibliothek sind in den Tabellen B.3 und B.4 im Anhang dieser Arbeit zu finden.

### 3.3.3. DIMACS-Bibliothek

Die DIMACS<sup>12</sup>-Bibliothek ist eine Sammlung von 50 linearen, quadratischen und semi-definiten Programmen, die von Pataki und Schmieta [82] anlässlich eines Programmierwettbewerbs selbiger Organisation angelegt wurde.

Aufgrund der Problemdimensionen wurde diese Bibliothek lediglich mit MOSEK auf System2 berechnet. Das größte Problem `fap25` mit sechs Millionen Variablen und vier Millionen Nebenbedingungen konnte zwar von MOSEK approximativ gelöst werden, jedoch konnten keine rigorosen Fehlerschranken berechnet werden. Lediglich die Hälfte der Probleme konnte von VSDP mithilfe von MOSEK rigorose mit einer relativen Genauigkeit von durchschnittlich  $10^{-7}$  eingeschlossen werden, wie die Abbildung 3.7 zeigt.

Die Abbildungen 3.8 und 3.9 zeigen, dass im Fall von numerischen Problemen die Zeiten für die Berechnung der rigorosen Fehlerschranken durch viele erfolglose Nachiterationen auf ein vielfaches der Zeit der approximativen Lösung ansteigen können. Standardmäßig erlaubt VSDP zehn Nachiterationen. Dieser Wert kann jedoch angepasst werden.

<sup>12</sup>DIMACS: Center for Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science.

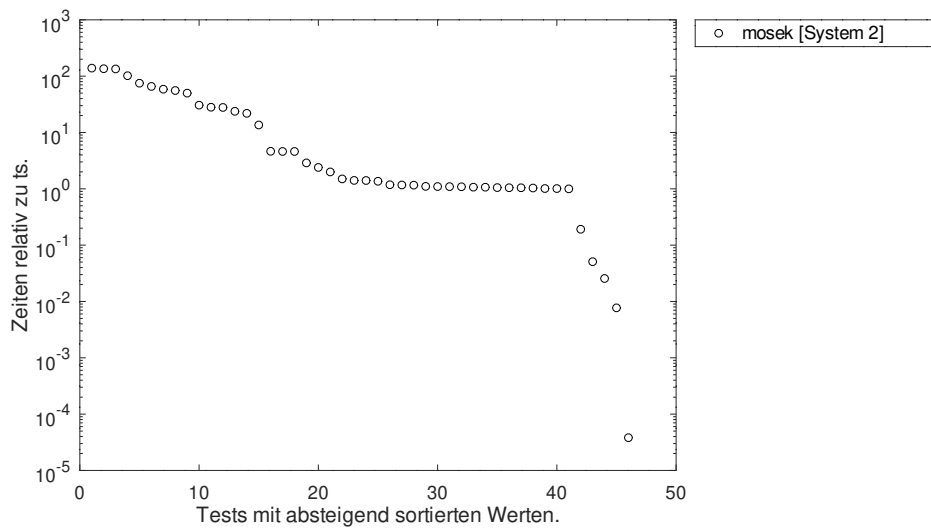


Abbildung 3.8.: Zeiten für die Berechnung der unteren Fehlerschranke  $\underline{t}$  der DIMACS-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

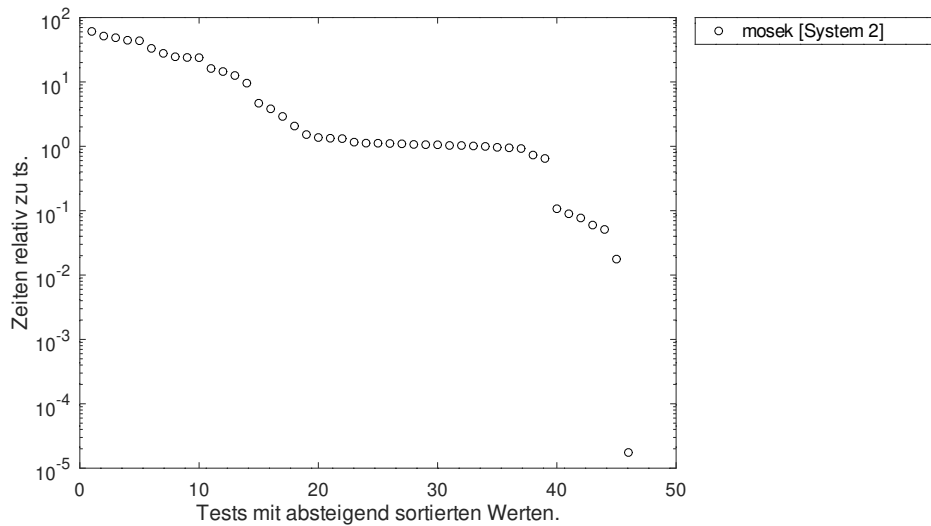


Abbildung 3.9.: Zeiten für die Berechnung der oberen Fehlerschranke  $\bar{t}$  der DIMACS-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

Detaillierte Lösungen der DIMACS-Bibliothek sind in der Tabelle [B.5](#) im Anhang dieser Arbeit zu finden.

## 4. Anwendungen in der Quantenchemie

### 4.1. Berechnung der Grundzustandsenergie von Molekülen

In diesem Abschnitt wird ein kurzer Überblick über die theoretischen und mathematischen Grundlagen des Elektronenstrukturproblems gegeben. Mithilfe dieser Grundlagen kann ein numerischer Ansatz zur Berechnung der Grundzustandsenergie von Molekülen formuliert werden.

#### 4.1.1. Quantenmechanische Grundlagen

Allgemein besteht ein Molekül aus Elektronen und Atomkernen, die jeweils eine kinetische Energie besitzen. Zwischen den Elektronen und Atomkernen wirken anziehende Coulomb-Kräfte. Da gleiche Ladungen sich abstoßen, wirken zwischen den Elektronen untereinander abstoßende Kräfte. Ebenso wirken zwischen den Atomkernen abstoßende Kräfte.

In der Quantenchemie wird häufig für praktische Molekülberechnungen die *Born-Oppenheimer-Approximation* verwendet. Diese Approximation beruht auf der Beobachtung, dass Atomkerne viel schwerer und langsamer als Elektronen sind. Die Abstoßung der Atomkerne untereinander wird als konstant angesehen und deren kinetischen Energie vernachlässigt. Die Born-Oppenheimer-Approximation betrachtet lediglich die Energie von  $N$  Elektronen in einem Feld von  $M$  unbeweglichen punktförmigen Atomkernen. Zusätzlich werden nur Ein- und Zwei-Elektronen-Interaktionen berücksichtigt. Alle kinetischen und potentiellen Energien der Elektronen eines Moleküls werden durch einen hermiteschen Differentialoperator beschrieben, den Born-Oppenheimer Hamiltonoperator, im Folgenden nur *Hamiltonoperator* genannt

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^M \frac{Z_m}{r_{im}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (4.1)$$

Mit dem Laplace-Operator  $\nabla_i^2$  bezüglich der Ortskoordinaten repräsentiert der erste Term die kinetische Energie des  $i$ -ten Elektrons. Die Coulomb-Anziehung zwischen Elektronen und Atomkernen ist durch den zweiten Term gegeben, wobei  $Z_m$  die Ordnungszahl des  $m$ -ten Atomkerns ist und  $r_{im}$  der Abstand des  $i$ -ten Elektrons zum  $m$ -ten Atomkern. Durch den dritten Term wird die Abstoßung der Elektronen untereinander beschrieben, wobei die Größe  $r_{ij}$  der Abstand zwischen den Elektronen  $i$  und  $j$  ist.

An dieser Stelle sei noch einmal angemerkt, dass der Hamiltonoperator (4.1) nur von den Ortskoordinaten der Elektronen abhängt. Wie in Szabo und Ostlund [89, S. 39–53]

beschrieben, sind für eine vollständige Beschreibung eines Elektrons zwei Erweiterungen vonnöten. Die erste ist die Einführung einer Spin-Koordinate. Somit beschreibt die Variable  $\mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, \omega_i)$  die vier Freiheitsgrade des  $i$ -ten Elektrons, wobei  $\mathbf{r}_i$  drei Ortskoordinaten sind und  $\omega_i$  ist die Spinkoordinate mit  $i = 1, \dots, N$ . Als zweite Erweiterung wird im Folgenden eine weitere Bedingung, das Pauli-Prinzip, eingeführt.

Die niedrigste Energie, d.h. die *Grundzustandsenergie*  $E_0$ , eines  $N$ -Elektronen-Moleküls ist der kleinste Eigenwert der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = E\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (4.2)$$

mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$ . Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist eine Eigenwertgleichung in welcher die Eigenwerte  $E$  die Energieniveaus der Moleküle darstellen. Die komplexwertige Funktion  $\Psi$  ist die zum Molekül zugehörige  $N$ -Elektronen-Wellenfunktion und ist ein Element des linearen Raums der quadratintegrierbaren Funktionen  $L^2\left(\left(\mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\}\right)^N\right)$ .

Die Quantenmechanik ist eine stochastische Theorie in welcher die Wellenfunktion  $\Psi$  eines  $N$ -Elektronen-Moleküls eine Wahrscheinlichkeitsverteilung aller Elektronen auf den möglichen Raum- und Spinkoordinaten definiert. Für eine normierte Wellenfunktion  $\Psi$  mit

$$\int \Psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N = 1, \quad (4.3)$$

besagt die *Bornsche Regel*, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte gleich dem Betragsquadrat der normierten Wellenfunktion ist. Somit ist die Wahrscheinlichkeit das  $i$ -te Elektron in dem Volumenelement  $d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N = d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N$  zu finden gleich

$$\Psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N. \quad (4.4)$$

Eine nur mit Ortskoordinaten vereinfachte schematische Darstellung ist in Abbildung 4.1 gegeben.

Auf dem Raum der quadratischen Wellenfunktion ist das Skalarprodukt

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N,$$

definiert. Die Norm einer Wellenfunktion ist dann

$$\|\Phi\| = \langle \Phi | \Phi \rangle.$$

Für die Beschreibung quantenmechanischer Zusammenhänge ist die Verwendung der *Dirac-Notation* von Vorteil. In dieser Notation ist

$$|\Psi\rangle = \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$$

ein „Ket“-Vektor, welcher als Spaltenvektor mit kontinuierlichen Indizes angesehen werden kann. Der Zeilenvektor

$$\langle \Phi | = \Phi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N),$$

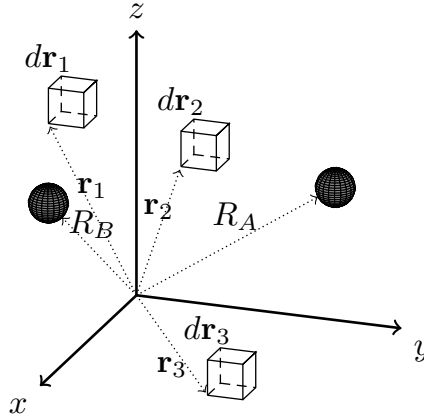


Abbildung 4.1.: Durch (4.4) wird dem schematisch abgebildeten Zustand eine Wahrscheinlichkeit zugeordnet, dass sich in einem Feld von zwei unbeweglichen punktförmigen Atomkernen an den Orten  $R_A$  und  $R_B$  das Elektron  $i$  an dem Ort  $\mathbf{r}_i$  im Volumenelement  $d\mathbf{r}_i$  befindet für  $i = 1, 2, 3$ .

beschreibt den zugeordneten komplex konjugierten „Bra“-Vektor.

Elektronen sind identische Teilchen. Sie können nicht voneinander unterschieden werden, da diese exakt die gleichen statischen Eigenschaften haben. Daher müssen zwei Elektronenkonfigurationen, die sich lediglich durch den Austausch zweier Elektronen unterscheiden, als gleiche physikalische Konfigurationen angesehen werden. Die Normalisierungsbedingung (4.3) impliziert bei einem Austausch zweier Elektronen, dass sich die zugehörige normierte Wellenfunktion nur um einen globalen Phasenfaktor  $z \in \mathbb{C}$  mit dem Betrag Eins ändern kann:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N) = z\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (4.5)$$

Beim wiederholten Austausch von  $\mathbf{x}_i$  und  $\mathbf{x}_j$  gilt  $z^2 = 1$ , so dass  $z = \pm 1$ . Daher ist die normierte Wellenfunktion eines Systems identischer Teilchen bezüglich des Austausches zweier dieser identischer Teilchen entweder symmetrisch, wenn  $z = 1$  ist, oder antisymmetrisch, wenn  $z = -1$  ist. Teilchen mit symmetrischer Wellenfunktion sind *Bosonen* und Teilchen mit antisymmetrischer Wellenfunktionen sind *Fermionen*. Elektronen sind Fermionen. Daher muss für ein  $N$ -Elektronen-Molekül die Schrödinger-Gleichung (4.2) in einem Unterraum des  $L^2((\mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\})^N)$  gelöst werden, der ausschließlich aus antisymmetrischen Wellenfunktionen besteht. Für  $z = -1$  folgt aus (4.5) das bekannte *Pauli-Prinzip* welches besagt, dass zwei Fermionen nicht gleichzeitig das gleiche Raumorbital bei gleichem Spin besetzen können. Dies sieht man wie folgt. Sei  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ . Somit gilt nach (4.5)

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) = -\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) \implies \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) = 0.$$

Die Quantenmechanik postuliert für ein Molekül mit normierter Wellenfunktion  $\Psi$  und hermiteschen Hamiltonoperator  $\hat{H}$  den Energieerwartungswert

$$E[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle.$$

Aus der Minimierung des Funktionals  $E[\Psi]$  bezüglich aller normierten antisymmetrischen  $N$ -Elektronen Wellenfunktion  $\Psi$  resultiert der Grundzustand  $\Psi_0$  mit der Grundzustandsenergie  $E[\Psi_0] = E_0$

$$E_0 = \min_{\Psi} E[\Psi], \quad \Psi \in L^2((\mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\})^N) \text{ antisymmetrisch.} \quad (4.6)$$

Seit den Anfängen in den 1950er Jahren wurden hoch genaue Lösungsverfahren entwickelt, welche nicht direkt die Wellenfunktion  $\Psi$  nutzen, sondern reduzierte Dichtematrizen<sup>1</sup> (RDM). Die *reduzierte Dichtematrix*  $p$ -ter Ordnung ( $p$ -RDM) der normierten Wellenfunktion eines  $N$ -Elektronen-Moleküls wird durch die Berechnung der Spur bezüglich der verbleibenden  $N - p$  Elektronen aus dem Produkt  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  bestimmt

$$\begin{aligned} \Gamma^p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p; \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_p) &= C_N^p \int \Psi^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p, \mathbf{x}_{p+1}, \dots, \mathbf{x}_N) \\ &\times \Psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_p, \mathbf{x}_{p+1}, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_{p+1} \cdots \mathbf{x}_N, \end{aligned} \quad (4.7)$$

wobei  $C_N^p = \binom{N}{p}$  der Binomialkoeffizient ist. Integriert wird über die Orts- und Spinkoordinaten.

Ein Extremfall ist für  $p = 1$  die reduzierte Dichtematrix erster Ordnung (1-RDM). Wie bereits erwähnt, ist die Wellenfunktion die Wahrscheinlichkeitsverteilung, jeweils ein Elektron in einem bestimmten Volumenelement zu finden. Um die Wahrscheinlichkeit zu berechnen, dass sich ein Elektron in einem Volumenelement bei der Spinkoordinate  $\mathbf{x}_1$  befindet, muss über die Koordinaten der verbleibenden  $N - 1$  Elektronen integriert werden

$$\rho(\mathbf{x}_1) = N \int \Psi^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_2 \cdots \mathbf{x}_N.$$

Die Funktion  $\rho(\mathbf{x}_1)$  ist die reduzierte Dichtefunktion eines einzelnen Elektrons. Weil  $\Psi$  normiert ist, ergibt das Integral  $\int \rho(\mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_1$  die Gesamtanzahl an Elektronen  $N$ . Die 1-RDM ist nach (4.7) eine Matrix mit zwei kontinuierlichen Indizes, definiert durch

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= \Gamma^1(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) = N \int \Psi^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \\ &\times \Psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_2 \cdots \mathbf{x}_N. \end{aligned}$$

Diese Matrix hat die schöne Eigenschaft, dass ihre Diagonalelemente die reduzierten Dichtefunktionen  $\rho(\mathbf{x}_1) = \gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1)$  bilden.

Ein weiterer Extremfall ist für  $p = N$  die volle Dichtematrix  $\Gamma^N$ . Aus der Kommutativität des Spur-Operators folgt

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \text{Spur}(\hat{H} | \Psi \rangle \langle \Psi |) = \text{Spur}(\hat{H} \Gamma^N) = \langle \hat{H}, \Gamma^N \rangle,$$

wobei der letzte Term die Kurzform für das Skalarprodukt im Raum der hermiteschen Operatoren ist. Somit kann das Minimierungsproblem (4.6) mittels der vollen Dichtematrix ausgedrückt werden

$$E_0 = \min_{\Gamma^N} E[\Gamma^N] = \min_{\Gamma^N} \langle \hat{H}, \Gamma^N \rangle, \quad (4.8)$$

---

<sup>1</sup> engl. reduced density matrix.

wobei die volle Dichtematrix  $\Gamma^N$  zu einer normierten antisymmetrischen Wellenfunktion korrespondiert. Mit der Definition  $\Gamma := \Gamma^2$  lautet die reduzierte Dichtefunktion zweiter Ordnung (2-RDM)

$$\Gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) = N(N-1) \int \Psi^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_N) \\ \times \Psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_3 \cdots \mathbf{x}_N.$$

Durch die Born-Oppenheimer-Approximation eines  $N$ -Elektronen-Systems, die nur die Ein- und Zwei-Elektronen-Interaktionen berücksichtigt, wird der Hamiltonoperator (4.1) als Summe von Ein- und Zwei-Teilchen-Operatoren hergeleitet:

$$\langle \hat{H}, \Gamma^N \rangle = \langle \hat{H}_1, \gamma \rangle + \langle \hat{H}_2, \Gamma \rangle, \quad (4.9)$$

wobei  $\hat{H}_1$  und  $\hat{H}_2$  die zugehörigen Ein- und Zwei-Teilchen Anteile des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  sind und  $\gamma$  und  $\Gamma$  jeweils die reduzierten Dichtematrizen erster und zweiter Ordnung.

Die Born-Oppenheimer-Approximation reduziert die Suche nach der Grundzustandsenergie eines  $N$ -Elektronen-Systems zu der Suche nach einer reduzierten Dichtematrix zweiter Ordnung, welche den kleinsten Energieerwartungswert liefert. Dieses Problem wird von Coleman [17] als „Coulson’s Challenge“ bezeichnet. Unglücklicherweise sind keine hinreichenden Bedingungen für eine Funktion von vier Argumenten bekannt, welche von einer antisymmetrischen  $N$ -Elektronen-Wellenfunktion auf eine solche reduzierten Dichtematrix zweiter Ordnung schließen lassen. Lediglich notwendige Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit sind bekannt. Aus diesem Grund liefert die Methode mit den reduzierten Dichtematrizen zweiter Ordnung lediglich eine untere Schranke der Grundzustandsenergie. Die Qualität dieser Schranke hängt davon ab, wie gut die Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit die ursprüngliche Elektronenstruktur beschreiben.

Deza und Laurent [22] zeigten, dass die Suche nach Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit für die Diagonalelemente einer 2-RDM äquivalent zu der Berechnung aller Facetten eines Polytop-Schnittes ist. Letzteres ist ein bekanntes NP-Schweres Problem. Auch Liu, Christandl und Verstraete [48] bewiesen, dass die Entscheidung, ob eine gegebene 2-RDM  $N$ -darstellbar ist oder nicht, ebenfalls NP-Schwer ist.

Bis jetzt ist das Minimierungsproblem (4.8) mit der Zielfunktion (4.9) ein kontinuierliches Problem. Für die computergestützte Lösung ist eine Diskretisierung erforderlich. Es zeigt sich, dass die benötigte Wellenfunktion aus speziellen Produkten der Wellenfunktionen einzelner Elektronen-Spinorbitale zusammengesetzt werden kann.

Jedes einzelne Elektron erfüllt eine zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Es kann gezeigt werden, dass eine vollständig orthogonale Menge von Wellenfunktionen (die Orbitale  $\{\psi_l(\mathbf{x})\}$ ) existiert, wobei

$$\psi_l: \mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\} \rightarrow \mathbb{C}, \quad l = 1, \dots, N.$$

Jede Lösung dieser Schrödinger-Gleichung kann als eine Superposition von diesen Orbitalen ausgedrückt werden

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^{\infty} c_l \psi_l(\mathbf{x}).$$

Auf den ersten Blick erscheint es einleuchtend die N-Elektronen-Wellenfunktion als Produkt einzelner Elektronen-Spinorbitale zu beschreiben. Bei diesem Produkt ist die Wahrscheinlichkeit ein beliebiges Elektron in einem bestimmten Volumenelement zu finden gleich dem Produkt der entsprechenden Wahrscheinlichkeiten aller einzelnen Elektronen. Dies bedeutet, dass die Elektronen unabhängig voneinander sind. Es gibt keine Korrelation oder Interaktion zwischen den Elektronen. Ebenso ist die Wellenfunktion nicht antisymmetrisch. Aber es stellt sich heraus, dass antisymmetrische Wellenfunktionen eines N-Elektronen-Moleküls durch die N-Elektronen-Slater-Determinante modelliert werden kann

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_1) & \dots & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_1) \\ \psi_{i_1}(\mathbf{x}_2) & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{i_1}(\mathbf{x}_N) & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_N) & \dots & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (4.10)$$

In der ersten Zeile dieser Determinante sind die  $N$  Spinorbitale  $\psi_{i_1}, \psi_{i_2}, \dots, \psi_{i_N}$ . Es ist nicht festgelegt, welches Elektron sich auf welchem Orbital befindet. Gleiches gilt für die verbleibenden Zeilen. Die Vertauschung zweier Zeilen entspricht der Vertauschung zweier Elektronen und ändert das Vorzeichen der Determinante. Demnach sind die mit der Slater-Determinante gebildeten Funktionen  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$  antisymmetrisch.

Da die Schrödinger-Gleichung linear ist, sind die Wellenfunktionen (4.10) Superpositionen

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{i_1, \dots, i_N} c_{i_1, \dots, i_N} \psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_{i_N}(\mathbf{x}_N), \quad (4.11)$$

wobei die Indizes  $i_j$  Werte von 1 bis  $N$  annehmen.

#### 4.1.2. Die Bedingungen der N-Darstellbarkeit

Das Variationsprinzip (4.6) erfordert die Suche nach der besten antisymmetrischen Wellenfunktion  $\Psi_0$  mit dem kleinsten Energieeigenwert  $E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle$ . Eine approximative obere Schranken dieses Minimums kann durch die systematische heuristische Auswahl von Ein-Elektronen-Orbitalen gefunden werden. Dieser Ansatz wird Hartree-Fock-Approximation genannt und wird z.B. in Szabo und Ostlund [89, S. 108–230] und Helgaker *et al.* [32, S. 167–176, 433–506] ausführlich beschrieben.

Im Folgenden werden die Funktionen (4.11) für die Bestimmung des kleinsten Energiewertes genutzt. Das Ausgangsproblem wird durch die Beschränkung auf Indizes  $i$  mit Werten zwischen 1 und einem gegebenen endlichen Wert  $r$  nochmals diskretisiert. Dies ist eine weitere Approximation und ermöglicht den Wechsel zu diskreten endlichen Repräsentationen der reduzierten Dichtematrizen erster und zweiter Ordnung bezüglich der Orthonormalbasis  $\{\psi_i\}$ . Die zugehörigen Dichtematrizen werden mit  $\gamma(i, i')$  und  $\Gamma(i, j; i', j')$  bezeichnet. Im Fall von  $\gamma(i, i')$  werden die zugehörigen einzelnen Matrixelemente durch die Multiplikation von links und rechts mit der Ein-Elektronen-Wellenfunktion  $\{\psi_i\}$  bestimmt. Somit ist das Matrixelement

$$\gamma(i, i') = \langle \psi_i | \gamma | \psi_{i'} \rangle = \int \psi_i^*(\mathbf{x}_1) \gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \psi_{i'}(\mathbf{x}'_1) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}'_1.$$

Umgekehrt wird aufgrund der Orthogonalität der Wellenfunktionen  $\{\psi_i\}$  diese aus den einzelnen Matrix-Elementen zurückgewonnen

$$\gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) = \sum_{i,i'} \psi_i(\mathbf{x}_1) \gamma(i, i') \psi_{i'}^*(\mathbf{x}'_1).$$

Die reduzierte Dichtematrix zweiter Ordnung  $\Gamma(i, j; i', j')$  ist analog definiert. Dies gilt auch für die Matrizen  $H_1$  und  $H_2$ , die jeweils mit den Operatoren  $\hat{H}_1$  und  $\hat{H}_2$  korrespondieren. Die Antisymmetrie der ursprünglichen  $N$ -Elektronen-Wellenfunktion  $\Psi$  erfordert ebenfalls von  $\Gamma$  einen Vorzeichenwechsel, wenn Indizes mit oder ohne Hochkomma getauscht werden. Es gilt

$$\Gamma(i, j; i', j') = -\Gamma(j, i; i', j') = -\Gamma(i, j; j', i'). \quad (4.12)$$

Des Weiteren wird wie in Zhao *et al.* [110] gefordert, dass alle Elemente der reduzierten Dichtematrix erster und zweiter Ordnung bezüglich der gewählten Basis reell sind. Somit ist das Problem (4.9) reell und weil Dichtematrizen per Definition hermitesch sind, sind beide Matrizen  $\gamma$  und  $\Gamma$  reelle und symmetrische Matrizen. Schlussendlich wird mit der Anwendung der Born-Oppenheimer-Approximation aus (4.9) ein endliches diskretes semidefinites Programm mit der reellen Zielfunktion

$$\langle H, \Gamma^N \rangle = \langle H_1, \gamma \rangle + \langle H_2, \Gamma \rangle, \quad (4.13)$$

unter den folgenden Nebenbedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit formuliert.

Dieses Minimierungsproblem nutzt intrinsisch das Konzept der Slater-Determinante. Es gibt noch einen weiteren Formalismus, die „zweite Quantisierung“, der große Anwendung in der Quantenphysik findet. Der Vollständigkeit halber wird dieser alternative Formalismus ebenfalls in dieser Arbeit kurz beschrieben, da dieser die  $N$ -Elektronen-Systeme in einer sehr eleganten Art beschreibt, ohne auf Slater-Determinanten zurückzugreifen. Die zweite Quantisierung ist eng mit der Beschreibung des harmonischen Quantenoszillators verwandt (siehe Jansson [39, S. 198–205]). Der Hamiltonoperator wird aus dem Orbital-Vernichtungs- und Orbital-Erzeugungsoperatoren definiert. Hier werden nur die Ergebnisse dieses Formalismus gezeigt: Der Born-Oppenheimer-Hamiltonoperator  $\hat{H}$  wird von Coleman [15] in der Form

$$\hat{H} = \sum_{i', j', j, i} H_{i' j' j i} \hat{a}_{i'}^+ \hat{a}_{j'}^+ \hat{a}_j \hat{a}_i$$

geschrieben, wobei  $H_{i' j' j i}$  die Koeffizienten des Hamiltonoperators sind. Die Operatoren  $\hat{a}_i$  und  $\hat{a}_i^+$  sind die Orbital-Vernichtungs- und Orbital-Erzeugungsoperatoren, welche jeweils ein Elektron auf einem Spinorbital vernichten oder erzeugen. Für diese Operatoren gelten die Antikommutator-Relationen

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \hat{a}_i \hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} = 0. \quad (4.14)$$

Die Energie des Zustands  $\Psi$  ist entsprechend gegeben durch

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{i', j', j, i} H_{i' j' j i} \langle \Psi | \hat{a}_{i'}^+ \hat{a}_{j'}^+ \hat{a}_j \hat{a}_i | \Psi \rangle.$$

Die Größen  $\langle \Psi | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i | \Psi \rangle$  sind die Koeffizienten der reduzierten Dichtematrix zweiter Ordnung. Daher können die reduzierten Dichtematrizen erster und zweiter Ordnung wie in der Dissertation von Zhao [109] im Formalismus der zweiten Quantisierung ausgedrückt werden:

$$\gamma(i, i') = \langle \Psi | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | \Psi \rangle, \quad (1\text{-RDM})$$

$$\Gamma(i, j; i', j') = \langle \Psi | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i | \Psi \rangle. \quad (2\text{-RDM})$$

Im Folgenden werden die Nebenbedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit vorgestellt, welche in der erwähnten Literatur in unterschiedlicher Form auftreten. In dieser Arbeit werden die  $\Gamma$ ,  $G$ ,  $Q$ ,  $T1$  und  $T2$  Bedingungen aus Zhao *et al.* [110] genutzt. Die erste Beschränkung für  $\gamma$  resultiert direkt aus der Definition:

$$\forall(i, i'): \quad \sum_j \Gamma(i, j; i', j) = (N - 1)\gamma(i, i'). \quad (4.15)$$

Die Spurbedingung (4.15) wird genutzt, um eine Menge linearer Nebenbedingungen bezüglich des Tupels  $(\gamma, \Gamma)$  zu formulieren. Die zu  $\gamma$  und  $\Gamma$  zugehörigen Spurbedingungen sind

$$\sum_i \gamma(i, i) = N, \quad (4.16)$$

und

$$\sum_{i,j} \Gamma(i, j; i, j) = N(N - 1). \quad (4.17)$$

Im Falle der reduzierten Dichtematrix  $\gamma$  sind die notwendigen und hinreichenden Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit

$$\gamma \succeq 0 \quad \text{und} \quad I - \gamma \succeq 0, \quad (4.18)$$

wobei  $I$  die Einheitsmatrix ist.

Wie bereits erwähnt ist die vollständige Menge der Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit nicht bekannt. Jedoch beschreiben die im Folgenden gegebenen Bedingungen eine Relaxation der Problemstellung. Es existieren fünf positiv semidefinite Matrizen

$$P = \Gamma \succeq 0, \quad G \succeq 0, \quad Q \succeq 0, \quad T1 \succeq 0, \quad T2 \succeq 0, \quad (4.19)$$

die durch unten dargestellte Linearkombinationen der Elemente von  $\gamma$  und  $\Gamma$  definiert werden. In den folgenden Definitionen laufen alle Indizes von 1 bis  $r$  und  $\delta$  ist das Kronecker-Delta

$$\begin{aligned} G(i, j; i', j') &= \langle \Psi | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_j | \Psi \rangle \\ &= \Gamma(i, j'; j, i') + \delta_{ii'} \gamma(j', j), \end{aligned} \quad (G)$$

In Szabo und Ostlund [89, S. 94] wird diese Auswertung der Matrixelemente in zweiter Quantisierung beschrieben. Dazu sei zunächst  $|\Psi\rangle := |0\rangle$  ein zu Eins normierter „Vakuumzustand“ mit  $\langle 0|0\rangle = 1$  und  $\hat{a}_i|0\rangle = 0 = \langle 0|\hat{a}_i^+$ . Dabei ist  $|0\rangle$  kein Nullvektor, sondern

ein Zustand ohne Elektronenbesetzungen. Aus den Antikommutator-Relationen (4.14) folgt

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger = \delta_{ij} - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i.$$

Diese Gleichung wendet man auf (G) so lange an, bis alle Vernichtungsoperatoren direkt auf den Zustand  $|0\rangle$  operieren

$$\langle 0 | \hat{a}_j^\dagger \underbrace{\hat{a}_i \hat{a}_{i'}^\dagger}_{\delta_{ii'} - \hat{a}_{i'}^\dagger \hat{a}_i} \hat{a}_{j'} | 0 \rangle = \delta_{ii'} \underbrace{\langle 0 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} | 0 \rangle}_{=\gamma(j',j)} - \underbrace{\langle 0 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{i'}^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_{j'} | 0 \rangle}_{=\Gamma(j',i;j,i') = -\Gamma(i,j';j,i')}$$

Gegebenenfalls mit Anwendung der Antisymmetriebedingung (4.12) können die Matrizen  $\gamma$  (1-RDM) und  $\Gamma$  (2-RDM) im Resultat identifiziert werden.

Analoge Berechnungen für die verbleibenden Matrizen (4.19) sind deutlich aufwändiger und können der Arbeit von Zhao [109] entnommen werden. An dieser Stelle seien der Vollständigkeit halber nur die Resultate aufgeführt.

$$\begin{aligned} Q(i, j; i', j') &= \langle \Psi | \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_{i'}^\dagger \hat{a}_{j'}^\dagger | \Psi \rangle \\ &= \Gamma(i, j; i', j') - \delta_{ii'} \gamma(j, j') - \delta_{jj'} \gamma(i, i') \\ &\quad + \delta_{ij'} \gamma(j, i') + \delta_{ji'} \gamma(i, j') \\ &\quad + \delta_{ii'} \delta_{jj'} - \delta_{ij'} \delta_{ji'}, \end{aligned} \tag{Q}$$

und

$$T1(i, j, k; i', j', k') = \langle \Psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i'} \hat{a}_{j'} \hat{a}_{k'} + \hat{a}_{i'} \hat{a}_{j'} \hat{a}_{k'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger | \Psi \rangle.$$

Für ein Matrix Element  $f(i, j, k)$ , das von den Argumenten  $i, j$  und  $k$  abhängt, wird nach dem Vorbild von Fukuda *et al.* [28] und Nakata *et al.* [73] folgender arithmetischer Ausdruck definiert

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[i, j, k] f(i, j, k) &= f(i, j, k) + f(j, k, i) + f(k, i, j) \\ &\quad - f(i, k, j) - f(j, i, k) - f(k, j, i). \end{aligned}$$

Mit diesem Ausdruck kann die Matrix  $T1$  folgendermaßen beschrieben werden

$$\begin{aligned} T1(i, j, k; i', j', k') &= \mathcal{A}[i, j, k] \mathcal{A}[i', j', k'] \left( \frac{1}{6} \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{kk'} - \frac{1}{2} \delta_{ii'} \delta_{jj'} \gamma(k, k') \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{4} \delta_{ii'} \Gamma(j, k; j', k') \right). \end{aligned} \tag{T1}$$

Der volle Ausdruck für T1 ist in der Dissertation von Zhao [109] gegeben. Zuletzt die Matrix

$$\begin{aligned} T2(i, j, k; i', j', k') &= \langle \Psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_{i'}^\dagger \hat{a}_{j'} \hat{a}_{k'} + \hat{a}_{i'} \hat{a}_{j'} \hat{a}_{k'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \Psi \rangle \\ &= \delta_{ii'} \Gamma(j', k'; j, k) - \delta_{jj'} \Gamma(k', i; k, i') \\ &\quad - \delta_{kk'} \Gamma(j', i; j, i') - \delta_{jk'} \Gamma(j', i; k, i') \\ &\quad + \delta_{kj'} \Gamma(k', i; j, i') \\ &\quad + \delta_{kk'} \delta_{jj'} \gamma(i, i') - \delta_{jk'} \delta_{kj'} \gamma(i, i'), \end{aligned} \tag{T2}$$

wobei die Matrix **T2** antisymmetrisch bezüglich  $(j, k)$  und  $(j', k')$  ist. Die **T2**-Bedingung wurde durch Braams *et al.* [10] und fast zeitgleich von Mazziotti [63] durch die Blockmatrix

$$T2' = \begin{pmatrix} T2 & X \\ X^* & \gamma \end{pmatrix}$$

verschärft. Diese Bedingung wurde von beiden Forschergruppen aus der Arbeit von Erdahl [24] abgeleitet. Für Details zur Herleitung und zum Nebendiagonalblock  $X$  siehe Braams *et al.* [10]. In den numerischen Resultaten wird kenntlich gemacht, ob die Bedingung **T2**- oder  $T2'$ -Bedingung genutzt wurde, wobei die letztere Bedingung die erstere impliziert.

Eine weitere Klasse von Bedingungen hat ihren Ursprung in der Symmetrie des  $N$ -Elektronen-Systems, siehe dazu Fukuda *et al.* [28]. Die Ausnutzung dieser Eigenschaften führt zu einer Blockdiagonalgestalt der oben genannten Matrizen. Wie bereits erwähnt beschreibt eine Orbital-Basisfunktion  $\psi_i$ , mit  $i = 1, \dots, r$ , ein Raumorbital und einen von zwei möglichen Spin-Zuständen. Aus diesem Grund steht ein Index  $i$  für ein Paar von Indizes  $n_i$  und  $\sigma_i$ , die wiederum als  $n_i\sigma_i$  geschrieben werden können. Der Raumorbital-Index  $n_i$  nimmt die Werte  $1, 2, \dots, r/2$  an, wohingegen der Spin-Zustand  $\sigma_i$  entweder den Wert  $+1/2$  ( $\alpha$ -Spin) oder den Wert  $-1/2$  ( $\beta$ -Spin) annimmt. Folgende Gleichungen können somit hergeleitet werden:

$$\gamma(n_i\sigma_i, n_{i'}\sigma_{i'}) = 0 \quad \text{für} \quad \sigma_i \neq \sigma_{i'}, \quad (4.20a)$$

$$\Gamma(n_i\sigma_i, n_j\sigma_j; n_{i'}\sigma_{i'}, n_{j'}\sigma_{j'}) = 0 \quad \text{für} \quad \sigma_i + \sigma_j \neq \sigma_{i'} + \sigma_{j'}, \quad (4.20b)$$

$$G(n_i\sigma_i, n_j\sigma_j; n_{i'}\sigma_{i'}, n_{j'}\sigma_{j'}) = 0 \quad \text{für} \quad \sigma_i + \sigma_{j'} \neq \sigma_{i'} + \sigma_j, \quad (4.20c)$$

$$Q(n_i\sigma_i, n_j\sigma_j; n_{i'}\sigma_{i'}, n_{j'}\sigma_{j'}) = 0 \quad \text{für} \quad \sigma_i + \sigma_j \neq \sigma_{i'} + \sigma_{j'}, \quad (4.20d)$$

$$\begin{aligned} T1(n_i\sigma_i, n_j\sigma_j, n_k\sigma_k; n_{i'}\sigma_{i'}, n_{j'}\sigma_{j'}, n_{k'}\sigma_{k'}) &= 0 \\ \text{für} \quad \sigma_i + \sigma_j + \sigma_k &\neq \sigma_{i'} + \sigma_{j'} + \sigma_{k'}, \end{aligned} \quad (4.20e)$$

$$\begin{aligned} T2(n_i\sigma_i, n_j\sigma_j, n_k\sigma_k; n_{i'}\sigma_{i'}, n_{j'}\sigma_{j'}, n_{k'}\sigma_{k'}) &= 0 \\ \text{für} \quad \sigma_i + \sigma_{j'} + \sigma_{k'} &\neq \sigma_{i'} + \sigma_j + \sigma_k. \end{aligned} \quad (4.20f)$$

Für die Elektronenanzahl mit  $\alpha$ -Spin  $N_\alpha$  gilt:

$$\sum_{n_i=1}^{r/2} \gamma(n_i\alpha, n_i\alpha) = N_\alpha, \quad (4.21a)$$

$$\sum_{n_i, n_j=1}^{r/2} \Gamma(n_i\alpha, n_j\alpha; n_i\alpha, n_j\alpha) = N_\alpha(N_\alpha - 1). \quad (4.21b)$$

Die letzte lineare Nebenbedingung beschreibt den Gesamtspin  $S$ :

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_i, n_j=1}^{r/2} (\Gamma(n_i\alpha, n_j\alpha; n_i\alpha, n_j\alpha) + \Gamma(n_i\beta, n_j\beta; n_i\beta, n_j\beta)) \\
& - 2 \sum_{n_i, n_j=1}^{r/2} \Gamma(n_i\alpha, n_j\beta; n_i\alpha, n_j\beta) - 4 \sum_{n_i, n_j=1}^{r/2} \Gamma(n_i\alpha, n_j\beta; n_j\alpha, n_i\beta) \\
& + 3N = 4S(S + 1).
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Dies sind alle Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, die in dieser Arbeit berücksichtigt und für die numerischen Resultate verwendet werden.

### 4.1.3. Formulierung von SDP-Relaxationen

Für das Elektronenstrukturproblem werden zwei SDP-Relaxationen vorgestellt. Eine detaillierte Gegenüberstellung dieser beiden SDP-Relaxationen kann in der Dissertation von Zhao [109] gefunden werden.

Mit den Überlegungen aus den Unterabschnitten 4.1.1 und 4.1.2 kann das folgende semidefinite Programm abstrakt formuliert werden

$$\begin{aligned}
& \text{Minimiere} && \langle H_1, \gamma \rangle + \langle H_2, \Gamma \rangle \\
& \text{u.d.N.} && N\text{-Darstellbarkeit.}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Die primalen positiv semidefiniten Matrizen in Blockdiagonalgestalt sind

$$X = \text{diag}(X_1, \dots, X_7) = \text{diag}(\gamma, I - \gamma, \Gamma, Q, G, T_1, T_2). \tag{4.24}$$

Mit dieser Wahl von  $X$  hat die Matrix  $C$  in der Zielfunktion lediglich zwei von Null verschiedene Blöcke

$$C = \text{diag}(C_1, \dots, C_7) = \text{diag}(H_1, O, H_2, O, O, O, O),$$

und die Zielfunktion von (4.23) kann zu

$$\langle C, X \rangle = \langle H_1, \gamma \rangle + \langle H_2, \Gamma \rangle \tag{4.25}$$

umgeschrieben werden.

Die Erfüllung der Gleichungsnebenbedingungen (4.15) – (4.17), der positiv semidefiniten Nebenbedingungen  $X \succeq 0$  (4.24), sowie der Spin-Nebenbedingungen (4.20) – (4.22), kann durch die geeignete Wahl von Matrizen  $A_m$  und einem Vektor der rechten Seite  $b$  sichergestellt werden.

Zusammenfassend bekommt man die folgende primale (SDP)-Formulierung

$$\begin{aligned}
& \text{Minimiere} && \langle C, X \rangle \\
& \text{u.d.N.} && \langle A_m, X \rangle = b_m, \quad m = 1, 2, \dots \\
& && X \succeq 0.
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Wegen der großen Anzahl von Gleichungsnebenbedingungen  $m$  stellt sich die duale Problemformulierung (DSDP) als effizienter heraus. Insbesondere reduziert diese drastisch die Dimension des resultierenden Optimierungsproblems. Anstelle der Matrixvariable  $X$  (4.24) wird eine Vektorvariable

$$y = \begin{pmatrix} \text{svec}(\gamma, \alpha) \\ \text{svec}(\Gamma, \alpha) \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

mit  $\alpha = \sqrt{2}$  eingeführt<sup>2</sup>. Passend zu  $y$  wird ein neuer Vektor für die Zielfunktion definiert

$$\tilde{b} = \begin{pmatrix} \text{svec}(H_1, \alpha) \\ \text{svec}(H_2, \alpha) \end{pmatrix}.$$

Mit diesen Vektoren ist die Minimierung der Zielfunktion (4.25) äquivalent zu der Maximierung der Zielfunktion  $-\tilde{b}^T y$ . Auf gleiche Weise müssen die Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit in neue geeignete Matrizen  $F_l$  transformiert werden. Insgesamt ergibt sich die Problem-Formulierung

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & -\tilde{b}^T y \\ \text{u.d.N.} & \sum_l y_l F_l \preceq F_0. \end{array} \quad (4.28)$$

Dieses Problem kann als DSDP-Formulierung angesehen werden. Man beachte jedoch, dass (4.28) nicht das Lagrange-Duale-Problem zu (4.26) ist. Es handelt sich lediglich um eine duale Formulierung zu (4.26). Besonders für sehr große Optimierungsprobleme ist die DSDP-Formulierung von großem Vorteil. Ebenso handelt es sich bei (4.28) um ein duales Minimierungsproblem. Somit ist die negierte obere rigorose Fehlerschranke  $-\bar{f}_d$  (3.4) eine untere für die SDP-Relaxation (4.28) der Grundzustandsenergie. Die rigorosen unteren Fehlerschranken im Kapitel 4.4 werden folglich gemäß Korollar 3 berechnet.

## 4.2. Historische Anmerkungen

In diesem Abschnitt wird eine kurze historische Einführung mit weiterführenden Referenzen zu der Lösung des Elektronenstrukturproblems mittels reduzierter Dichtematrizen gegeben.

Landau [47] und von Neumann [80] führten die Dichtematrix in die Quantenmechanik für  $N$ -Teilchen-Systeme ein. Über die anfänglichen Ideen von Neumanns schreiben Garrod und Percus [29]:

„Gegeben sei eine Funktion mit vier Variablen  $\Gamma$ . Unter welchen Bedingungen können wir sicher sein, dass ein  $N$ -Teilchen-System existiert, von dem dieses  $[\Gamma]$  als Zwei-Teilchen Dichtematrix hergeleitet werden darf? Seine [von Neumanns] Lösung ist, dass  $\Gamma$  ein hermitescher, nicht-negativer Operator mit  $\text{tr } N(N - 1)$  sein muss.“

<sup>2</sup>Siehe zur Wahl von  $\alpha$  für verifizierte Berechnungen den Unterabschnitt 3.2.2.

Bis in die 1950er Jahre waren Dichtematrizen fast ausschließlich Gegenstand der statistischen Thermodynamik [65], jedoch erwiesen sie sich als nützlichere mathematische Objekte, um quantenmechanische Systeme zu beschreiben. Eine Wellenfunktion operiert lediglich auf reinen Zuständen, wohingegen eine Dichtematrix gleichermaßen auch auf gemischten (superpositionierten) Zuständen operiert. Außerdem sind Dichtematrizen vorteilhaft und sogar notwendig, wenn das betrachtete System nur ein kleiner verfügbarer Ausschnitt eines bestimmten größeren Systems ist.

Bereits 1951 erklärte Coleman auf einer Konferenz, dass das Elektronenstrukturproblem mit dem Wissen der Zwei-Teilchen Dichtematrizen lösbar ist [60]. Im Jahr 1955 publizierten Mayer [53] und Löwdin [49] ähnliche Gleichungen für die Energie von antisymmetrischen  $N$ -Teilchen-Systemen mithilfe von Zwei-Teilchen Dichtematrizen. Mayer [53] berichtete über eine Variationsrechnung der Dichtematrizen der Grundzustandsenergie für ein Elektronengas. Unter der Beachtung des Pauli-Prinzips, der Hermitizität und Nichtnegativität von  $\Gamma$ , sowie einer Beziehung zwischen den Ein- und Zwei-Teilchen Dichtematrizen, variierte Mayer direkt die Zwei-Teilchen Dichtematrix. Er zeigte, dass die Energieniveaus von Systemen, in denen nur Kräfte zwischen zwei Körpern wirken, vollständig durch die Zwei-Teilchen Dichtematrix charakterisiert sind. Aus diesem Grund kann die Energie mithilfe der Dichtematrix ausgedrückt werden und eine Variationsrechnung liefert die Grundzustandsenergie. Tredgold [93] stellte jedoch einen Fehler in Mayer's Veröffentlichung fest. Es werden weitere Nebenbedingungen benötigt, um sicherzustellen, dass eine Zwei-Teilchen Dichtematrix aus einer Wellenfunktion abgeleitet werden kann.

Coleman [16] bezeichnet die Suche nach den notwendigen und hinreichenden Bedingungen als das Problem der  $N$ -Darstellbarkeit:

„[...] wie können wir erkennen, dass eine vermeintliche Zwei-Teilchen Dichtematrix tatsächlich die reduzierte Dichtematrix eines Systems mit  $N$ -ununterscheidbaren Teilchen ist.“

Weitere Bedingungen sind für die 2-RDM notwendig. Garrod und Percus [29] formalisierten alle notwendigen und hinreichenden Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, jedoch weisen die Autoren in der Veröffentlichung wiederholt darauf hin, dass diese Bedingung für eine praktische Anwendung unbrauchbar seien. Ungeachtet dessen, verbesserte Kummer [46] einige der Theoreme von Garrod und Percus [29]. Eine Zusammenstellung der bis in die 1970er bekannten Eigenschaften der reduzierten Dichtematrizen kann in dem Buch von Davidson [20] nachgelesen werden. Für einige verwandte Aspekte, siehe Cohen und Frishberg [14] und Nakatsuji [75].

Erst in den 1990ern wurde die Arbeit am Problem der  $N$ -Darstellbarkeit wieder aufgenommen. Valdemoro und Co-Autoren [18, 19, 96, 97], Nakatsuji und Yasuda [76, 107] und Mazziotti [54, 58] berechneten die 2-RDM ohne die volle Dichtematrix. Dazu wurde die Schrödingergleichung über die Spin- und Raumkoordinaten von  $N - 2$  Elektronen integriert und dieser Ansatz resultiert in der sogenannten *Contracted Schrödinger Equation (CSE)*.

Der Variationsansatz mit der 2-RDM und den linearen Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, führen zu konvexen, genauer semidefiniten, Optimierungsproblemen, die aus-

fürlich im Kapitel 2 und im Unterabschnitt 3.2.2 betrachtet wurden. Eine Arbeitsgruppe mit Braams, Ehara, Fujisawa, Fukuda, Nakata, Nakatsuji, Overton, Percus, Yamashita und Zhao [10, 28, 73, 74, 110] berechnete seit den 2000er Jahren mit diesem Ansatz akkurate numerische Ergebnisse. Anfängliche drastische Fehler in Nakata *et al.* [74] wurden durch verbesserte Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, die im Unterabschnitt 4.1.2 vorgestellt wurden, behoben. Eine weitere wichtige physikalische Eigenschaft, die Größenkonsistenz<sup>3</sup> genannt wird, garantieren die hier genannten Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit jedoch nicht. Nakata und Anderson [72] ergänzten weitere Nebenbedingungen, um den 2-RDM Variationsansatz größenkonsistent zu machen. Für ähnliche Entwicklungen siehe auch Kollmar [45] und Ahlrichs *et al.* [1].

Parallel entwickelte eine Forschungsgruppe um Mazziotti [55, 59] einen effizienten Algorithmus für das Elektronenstrukturproblem, welcher den Speicherverbrauch und die benötigten Gleitkommaoperationen um Größenordnungen verringert. Die Anwendung auf die Moleküle  $H_6$  und  $N_2$  demonstrierte die Effizienz dieses Algorithmus. Basierend auf einer Regularisierungsmethode für semidefinite Programme von Malick *et al.* [50] entwickelte Mazziotti [56] eine Methode für die Berechnung stark korrelierter 2-RDM, welche den vorherigen Algorithmus um den Faktor 10 bis 20 beschleunigte. Jüngst entwickelten Veeraraghavan und Mazziotti [99, 100] einen Ansatz um mithilfe von Dichtematrizen eine globale Lösung zu berechnen, die obere und untere Schranken für die Hartree-Fock Energie von Quantensystemen liefert. Viele weitere Beispiele sind in der umfangreichen Rezension von Mazziotti [62] zu finden.

### 4.3. Eigenschaften der SDP-Relaxationen

In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften der SDP-Relaxationen in primaler SDP-Formulierung (4.26) und dualer DSDP-Formulierung (4.28) im Hinblick auf die Berechnung einer rigorosen unteren Fehlerschranke für das Elektronenstrukturproblem untersucht. Es stellt sich heraus, dass für beide Problemformulierungen geeignete a priori Schranken aus den Eigenschaften der jeweiligen Relaxation formuliert werden können, sodass für die SDP- und DSDP-Formulierung Korollar 2, bzw. Korollar 3, anwendbar ist.

#### 4.3.1. Eigenwertschranken für die SDP-Formulierung

Um die Rechenzeit einer rigorosen unteren Fehlerschranke für das Elektronenstrukturproblem gemäß Korollar 2 drastisch zu reduzieren, sind für die rigorose Auswertung von (3.2) Eigenwertschranken der Matrixvariablen  $X$  notwendig. In diesem Abschnitt werden Eigenwertschranken für jeden Block der Matrixvariable

$$X = \text{diag}(\gamma, I - \gamma, \Gamma, Q, G, T1, T2)$$

aus der SDP-Formulierung (4.26) hergeleitet.

---

<sup>3</sup> *engl. size inconsistency*. Für eine deutschsprachige Erläuterung siehe Zülicke [112, S. 423–431].

Im Fall von  $\gamma$  und  $I - \gamma$  sind die oberen Schranken trivial. Aus den Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit (4.18) folgt

$$\lambda_{\max}(\gamma) \leq 1, \quad \lambda_{\max}(I - \gamma) \leq 1. \quad (4.29)$$

Für  $\Gamma$ , die positiv semidefinite reduzierte Dichtematrix zweiter Ordnung, kann aus der Spurbedingung (4.17) die obere Eigenwertschranke  $\lambda_{\max}(\Gamma) \leq \text{Spur}(\Gamma) \leq N(N - 1)$  ermittelt werden. Garrod und Percus [29] verschärfen diese obere Eigenwertschranke

$$\lambda_{\max}(\Gamma) \leq N. \quad (4.30)$$

Um die Spuren der verbleibenden Matrizen zu berechnen, wird ein Ansatz aus der Doktorarbeit von Chaykin [12] verfolgt. Dieser Ansatz nutzt die linearen Gleichungen (G), (Q), (T1), (T2) und die Antisymmetrie (4.12) von  $\Gamma$  aus den Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit. Mithilfe dieser Gleichungen können die jeweiligen Matrixelemente in Abhängigkeit von  $\gamma$  und  $\Gamma$  dargestellt werden, wobei für letztere die Spuren durch (4.16) und (4.17) bekannt sind.

Für die Matrix  $G$  folgt somit aus (4.12), (4.16) und (4.17) die Spur

$$\begin{aligned} \text{Spur}(G) &= \sum_{i,j} G(i, j; i, j) \\ &= \sum_{i,j} \Gamma(i, j; j, i) + \sum_{i,j} \delta(i, i) \gamma(j, j) \\ &= - \sum_{i,j} \Gamma(i, j; i, j) + \sum_i \delta(i, i) N \\ &= -N(N - 1) + rN = N(r - N + 1). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Analoge Berechnungen für die Matrizen  $Q$ ,  $T1$ ,  $T2$  und  $T2'$  ergeben

$$\begin{aligned} \text{Spur}(Q) &= (r - N)(r - N - 1), \\ \text{Spur}(T1) &= (r - 2)(r(r - 1) - 3N(r - N)), \\ \text{Spur}(T2) &= -rN(N - 1) + r^2N - rN = rN(r - N), \\ \text{Spur}(T2') &= \text{Spur}(T2) + \text{Spur}(\gamma). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Zusammenfassend ergeben sich aus (4.29)–(4.32) für alle Diagonalblöcke von  $X$  die folgenden oberen Eigenwertschranken

$$\begin{aligned} \lambda_{\max}(\gamma) &\leq 1, \\ \lambda_{\max}(I - \gamma) &\leq 1, \\ \lambda_{\max}(\Gamma) &\leq N, \\ \lambda_{\max}(G) &\leq N(r - N + 1), \\ \lambda_{\max}(Q) &\leq (r - N)(r - N - 1), \\ \lambda_{\max}(T1) &\leq (r - 2)(r(r - 1) - 3N(r - N)), \\ \lambda_{\max}(T2) &\leq rN(r - N), \\ \lambda_{\max}(T2') &\leq N(r(r - N) + 1). \end{aligned} \quad (4.33)$$

### 4.3.2. Schranken für die DSDP-Formulierung

Mit (4.33) sind im vorherigen Unterabschnitt geeignete a priori Schranken für die Matrixvariable  $X$  der primalen SDP-Formulierung (4.26) hergeleitet worden.

Bei der Formulierung von SDP-Relaxationen im Unterabschnitt 4.1.3 wurde bereits die DSDP-Formulierung (4.28) mit der Vektorvariable  $y$  (4.27) als vorteilhafter identifiziert. Aus diesem Grund werden in den folgenden zwei Unterabschnitten mit den Überlegungen (4.33) für die Matrixvariable  $X$  elementweise obere Schranken für die Vektorvariable  $y$  aus der DSDP-Formulierung hergeleitet. Auch diese a priori Schranken reduzieren den notwendigen Rechenaufwand durch die Anwendbarkeit von Korollar 3 erheblich.

**Lemma 1.** *Sei  $\gamma \in \mathbb{S}_+^r$  eine symmetrisch positiv semidefinite reduzierte Dichtematrix erster Ordnung (1-RDM). Dann gilt*

$$|\gamma(i, i')| \leq \begin{cases} \lambda_{\max}(\gamma) & \text{für } i = i', \\ \lambda_{\max}(\gamma)/2 & \text{sonst.} \end{cases}$$

*Beweis.* Gegeben sei die Spektralzerlegung  $\gamma = Q\Lambda Q^T$  mit der Diagonalmatrix  $\Lambda$ , deren Hauptdiagonale der Vektor der Eigenwerte  $\lambda = \text{diag}(\Lambda)$  ist, sowie der orthogonalen Matrix  $Q$  der orthonormalen Eigenvektoren. Für je zwei Indizes  $i$  und  $i'$  gilt

$$\gamma(i, i') = e_i^T \gamma e_{i'} = e_i^T Q\Lambda Q^T e_{i'} = q_i^T \Lambda q_{i'} = \text{Spur}(q_i^T \Lambda q_{i'}) = \text{Spur}(\Lambda q_{i'} q_i^T).$$

Aus der Diagonalität von  $\Lambda$  folgt

$$\gamma(i, i') = \text{Spur}(\Lambda q_{i'} q_i^T) = \langle \lambda, q_i \bullet q_{i'} \rangle,$$

wobei  $q_i \bullet q_{i'}$  das Hadamard-Produkt der jeweiligen Eigenvektoren ist.

Weil alle Eigenvektoren auf 1 normiert sind, gilt für jeden Index  $i$  der Zusammenhang  $\|q_i\|_2^2 = \langle q_i, q_i \rangle = 1$ .

Aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung folgt

$$\langle |q_i|, |q_{i'}| \rangle \leq \| |q_i| \| \cdot \| |q_{i'}| \| = 1.$$

Der Betrag der einzelnen Komponenten liefert eine obere Schranke für das Skalarprodukt

$$\sum_k |(q_i)_k| \cdot |(q_{i'})_k| = \langle e, |q_i| \bullet |q_{i'}| \rangle = \langle |q_i|, |q_{i'}| \rangle \leq 1, \quad (4.34)$$

wobei  $e$  der Vektor mit allen Komponenten gleich 1 ist.

Per Definition ist jedes Element von  $\lambda$  von oben durch den maximalen Eigenwert von  $\gamma$  beschränkt. Da  $\gamma$  positiv semidefinit ist, gilt  $0 \leq \lambda_i \leq \lambda_{\max}(\gamma)$  für alle  $i = 1, \dots, r$ . Mit (4.34) kann eine obere Schranke für den Betrag jeder Komponente von  $\gamma$  für beliebige Indizes  $i$  und  $i'$  berechnet werden:

$$\begin{aligned} |\gamma(i, i')| &= |\langle \lambda, q_i \bullet q_{i'} \rangle| \leq \langle |\lambda|, |q_i| \bullet |q_{i'}| \rangle \leq \langle \lambda_{\max}(\gamma)e, |q_i| \bullet |q_{i'}| \rangle \\ &= \lambda_{\max}(\gamma) \langle e, |q_i| \bullet |q_{i'}| \rangle \leq \lambda_{\max}(\gamma). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Somit ist Lemma 1 für den Fall  $i = i'$  bewiesen. Es gilt  $|\gamma(i, i')| \leq \lambda_{\max}(\gamma)$  für alle Indizes  $i$  und  $i'$ . Jedoch kann die Schranke (4.35) für Nebendiagonalelemente  $i \neq i'$  verbessert werden. Alle Vektoren  $q_i$  sind orthogonal zueinander. Somit ist das Skalarprodukt von je zwei Vektoren  $q_i$  und  $q_{i'}$  gleich Null. Dieses Skalarprodukt kann in zwei betragsmäßig gleich große Anteile, einen positiven und einen negativen, aufgeteilt werden, die sich wiederum zu Null summieren

$$\begin{aligned} 0 &= \langle q_i, q_{i'} \rangle = \sum_k (q_i)_k \cdot (q_{i'})_k = \langle e, q_i \bullet q_{i'} \rangle \\ &= \langle e, \max(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle + \langle e, \min(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle. \end{aligned}$$

Wie bereits erwähnt, sind die Beträge des positiven und negativen Anteils identisch. Es gilt

$$|\langle e, \max(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle| = |\langle e, \min(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle|.$$

Mit (4.34) gilt ferner

$$|\langle e, \max(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle| + |\langle e, \min(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle| = \langle e, |q_i| \bullet |q_{i'}| \rangle \leq 1. \quad (4.36)$$

Aus (4.36) folgt, dass die Beträge des positiven und negativen Anteils gleichermaßen durch  $1/2$  nach oben beschränkt sind.

$$\langle e, \max(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle \leq \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \langle -e, \min(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle \leq \frac{1}{2}.$$

Schlussendlich gilt

$$|\gamma(i, i')| = |\langle \lambda, q_i \bullet q_{i'} \rangle| \leq \begin{cases} \langle \lambda_{\max}(\gamma)e, \max(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle & \leq \frac{1}{2} \lambda_{\max}(\gamma), \\ \langle \lambda_{\max}(\gamma)e, -\min(q_i \bullet q_{i'}, 0) \rangle & \leq \frac{1}{2} \lambda_{\max}(\gamma), \end{cases}$$

für alle  $i \neq i'$ . □

Lemma 1 kann für beliebige positive semidefinite Matrizen, insbesondere für die Matrizen  $\gamma$ ,  $\Gamma$ , **G**, **Q**, **T1** oder **T2** aus den Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, angewendet werden.

### 4.3.3. Kompaktifizierte Matrizen

Die ursprüngliche RDM-Formulierung (4.13) ist schon durch die Modellierung schlecht gestellt. Diese schlechte Problemstellung ist eine direkte Folge der Antisymmetriebedingung (4.12) der Matrix  $\Gamma$  (**2-RDM**). Für jede Dimension  $r > 1$  zeigen die Identitäten

$$\Gamma(i, j; i', j') = -\Gamma(j, i; i', j') = -\Gamma(i, j; j', i'), \quad 1 \leq i, j, i', j' \leq r,$$

das Vorhandensein von linear abhängigen Zeilen und Spalten in der Matrix  $\Gamma$ . Dies beinhaltet auch das Vorhandensein eines nicht-trivialen Kerns in  $\Gamma$  und somit die Existenz

von Eigenwerten gleich Null. Genauer gesagt folgt, dass alle zulässigen Punkte der zugehörigen SDP-Relaxationen (4.26) und (4.28) auf dem Rand des symmetrisch positiv semidefiniten Kegels liegen. Es gibt keine zulässigen inneren Punkte, die Slater-Bedingung (Theorem 2) ist nicht anwendbar. Prinzipiell lässt sich ein solches schlecht gestelltes Problem mithilfe der *Boundedness Qualifications* (Definitionen 2 und 3) verifiziert lösen. Da die SDP-Relaxationen eine Lösung besitzen, können mithilfe von einfachen a priori Schranken und einer approximativen Lösung rigorose Fehlerschranken berechnet werden, siehe dazu Abschnitt 2.6.

Allerdings wird in der Arbeit von Zhao *et al.* [110] gezeigt, dass äquivalente SDP-Relaxationen kleinerer Dimension formuliert werden können, welche die Slater-Bedingung erfüllen. Die reduzierten semidefiniten Matrixvariablen dieser äquivalenten Relaxation werden „kompaktifizierte Matrizen“ genannt. Über eine einfache Indexzuordnung können die ursprünglichen Matrixvariablen zu kompaktifizierten Matrixvariablen umgewandelt werden.

Für die reduzierte  $r^2 \times r^2$ -Dichtematrix zweiter Ordnung  $\Gamma$  wird eine *Indexmenge* von Indexpaaren für die Zeilen

$$\Omega_\Gamma := \{(i, j) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} : 1 \leq i < j \leq r\} \quad (4.37)$$

und analog mit den gleichen Indexpaaren  $\Omega'_\Gamma$  für die Spalten definiert. Es wird angenommen, dass die Indexpaare in  $\Omega_\Gamma$  eine bestimmte Ordnung haben, die beliebig fest gewählt ist. Die *kompaktifizierte Matrix* von  $\Gamma$  ist damit folgendermaßen definiert

$$\tilde{\Gamma} := \Gamma_{\Omega_\Gamma \Omega'_\Gamma}. \quad (4.38)$$

Man beachte, dass  $\Gamma$  eine  $r^2 \times r^2$ -Matrix ist, wohingegen die kompaktifizierte Matrix  $\tilde{\Gamma}$  eine  $\binom{r}{2} \times \binom{r}{2}$ -Matrix ist. Offensichtlich impliziert die Antisymmetriebedingung (4.12) eine lineare Transformation von  $\tilde{\Gamma}$  zurück zu  $\Gamma$ .

Eine anschauliche Darstellung von (4.38) und insbesondere die Struktur der **2-RDM**, die lediglich die Antisymmetriebedingung (4.12) berücksichtigt, ist für  $r = 3$  in (4.39) gegeben. Zur Erstellung dieser Darstellung wurde die Antisymmetriebedingung für alle Indexpaare ausgewertet. Diese Auswertung sei anhand von zwei Beispielen  $(1, 2)$ ,  $(1', 2')$  und  $(1, 1)$ ,  $(1', 2')$  gezeigt

$$\begin{aligned} g_1 &= \Gamma(1, 2; 1', 2') = -\Gamma(2, 1; 1', 2') = -\Gamma(1, 2; 2', 1') = \Gamma(2, 1; 2', 1'), \\ n_1 &= \Gamma(1, 1; 1', 2') = -\Gamma(1, 1; 1', 2') = -\Gamma(1, 1; 2', 1') = \Gamma(1, 1; 2', 1') \implies n_1 = 0. \end{aligned}$$

Die Darstellung (4.39) hebt durch dick gedruckte Buchstaben und Indexpaare den nicht redundanten Anteil der kompaktifizierten Matrix  $\tilde{\Gamma}$  innerhalb von der gesamten **2-RDM**

$\Gamma$  hervor.

$$\tilde{\Gamma} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (1', 1') & (1', 2') & (1', 3') & (2', 1') & (2', 2') & (2', 3') & (3', 1') & (3', 2') & (3', 3') \end{matrix} \\ \begin{matrix} (1, 1) \\ (1, 2) \\ (1, 3) \\ (2, 1) \\ (2, 2) \\ (2, 3) \\ (3, 1) \\ (3, 2) \\ (3, 3) \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{g}_1 & \mathfrak{g}_2 & -g_1 & 0 & \mathfrak{g}_3 & -g_2 & -g_3 & 0 \\ 0 & \mathfrak{g}_2 & \mathfrak{g}_4 & -g_2 & 0 & \mathfrak{g}_5 & -g_4 & -g_5 & 0 \\ 0 & -g_1 & -g_2 & g_1 & 0 & -g_3 & g_2 & g_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{g}_3 & \mathfrak{g}_5 & -g_3 & 0 & \mathfrak{g}_6 & -g_5 & -g_6 & 0 \\ 0 & -g_2 & -g_4 & g_2 & 0 & -g_5 & g_4 & g_5 & 0 \\ 0 & -g_3 & -g_5 & g_3 & 0 & -g_6 & g_5 & g_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \Big|_{\Omega_\Gamma \Omega'_\Gamma} \quad (4.39)$$

Für eine beliebige Matrix  $\Gamma$  stelle der Vektor  $\lambda(\Gamma)$  alle von Null verschiedenen Eigenwerte von  $\Gamma$  in nicht aufsteigender Reihenfolge sortiert dar. Dadurch wird folgende Beziehung zwischen den Eigenwerten von  $\Gamma$  und  $\tilde{\Gamma}$  erhalten:

**Lemma 2.** *Die Eigenwerte der kompaktifizierten Matrix  $\tilde{\Gamma}$  und der Matrix  $\Gamma$  erfüllen für die von Null verschiedenen Eigenwerte die Identität*

$$\lambda(\tilde{\Gamma}) = \frac{1}{2} \lambda(\Gamma).$$

*Beweis.* Gegeben sei die Spektralzerlegung von  $\Gamma$ ,

$$\Gamma = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r \lambda_{ij} q_{ij} q_{ij}^T,$$

mit orthonormalen Vektoren  $q_{ij}$  zu jedem Indexpaar  $(i, j)$ . Das  $\text{Bild}(\Gamma)$  ist der Spaltenraum von  $\Gamma$ . In diesem Fall gilt das Interesse nur den Eigenvektoren, die zu den von Null verschiedenen Eigenwerten von  $\Gamma$  gehören. Diese Vektoren liegen im Spaltenraum von  $\Gamma$ :

$$\lambda_{ij} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad q_{ij} \in \text{Bild}(\Gamma).$$

Die Antisymmetriebedingung (4.12) besagt, dass zu einem Vektor  $v \in \text{Bild}(\Gamma)$  die zugehörige Matrix  $\text{mat}(v)$  antisymmetrisch ist. Hierbei ist  $\text{mat}(v)$  die Matrix der Dimension  $r \times r$ , die durch spaltenweises Befüllen mit den Komponenten eines Vektors  $v$  der Länge  $r^2$  entsteht. Zusammen mit der Definition von  $\Omega_\Gamma$  in (4.37) ergibt sich

$$\forall v, w \in \text{Bild}(\Gamma): \quad \langle v_{\Omega_\Gamma}, w_{\Omega_\Gamma} \rangle = \langle \text{tril}(\text{mat}(v)), \text{tril}(\text{mat}(w)) \rangle = \frac{1}{2} \langle v, w \rangle, \quad (4.40)$$

wobei  $\text{tril}(\cdot)$  die untere Dreiecksmatrix ist.

Zu jedem Indexpaar  $(i, j)$  aus der Menge  $\Omega_{\neq 0} := \{(i, j) \mid \lambda_{ij} \neq 0\}$  wird ein neuer Vektor

$$\tilde{q}_{ij} := \sqrt{2} (q_{ij})_{\Omega_\Gamma}$$

definiert. Aus (4.38) folgt

$$\begin{aligned}
\tilde{\Gamma} &= \Gamma_{\Omega_{\Gamma}\Omega'_{\Gamma}} \\
&= \left( \sum_{(i,j) \in \Omega_{\neq 0}} \lambda_{ij} q_{ij} q_{ij}^T \right)_{\Omega_{\Gamma}\Omega'_{\Gamma}} \\
&= \sum_{(i,j) \in \Omega_{\neq 0}} \lambda_{ij} (q_{ij})_{\Omega_{\Gamma}} (q_{ij}^T)_{\Omega'_{\Gamma}} \\
&= \sum_{(i,j) \in \Omega_{\neq 0}} \frac{1}{2} \lambda_{ij} \tilde{q}_{ij} \tilde{q}_{ij}^T.
\end{aligned}$$

Das Lemma ist bewiesen, wenn gezeigt ist, dass die Vektoren  $\{\tilde{q}_{ij}\}$  eine Orthonormalbasis für den Spaltenraum von  $\tilde{\Gamma}$  beschreiben. Durch die Nutzung von (4.40) folgt

$$\forall (i, j) \in \Omega_{\neq 0}: \quad \|\tilde{q}_{ij}\|^2 = \langle \tilde{q}_{ij}, \tilde{q}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \langle \sqrt{2} q_{ij}, \sqrt{2} q_{ij} \rangle = 1,$$

und

$$\forall (i, j), (i', j') \in \Omega_{\neq 0}: \quad (i, j) \neq (i', j') \implies \langle \tilde{q}_{ij}, \tilde{q}_{i'j'} \rangle = \langle q_{ij}, q_{i'j'} \rangle = 0.$$

Somit repräsentiert

$$\sum_{(i,j) \in \Omega_{\neq 0}} \left( \frac{1}{2} \lambda_{ij} \right) \tilde{q}_{ij} \tilde{q}_{ij}^T$$

eine Eigenwertzerlegung von  $\tilde{\Gamma}$ . □

Analog zu der Definition von  $\Omega_{\Gamma}$  führen die jeweiligen Antisymmetriebedingungen der Matrizen **Q**, **T1** und **T2** zu den Definitionen der jeweiligen Indexmengen

$$\begin{aligned}
\Omega_Q &:= \{(i, j) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N}: 1 \leq i < j \leq r\} = \Omega_{\Gamma}, \\
\Omega_{T1} &:= \{(i, j, k) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} \times \mathbb{N}: 1 \leq i < j < k \leq r\}, \\
\Omega_{T2} &:= \{(i, j, k) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} \times \mathbb{N}: 1 \leq i \leq r, 1 \leq j < k \leq r\}.
\end{aligned}$$

Für die Konstruktion der kompaktifizierten Matrizen  $\tilde{Q}$ ,  $\tilde{T1}$  und  $\tilde{T2}$  wird eine feste Ordnung, wie bei den vorherigen Indexpaaren, für die weiteren Indexpaare oder -tripel angenommen. Die Nutzung des gleichen Zusammenhangs wie in (4.38) ergibt

$$\tilde{Q} := Q_{\Omega_Q \Omega'_Q}, \quad \tilde{T1} := T1_{\Omega_{T1} \Omega'_{T1}}, \quad \tilde{T2} := T2_{\Omega_{T2} \Omega'_{T2}}.$$

Offensichtlich ist es möglich, ähnliche Beziehungen zwischen den von Null verschiedenen Eigenwerten und Eigenvektoren von **Q**, **T1** und **T2** zu beweisen. Schlussendlich erhält man

$$\lambda(\tilde{Q}) = \frac{1}{2} \lambda(Q), \quad \lambda(\tilde{T1}) = \frac{1}{6} \lambda(T1) \quad \text{und} \quad \lambda(\tilde{T2}) = \frac{1}{2} \lambda(T2).$$

Diese Beziehungen können beispielsweise zur Verbesserung der oberen Eigenwertschranken (4.33) genutzt werden, welche mithilfe der Spuren der ursprünglichen Matrizen **Q**, **T1** und **T2** formuliert werden.

## 4.4. Numerische Resultate

In diesem Kapitel werden die berechneten rigorosen Fehlerschranken für die Grundzustandsenergie präsentiert. Die Testbibliotheken ESC und RDM modellieren für die Berechnung der Grundzustandsenergie verschiedene Moleküle als **DSDP**-Relaxationen (4.28) und stellen die Daten im SDPA-Format [27, S. 16–17] zur Verfügung. Näherungslösungen für die ESC-Bibliothek sind in Zhao *et al.* [110, Tabelle I und II] zu finden, für die RDM-Bibliothek in Nakata *et al.* [73, Tabelle I]. Mit einer älteren Version von VSDP wurden im Zuge dieser Arbeit rigorose Fehlerschranken berechnet [13], die vergleichbar zu den hier vorgestellten Fehlerschranken sind.

Zur Ermittlung approximativer Lösungen wurden MOSEK [4] und SDPT3 (4.0) [91, 92, 95] auf System 2 (siehe Tabelle 3.1) verwendet. Die rigorosen oberen und unteren Schranken wurden mit VSDP [43] berechnet. Verifizierte Lösungen für lineare Intervallgleichungssysteme und Eigenwertprobleme wurden mit INTLAB [84] erhalten. Um mit geringem Rechenaufwand eine untere Fehlerschranke für das Elektronenstrukturproblem nach Korollar 3 berechnen zu können, wurden für die **DSDP**-Formulierung gemäß Lemma 1 und 2 elementweise a priori Schranken  $\bar{y}$  für die dualen Variablen (4.27) berechnet.

### 4.4.1. ESC-Bibliothek

Die ESC-Bibliothek besteht aus 47 Molekülen mit bis zu  $N = 16$  Elektronen, deren Wellenfunktionen auf bis zu  $r = 20$  Spinorbitalen diskretisiert sind. Die Größe der resultierenden **DSDP**-Relaxationen variiert zwischen 116 692 und 2 569 260 Variablen und zwischen 948 und 7230 Nebenbedingungen.

Die numerischen Ergebnisse aus Zhao *et al.* [110] für die ESC-Bibliothek wurden mithilfe des semidefiniten Löser SDPARA [104] berechnet. Dieser Löser unterstützt keine Gleichungsnebenbedingungen. Aus diesem Grund ersetzten die Autoren jede Gleichheitsnebenbedingung durch zwei Ungleichungen. Zur Vermeidung einer schlecht gestellte Problemstellung der **DSDP**-Formulierung fügten die Autoren zusätzlich eine kleine Toleranz  $\varepsilon$  ein. In den originalen Testdaten variiert  $\varepsilon$  zwischen  $10^{-5}$  und  $10^{-7}$ . In dieser Arbeit wurde für alle Optimierungsprobleme eine Toleranz von  $\varepsilon = 10^{-7}$  sichergestellt, was eine kleinere Relaxation in allen Testfällen bedeutet.

Mit der Ausnahme eines Optimierungsproblems<sup>4</sup> wurden für alle Moleküle approximative Lösungen und rigorose untere Schranken ermittelt. Detaillierte numerische Ergebnisse der ESC-Bibliothek können der Tabelle B.6 entnommen werden. Wie in Zhao *et al.* [110] wurde zu allen berechneten negativen Energiewerten in Tabelle B.6 die Abstoßungsenergie der Kerne<sup>5</sup> hinzuaddiert. Die rigorosen Fehlerschranken der optimalen Zielfunktionswerte werden jeweils mit  $\bar{E}$  und  $\underline{E}$  bezeichnet. Der Wert  $\underline{E}_2$  ist die rigorose untere Fehlerschranke, die mit den elementweisen a priori Schranken  $\bar{y}$  gemäß Korollar 3 berechnet wurde. Alle Energien sind in Hartree angegeben. Die Größe  $t_s$  bezeichnet die

<sup>4</sup>Die einzige Ausnahme ist das Molekül *CF*. Die Problemdata im SDPA-Format erschienen inkonsistent (zum Beispiel war die Elektronenanzahl  $N = 12$ , statt 15) und führten zu fehlerhaften Ausgaben.

<sup>5</sup>engl. nuclear repulsion energy

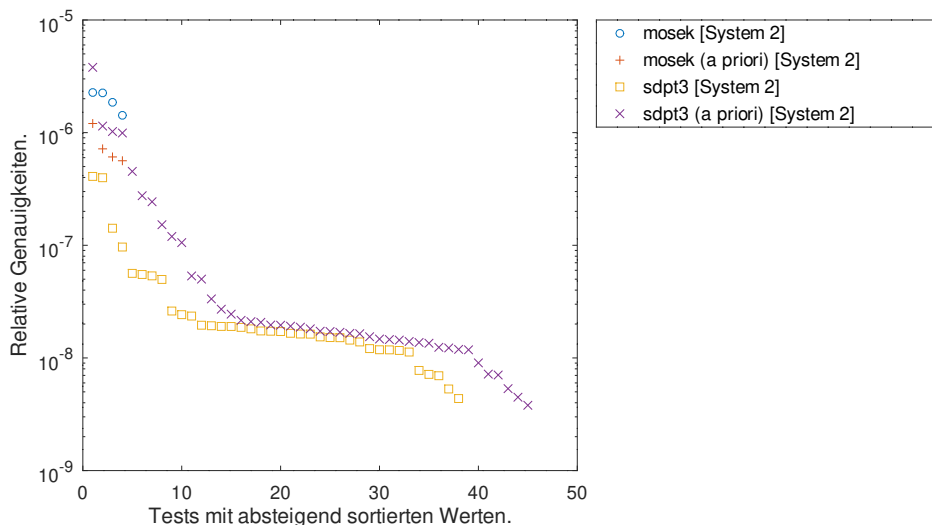


Abbildung 4.2.: Relative Genauigkeiten  $\mu(\bar{E}, \underline{E})$  und  $\mu(\bar{E}, \underline{E}_2)$ , letztere unter Ausnutzung der a priori Schranken, für die ESC-Bibliothek.

Rechenzeiten in Sekunden für die approximative Lösung und die Zeiten in Sekunden  $\bar{t}$ ,  $\underline{t}$  und  $\underline{t}_2$  korrespondieren jeweils zu  $\bar{E}$ ,  $\underline{E}$  und  $\underline{E}_2$ .

Eine Zusammenfassung der Tabelle B.6 erfolgt durch die Abbildungen 4.2 bis 4.4. Die Abbildung 4.2 zeigt, dass durchschnittlich sieben bis acht Dezimalstellen korrekt sind. Das Molekül mit den schlechtesten Werten ist  $C_2^+$ . Hier konnten lediglich sechs korrekte Dezimalstellen verifiziert werden.

Die Tabelle B.6 enthält ebenfalls die Laufzeiten der Berechnungen. Unter Ausnutzung der a priori Schranken (Korollar 3) bewegt sich der relative Berechnungsaufwand  $\underline{t}_2/t_s$  zwischen  $10^{-3}$  und  $10^{-5}$  und ist somit vernachlässigbar. Ohne die a priori Schranken, ist der Berechnungsaufwand für die rigorosen unteren Fehlerschranken  $\underline{E}$  durchschnittlich vergleichbar mit dem Rechenaufwand  $t_s$  der approximativen Lösungen, welcher zwischen zwei Minuten und zehn Stunden variiert. Dies verdeutlicht die Abbildung 4.3. Für die Berechnung der oberen Fehlerschranke  $\bar{E}$  war in fast allen Fällen lediglich ein geringer Berechnungsaufwand  $\bar{t}/t_s$  notwendig, wie die Abbildung 4.4 zeigt. Zusammenfassend wird festgestellt, dass nur ein geringer Mehraufwand für die Berechnung von engen rigorosen Fehlerschranken für die Grundzustandsenergie mittels der DSDP-Relaxation bei der Berechnung der Elektronenstruktur von Molekülen notwendig ist. Insbesondere hat sich der Löser SDPT3 gegenüber MOSEK als numerisch vorteilhafter erwiesen, wenngleich MOSEK schneller approximative Lösungen berechnet.

#### 4.4.2. RDM-Bibliothek

Die RDM-Bibliothek enthält acht zusätzliche Optimierungsprobleme, die alle, verglichen mit der ESC-Bibliothek, von größerer Dimension sind. In fünf Fällen sogar deutlich grö-

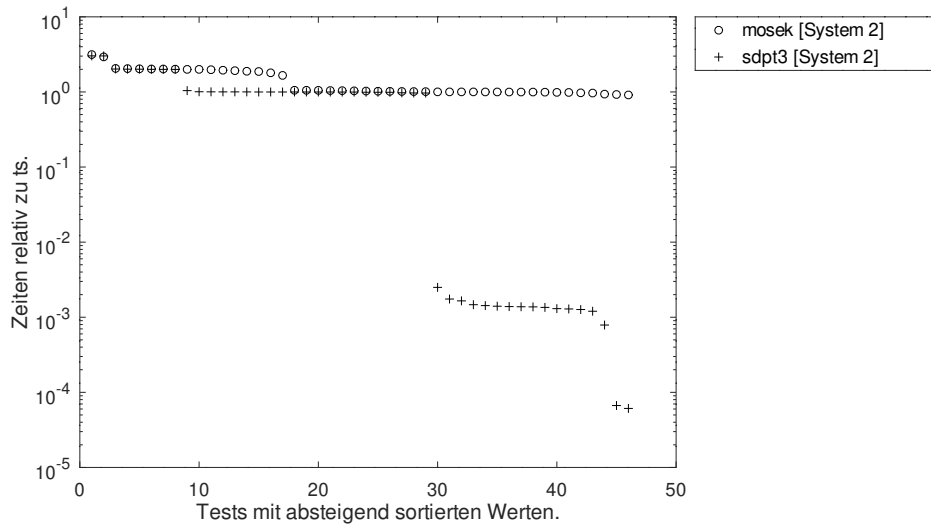


Abbildung 4.3.: Zeiten für die Berechnung der unteren Fehlerschranke  $\underline{t}$  der ESC-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

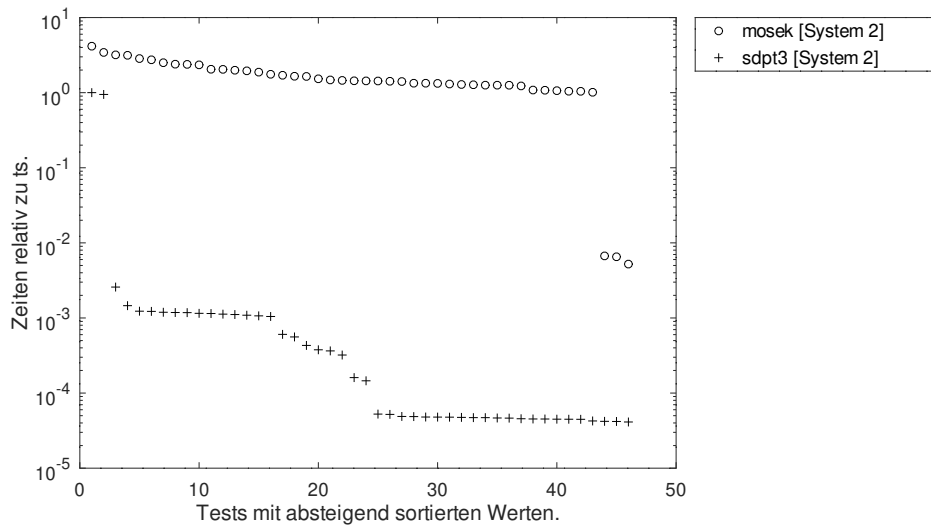


Abbildung 4.4.: Zeiten für die Berechnung der oberen Fehlerschranke  $\bar{t}$  der ESC-Bibliothek relativ zur Berechnungszeit der approximativen Lösung  $t_s$ .

ber. Die Größen der resultierenden DSDP-Relaxationen variiert zwischen 2 598 370 und 19 814 462 Variablen, sowie zwischen 7230 und 27 888 Nebenbedingungen. Im Gegensatz zur ESC-Bibliothek wird in den Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit die  $T2'$ -Bedingung genutzt (siehe dazu den Unterabschnitt 4.1.2).

Wie bei der ESC-Bibliothek wurden die numerischen Ergebnisse der RDM-Bibliothek [73] mithilfe des semidefiniten Löfers SDPARA [105] berechnet, der keine Gleichungsnebenbedingungen unterstützt. Die Autoren ersetzten jede Gleichungsnebenbedingung durch zwei Ungleichungen ohne jedoch eine Toleranz  $\varepsilon > 0$  zu nutzen, sodass die Slater-Bedingung (Theorem 2) verletzt ist. Um dieser Verletzung entgegen zu wirken, wurden in dieser Arbeit kleine Toleranzen  $\varepsilon = 10^{-7}$ , wie bereits in Zhao *et al.* [110], eingefügt.

Für die RDM-Bibliothek wurden für alle Optimierungsprobleme approximative Lösungen und eine rigorose untere Fehlerschranke ermittelt. Detaillierte numerische Ergebnisse sind in der Tabelle 4.1 aufgeführt. Wie im vorhergehenden Abschnitt werden die berechneten rigorosen Fehlerschranken in den Spalten  $\bar{E}$ ,  $\underline{E}$  und  $\underline{E}_2$  aufgeführt und  $\underline{E}_2$  bezeichnet die rigorose untere Fehlerschranke, welche die a priori Eigenwertschranken aus dem Abschnitt 4.3.2 nutzt. Die relativen Genauigkeiten der rigorosen Fehlerschranken (3.5) sind in der Spalte  $\mu(\bar{E}, \underline{E})$  zu finden. Schlussendlich zeigt Tabelle 4.2 die Problemdimensionen und die Rechenzeiten  $t_s$ ,  $\bar{t}$ ,  $\underline{t}$  und  $t_2$  um jeweils die approximativen Lösungen,  $\bar{E}$ ,  $\underline{E}$  und  $\underline{E}_2$  zu berechnen. Die Laufzeiten für die Berechnungen der approximativen Lösungen  $t_s$  variieren für MOSEK zwischen zwei Stunden bis zu drei Tagen. Für die approximative Lösung von H2O benötigte SDPT3 etwas mehr als fünfzehn Tage.

Auch für die RDM-Bibliothek lässt sich zusammenfassend feststellen, dass die berechneten Ergebnisse und Laufzeiten ähnlich wie bei der ESC-Bibliothek ausfallen.

Tabelle 4.1.: Rigorose obere und untere Fehlerschranken für die RDM-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2 und alle Energien sind in Hartree angegeben.

Name	Löser	$\underline{E}_2$	$\underline{E} - \underline{E}_2$	$\bar{E}$	$\mu(\bar{E}, \underline{E}_2)$	$\mu(\bar{E}, \underline{E})$
CH	mosek	$-3.833\,768\,62 \times 10^1$	$-1.07 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN
C	mosek	$-3.773\,659\,30 \times 10^1$	$-6.22 \times 10^{-5}$	$-3.773\,658\,15 \times 10^1$	$3.03 \times 10^{-7}$	$1.95 \times 10^{-6}$
F-	mosek	$-9.959\,745\,83 \times 10^1$	$-3.53 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN
H2O	mosek	$-7.615\,620\,46 \times 10^1$	$-2.61 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN
H2O	sdpt3	$-7.615\,617\,31 \times 10^1$	$5.27 \times 10^{-9}$	$-7.615\,617\,24 \times 10^1$	$9.39 \times 10^{-9}$	$9.32 \times 10^{-9}$
HF	mosek	$-1.001\,606\,27 \times 10^2$	$-2.42 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN
NH	mosek	$-5.496\,486\,42 \times 10^1$	$-1.41 \times 10^{-5}$	$-5.496\,485\,95 \times 10^1$	$8.63 \times 10^{-8}$	$3.42 \times 10^{-7}$
Ne	mosek	$-1.286\,389\,99 \times 10^2$	$-1.17 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN
O2+	mosek	$-1.487\,954\,51 \times 10^2$	$-9.16 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN

Tabelle 4.2.: Problemdimensionen und Rechenzeiten der RDM-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2.

Name	$m$	$n$	Löser	$t_s$	$\underline{t}_2/t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\bar{t}/t_s$
CH	15018	7811142	mosek	50513.03	$9.75 \times 10^{-5}$	1.14	1.23
C	7230	2598370	mosek	6459.24	$2.08 \times 10^{-4}$	$9.48 \times 10^{-1}$	1.92
F-	20709	12665715	mosek	115674.27	$8.09 \times 10^{-5}$	$8.92 \times 10^{-1}$	1.49
H2O	27888	19814462	mosek	256284.43	$6.73 \times 10^{-5}$	$9.98 \times 10^{-1}$	1.14
H2O	27888	19814462	sdpt3	1332226.23	$1.31 \times 10^{-5}$	$9.19 \times 10^{-1}$	$1.79 \times 10^{-5}$
HF	15018	7811142	mosek	44933.73	$1.09 \times 10^{-4}$	1.05	1.32
NH	15018	7811142	mosek	47206.22	$1.04 \times 10^{-4}$	1.00	1.99
Ne	7230	2598370	mosek	5718.28	$2.16 \times 10^{-4}$	1.01	1.26
O2+	7230	2598370	mosek	6065.10	$2.28 \times 10^{-4}$	1.00	1.57

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit leistet mit der weiterentwickelten Software VSDP und rigorosen Fehlerschranken für das Elektronenstrukturproblem ein Beitrag zur Verifikation konischer Optimierungsprobleme.

Das zweite Kapitel stellte das konische Optimierungsproblem mitsamt den von Jansson entwickelten rigorosen Fehlerschranken und Zertifikaten der Unzulässigkeit vor, welche die theoretischen Grundlagen von VSDP bilden. Im dritten Kapitel wurden diese Grundlagen der konischen Optimierung und deren Verifikation für die Spezialfälle der linearen und semidefiniten Programmierung konkretisiert, sodass VSDP approximative Lösungen solcher Problemstellungen a posteriori verifizieren kann. Die Verifikation nutzt dabei die Intervallarithmetik als nützliches Werkzeug, um die Lösungen von Gleichungssystemen, die Eigenwertberechnungen und insgesamt alle Rundungsfehler der Gleitkommaarithmetik bei der Verifikation rigoros einzuschließen. Ausführliche numerische Tests von insgesamt fünf Testbibliotheken, die jeweils unterschiedliche praktische Problemstellungen als konisches Optimierungsproblem modellieren, wurden vorgestellt. Die Tests zeigen, dass heute verfügbare Lösungsprogramme für konische Optimierungsprobleme, darunter CSDP, MOSEK, SDPA, SeDuMi und SDPT3, teilweise unzulässige approximative Lösungen berechnen<sup>1</sup>. Aus diesem Grund ist eine nachträgliche Verifikation mit VSDP sinnvoll. Dabei ist Aufwand der Verifikation im Vergleich zum Aufwand der approximativen Lösung in vielen Fällen vernachlässigbar.

Im vierten Kapitel wurde gezeigt, wie das Elektronenstrukturproblem ausgehend von der zeitunabhängigen Schrödingergleichung als relaxiertes konisches Optimierungsproblem formuliert werden kann. Das dabei entstehende konische Optimierungsproblem berechnet eine untere Schranke für das Elektronenstrukturproblem. Eine obere Schranke kann durch die Hartree-Fock-Approximation berechnet und verifiziert werden, siehe dazu Veeraraghavan und Mazziotti [64, 100].

Die physikalischen und numerischen Approximationen bei der Relaxation des Elektronenstrukturproblems zu einem konischen Optimierungsproblem bieten nach wie vor Raum für Verbesserungen. Bei der Diskretisierung der Problemstellung werden  $N$  Elektronen auf  $r$  Spin-Orbitalen mit  $r > N$  variiert. Das in dieser Arbeit verwendete konische Optimierungsproblem (4.28) skaliert trotz der Nutzung kompaktifizierter Matrizen und symmetrischer Vektorisierung mit  $\mathcal{O}(r^4)$  unabhängig von den genutzten Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit, siehe Zhao [109, S. 35]. Hier besteht die Möglichkeit weitere Bedingungen der  $N$ -Darstellbarkeit in Betracht zu ziehen, die z.B. Mazziotti [57, 61, 62] beschreibt.

---

<sup>1</sup>Dies spiegelt sich in den numerischen Ergebnissen dahingehend wider, dass VSDP bei der Anwendung von Algorithmus 1 nachiterieren muss.

Schon bei verhältnismäßig wenigen Spin-Orbitalen sind die Problemdimensionen bereits extrem groß, was für die Modellierung einer größeren Anzahl von Spin-Orbitalen oder größeren  $N$ -Elektronen-Molekülen hinderlich ist. Die sehr aktive Forschergruppe um Mazziotti berichtete in den vergangenen Jahren über Fortschritte durch eine bessere Ausnutzung der Struktur der resultierenden konischen Optimierungsprobleme und durch die Verwendung von Lösungsverfahren erster Ordnung für semidefinite Programme [56, 101]. VSDP kann in der Zukunft weiterentwickelt werden, um mit diesen Lösungsverfahren zu arbeiten, die von bisher üblichen Methoden abweichen. Um mit Standardlösungsverfahren für konische Optimierungsprobleme Fortschritte zu erzielen, kann neben der Nutzung von Computersystemen mit größerem Hauptspeicher, die Rechenzeit durch verbesserte Parallelisierung des approximativen Lösungsverfahrens verringert werden. Die Software SDPARA [104] nutzt bereits Parallelisierungstechniken zu diesem Zweck aus.

Zusammenfassend wird festgestellt, dass die in dieser Arbeit weiterentwickelte Software VSDP einen nützlichen Beitrag für die Verifikation konischer Optimierungsprobleme leistet. Ebenso lassen sich durch VSDP approximative Lösungen des Elektronenstrukturproblems mit in dieser Arbeit hergeleiteten a priori Schranken mit vernachlässigbarem Mehraufwand a posteriori rigoros verifizieren.

# A. VSDP-2018 Benutzungseinführung

Die Software VSDP (**V**erified **S**emi**D**efinite-quadratic-linear **P**rogramming) in der Version 2018, ist eine freie GNU Octave/MATLAB<sup>®</sup> Erweiterung zur Berechnung rigoroser Fehlerschranken und rigoroser Zertifikate der Unzulässigkeit für konische Optimierungsprobleme. Diese Benutzungseinführung umfasst die Installation der Software sowie die Dateneingabe und Berechnungen anhand von zwei kleineren Beispielen.

## A.1. Installation

Für die Benutzung von VSDP werden folgende Programme benötigt:

- GNU Octave [23] (Version 4.4.0 oder neuer) oder MATLAB<sup>®</sup> (Version R2017a oder neuer),
- die Intervallarithmetik Software INTLAB [84],
- sowie eine Software zum approximativen Lösen konischer Optimierungsprobleme. VSDP unterstützt zur Zeit der Erstellung dieser Arbeit die folgenden Löser:
  - CSDP (6.2.0) [7],
  - GLPK (in GNU Octave enthalten),
  - LINPROG (in MATLAB<sup>®</sup> enthalten),
  - lp\_solve (5.5.2.5)<sup>1</sup>,
  - MOSEK (8.1.0.62) [4],
  - SDPA (7.3.8) [27, 106],
  - SDPT3 (4.0) [91, 92, 95] und
  - SeDuMi (1.32) [88]

VSDP selbst kann von der Webseite <https://vsdp.github.io> unter den Bedingungen der freien GPLv3<sup>2</sup> Lizenz heruntergeladen werden. Die dort erhältliche Datei `vsdp-2018-master.zip` ist an einen beliebigen geeigneten Ort zu extrahieren.

Im Folgenden wird unter der Verwendung von GNU Octave 4.4.1 kurz die Funktionsweise von VSDP erläutert. Der Aufruf

---

```
install_vsdp;
```

---

<sup>1</sup><http://lpsolve.sourceforge.net/5.5/index.htm>

<sup>2</sup><https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.en.html>



$n$  Matrix-Blöcke der  $m = 2$  Nebenbedingungen werden als sogenannte „Cell-Arrays“ eingegeben. Die Matrix-Blöcke der Zielfunktion sind durch  $C\{j\}$  mit  $j = 1, \dots, n$  gegeben und die Matrix-Blöcke der Nebenbedingungen durch  $A\{i, j\}$  mit  $i = 1, \dots, m$ . Die Kegelstruktur selbst wird im Folgenden durch das Cell-Array `blk` definiert, wobei jede Zeile einen Kegel-Typ und dessen Dimension definiert. Die Zeile `'s'`, 2 z.B. steht für den Kegel  $S_+^2$ .

---

```

1 blk = {'s', 2;
2       's', 3;
3       's', 2};
4
5 C{1} = -[2 1;
6         1 2];
7 C{2} = -[3 0 1;
8         0 2 0;
9         1 0 3];
10 C{3} = zeros (2);
11
12 b = [1; 2];
13
14 A{1,1} = [3 1;
15          1 3];
16 A{1,2} = zeros (3);
17 A{1,3} = [1 0;
18          0 0];
19 A{2,1} = zeros (2);
20 A{2,2} = [3 0 1;
21          0 4 0;
22          1 0 5];
23 A{2,3} = [0 0;
24          0 1];
25
26 obj = vsdp (blk, A, C, b)

```

---

*Ausgabe:*

```

obj =
  VSDP conic programming problem with dimensions:

      [n,m] = size(obj.At)
      n     = 12 variables
      m     =  2 constraints

and cones:

```

```
K.s = [ 2, 3, 2 ]
```

```
Compute an approximate solution:
```

```
'obj = obj.solve()'
```

```
Detailed information: 'obj.info()'
```

Der Aufruf `obj = vsdp (blk, A, C, b)` erstellt das VSDP-Objekt `obj`. Wird die Ausgabe nicht durch ein Semikolon unterdrückt, erfolgt ein kurzer Überblick über das gespeicherte konische Optimierungsproblem im Ausgabefenster. Detaillierte Informationen zu dem gespeicherten konischen Optimierungsproblem können über den Befehl `obj.info()` in Erfahrung gebracht werden.

Eine weitere Methode zur Dateneingabe ist das vektorisierte Format von VSDP 2012 [30], welches dem bekannten Eingabeformat von SeDuMi [88] sehr ähnlich ist. Auch Dateien im MPS<sup>3</sup> und sparse SDPA-Format [27, S. 16–17], können mit den VSDP Funktionen

---

```
obj = vsdp.from_mps_file ('file.mps')  
obj = vsdp.from_sdpa_file ('file.dat-s')
```

---

eingelezen werden.

Nach der Dateneingabe kann VSDP optional das Optimierungsproblem (Beispiel 1) auf rein diagonale semidefinite Blöcke prüfen und diese in lineare Ungleichungsbedingungen konvertieren. Dies spart Speicherplatz und verbessert ggf. die Qualität der Approximationen und somit auch die der rigorosen Fehlerschranken. Ebenso wird für einen konvertierten Block eine Überschätzung durch die Eigenwerteinschließung mit dem Programm 3.5 vermieden. Der folgende Befehl führt solche Konvertierungen automatisch durch und gibt lediglich eine Warnung bei Modifikationen aus.

---

```
obj = obj.analyze (true);
```

---

*Ausgabe:*

```
warning: analyze: K.s(3) seems to only have diagonal  
elements.  
--> Convert it to LP block.
```

Wie erwartet wurde der letzte Block im Beispiel 1 als rein diagonal erkannt und automatisch in einen linearen Block konvertiert. Der Kegel des von VSDP geänderten Optimierungsproblems<sup>4</sup> ist  $\mathcal{K} = \mathbb{R}_+^2 \times \mathbb{S}_+^2 \times \mathbb{S}_+^3$ . Die Reihenfolge der gespeicherten Kegel

<sup>3</sup><http://lpsolve.sourceforge.net/5.5/mps-format.htm>

<sup>4</sup>In Borchers [7] ist der letzte semidefinite Block als rein diagonal gekennzeichnet und wurde nur zu Demonstrationszwecken in (Beispiel 1) verändert.



```

and cones:

    K.l = 2
    K.s = [ 2, 3 ]

obj.solutions.approximate:

    Solver 'sdpt3': Normal termination, 1.1 seconds.

    c'*x = -2.749999966056186e+00
    b'*y = -2.750000014595577e+00

obj.solutions.rigorous_lower_bound:

    Normal termination, 0.1 seconds, 0 iterations.

    fL = -2.750000014595577e+00

obj.solutions.rigorous_upper_bound:

    Normal termination, 0.1 seconds, 0 iterations.

    fU = -2.749999966061940e+00

Detailed information: 'obj.info()'

```

In der Übersicht werden die berechneten Approximationen und rigorosen Fehlerschranken dargestellt. Zusätzlich besteht der Zugriff auf die einzelnen Ergebniskomponenten, um diese ggf. weiter zu verarbeiten. So lassen sich beispielsweise die drei konischen Blöcke der approximativen Lösung wie folgt konstruieren

---

```

format short
x = vsdp_indexable (full (obj.solutions.approximate.x),
    obj);
X1 = vsdp.smat ([], x.s(1), 1/2) % SDP Block 1
X2 = vsdp.smat ([], x.s(2), 1/2) % SDP Block 2
X3 = x.l % LP Block

```

---

*Ausgabe:*

```
X1 =
  0.12500    0.12500
  0.12500    0.12500

X2 =
  0.66668    0.00000   -0.00002
  0.00000    0.00000    0.00000
 -0.00002    0.00000    0.00000

X3 =
  0.0000000090495
  0.0000000067871
```

Die Hilfsklasse `vsdp_indexable` dient dazu die Blöcke einer vektorisierten Block-strukturierten Variable ohne Indexberechnungen zugänglich und die zuvor erwähnte Reihenfolge der einzelnen Blöcke transparent zu machen. Genau so wie `obj.K.s(1)` die Blockgröße des ersten semidefiniten Blocks ausgibt, kann wie im vorherigen Programm gezeigt, mit `x.s(1)` der erste vektorisierte semidefinite Block des approximativen Ergebnisses extrahiert werden. Die Funktion `vsdp.smat` erzeugt analog zu (2.4) aus der Eingabe eine symmetrische Matrix.

Auch die rigorose Einschließung des dual zulässigen Punktes  $Y$  kann zur Weiterverarbeitung aus dem VSDP-Objekt extrahiert werden. Das folgende Beispiel zeigt das rigorose Einschließungsintervall in Mittelpunkt-Radius-Darstellung (2.10)

---

```
format midrad
Y = obj.solutions.rigorous_lower_bound.y
```

---

*Ausgabe:*

```
intval Y =
< -0.7500,    0.0001>
< -1.0000,    0.0001>
```

## A.4. Rigorose Zertifikate der Unzulässigkeit

Im Folgenden wird ein weiteres konisches Optimierungsproblem in SDP-Formulierung aus Jansson [41] mit zwei Nebenbedingungen und dem Kegel  $\mathcal{K} = \mathbb{S}_+^2$  betrachtet, welches von zwei fest gewählten Parametern  $\text{DELTA} = \delta = 0.1$  und  $\text{EPSILON} = \varepsilon = -0.01$  abhängt.

$$\begin{array}{l}
\text{Minimiere} \\
\text{u.d.N.}
\end{array}
\left\langle \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, X \right\rangle \right. \\
\left. \left\langle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, X \right\rangle = \varepsilon, \right. \\
\left. \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \delta \end{pmatrix}, X \right\rangle = 1, \right. \\
X \in \mathbb{S}_+^2.
\end{array}
\quad (\text{Beispiel 2})$$

Die Dateneingabe erfolgt erneut im VSDP 2006 Format:

---

```

EPSILON = -0.01;
DELTA = 0.1;
blk(1,:) = {'s'; 2};
C{1,1} = [0 0; 0 0];
A{1,1} = [1 0; 0 0];
A{2,1} = [0 1; 1 DELTA];
b = [EPSILON; 1];

obj = vsdp (blk, A, C, b);
obj.options.VERBOSE_OUTPUT = false;

```

---

Aus der ersten Gleichungsnebenbedingung folgt  $x_1 = \varepsilon < 0$ , was im Widerspruch zu  $X \in \mathbb{S}_+^2$  steht. Somit ist das primale Problem unzulässig. Das Lagrange duale Problem zu [Beispiel 2](#) lautet

$$\begin{array}{l}
\text{Maximiere} \\
\text{u.d.N.}
\end{array}
\begin{array}{l}
\varepsilon y_1 + y_2 \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - y_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - y_2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y_1 & -y_2 \\ -y_2 & -\delta y_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{S}_+^2, \\
y_1, y_2 \in \mathbb{R}.
\end{array}$$

Aus dem ersten Hauptminor der dualen Nebenbedingung folgt für die duale Zulässigkeit  $-y_1 \geq 0$  und aus der gesamten Matrix  $y_2(\delta y_1 - y_2) \geq 0$ . Die Zielfunktion strebt für  $y_1 \rightarrow -\infty$  und  $y_2 = 0$  gegen  $+\infty$ . Somit ist das duale Problem unbeschränkt und jeder Punkt  $\hat{y} = (y_1, 0)$  mit  $y_1 \leq 0$  nach Satz 1 ein Zertifikat der primalen Unzulässigkeit.

Ein rigoroses Zertifikat der primalen Unzulässigkeit nach Korollar 1 kann für das [Beispiel 2](#) mit der VSDP-Funktion `check_primal_infeasible` berechnet werden.

---

```

obj = obj.solve ('sdpt3') ...
    .rigorous_upper_bound () ...
    .check_primal_infeasible () ...
    .check_dual_infeasible ()

```

---

*Ausgabe:*

```
warning: rigorous_upper_bound: Conic solver could not find a solution
for perturbed problem
```

```
obj =
```

```
VSDP conic programming problem with dimensions:
```

```
[n,m] = size(obj.At)
n      = 3 variables
m      = 2 constraints
```

```
and cones:
```

```
K.s = [ 2 ]
```

```
obj.solutions.approximate:
```

```
Solver 'sdpt3': Primal infeasible, 0.9 seconds.
```

```
c'*x = 0.0000000000000000e+00
```

```
b'*y = 1.0000000000000000e+00
```

```
Compute a rigorous lower bound:
```

```
'obj = obj.rigorous_lower_bound()'
```

```
obj.solutions.rigorous_upper_bound:
```

```
Solver 'sdpt3': Unknown, 1.0 seconds, 1 iterations.
```

```
fU = Inf
```

```
obj.solutions.certificate_primal_infeasibility:
```

```
Normal termination, 0.0 seconds.
```

```
A certificate of primal infeasibility 'y' was found.
```

```
The conic problem is primal infeasible.
```

```
obj.solutions.certificate_dual_infeasibility:
```

```
Normal termination, 0.0 seconds.
```

```
NO certificate of dual infeasibility was found.
```

```
Detailed information: 'obj.info()'
```

Bereits bei der approximativen Lösung erkennt SDPT3 eine mögliche primale Unzulässigkeit von [Beispiel 2](#). Der Versuch eine rigorose obere Fehlerschranke mit der VSDP-Funktion `rigorous_upper_bound` zu berechnen scheitert. Dies verdeutlicht bereits die

Warnung zu Beginn der Ausgabe und die obere Fehlerschranke auf Unendlich gesetzt (`fU = Inf`).

Mit der approximativen dualen Lösung  $yt = \tilde{y}$

---

```
yt = obj.solutions.approximate.y
```

---

*Ausgabe:*

```
yt =
  -100.007983163
   -0.000079832
```

versucht die VSDP-Funktion `check_primal_infeasible` ein rigoroses Zertifikat der primalen Unzulässigkeit zu berechnen. Dazu erfolgt gemäß Korollar 1 eine verifizierte Auswertung der Bedingungen (2.18b) mittels Intervallarithmetik  $yy = [\tilde{y}]$

---

```
format infsup
yy = obj.solutions.certificate_primal_infeasibility.y
```

---

*Ausgabe:*

```
intval yy =
 [ -100.0080, -100.0079]
 [  -0.0001,  -0.0000]
```

Gemäß Korollar 1 ist  $\langle \tilde{y}, b \rangle$  positiv

---

```
obj.b' * yy
```

---

*Ausgabe:*

```
intval ans =
 [ 0.9999, 1.0000]
```

und  $-A^*\tilde{y}$  liegt im Kegel der symmetrisch positiv semidefiniten Matrizen  $\mathbb{S}_+^2$

---

```
-yy(1) * A{1,1} - yy(2) * A{2,1}
```

---

*Ausgabe:*

```
intval ans =
 [ 100.0079, 100.0080] [ 0.0000, 0.0001]
 [ 0.0000, 0.0001] [ 0.0000, 0.0001]
```

Der Fall, dass zu einer approximativen primalen Lösung  $\tilde{X}$  kein rigoroses Zertifikat der dualen Zulässigkeit von VSDP bewiesen werden kann, wird durch den Funktionsaufruf `check_dual_infeasible` gezeigt

---

```
obj.solutions.certificate_dual_infeasibility
```

---

*Ausgabe:*

```
ans =  
    Normal termination, 0.0 seconds.  
  
    NO certificate of dual infeasibility was found.
```

## A.5. Die wichtigsten Funktionen

Zum Abschluss dieses Kapitels seien noch einmal die fünf grundlegenden Funktionen von VSDP 2018 mit den zugehörigen theoretischen Grundlagen aufgelistet:

- `vsdp.solve()` bestimmt eine approximative Lösung.
- `vsdp.rigorous_lower_bound( $\bar{x}$ )` bestimmt eine rigorose untere Fehlerschranke gemäß Theorem 3, d.h. Korollar 2 für semidefinite Programme und Programm 3.1 für lineare Programme. Sind keine a priori Schranken ( $\bar{x}$ ) bekannt, wird der Algorithmus 1 verwendet.
- `vsdp.rigorous_upper_bound( $\bar{y}$ )` bestimmt eine rigorose obere Fehlerschranke gemäß Theorem 4, d.h. Korollar 3 für semidefinite Programme und Programm 3.2 für lineare Programme. Sind keine a priori Schranken ( $\bar{y}$ ) bekannt, wird der Algorithmus 1 verwendet.
- `vsdp.check_primal_infeasible()` bestimmt ein rigoroses Zertifikat der primalen Unzulässigkeit gemäß Korollar 1. Für den Spezialfall der linearen Programme siehe Programm 3.3.
- `vsdp.check_dual_infeasible()` bestimmt ein rigoroses Zertifikat der primalen Unzulässigkeit gemäß Algorithmus 2. Für den Spezialfall der linearen Programme siehe Programm 3.4.

Für weiterführende und technische Details zur Implementierung und Benutzung von VSDP sei der Leser auf das Benutzerhandbuch [43] verwiesen.

## B. Tabellen

Tabelle B.1.: Rigorose untere und obere Fehlerschranken für die SDPLIB-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 1. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 3.3.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
arch0	174	13215	csdp	$-5.665\,172\,74 \times 10^{-1}$	$-5.665\,170\,46 \times 10^{-1}$	$2.28 \times 10^{-7}$	2.39	1.02	2.06
arch0	174	13215	sdpa	$-5.665\,803\,52 \times 10^{-1}$	$+\infty$	NaN	6.43	$9.94 \times 10^{-1}$	$1.00 \times 10^1$
arch0	174	13215	sdpt3	$-5.665\,172\,74 \times 10^{-1}$	$-5.665\,169\,95 \times 10^{-1}$	$2.79 \times 10^{-7}$	2.16	$1.26 \times 10^{-2}$	1.03
arch0	174	13215	sedumi	$-5.665\,172\,74 \times 10^{-1}$	$-5.665\,145\,59 \times 10^{-1}$	$2.71 \times 10^{-6}$	2.73	1.11	1.00
arch2	174	13215	csdp	$-6.715\,154\,09 \times 10^{-1}$	$-6.715\,153\,85 \times 10^{-1}$	$2.33 \times 10^{-8}$	2.33	1.02	1.04
arch2	174	13215	sdpa	$-6.715\,485\,75 \times 10^{-1}$	$+\infty$	NaN	6.33	1.01	$1.02 \times 10^1$
arch2	174	13215	sdpt3	$-6.715\,154\,09 \times 10^{-1}$	$-6.715\,153\,74 \times 10^{-1}$	$3.53 \times 10^{-8}$	2.09	$1.34 \times 10^{-2}$	1.07
arch2	174	13215	sedumi	$-6.715\,154\,28 \times 10^{-1}$	$-6.715\,141\,99 \times 10^{-1}$	$1.23 \times 10^{-6}$	2.10	1.03	1.05
arch4	174	13215	csdp	$-9.726\,274\,72 \times 10^{-1}$	$-9.726\,268\,82 \times 10^{-1}$	$5.90 \times 10^{-7}$	2.23	1.03	1.04
arch4	174	13215	sdpa	$-9.727\,187\,82 \times 10^{-1}$	$+\infty$	NaN	6.32	1.01	$1.02 \times 10^1$
arch4	174	13215	sdpt3	$-9.726\,274\,19 \times 10^{-1}$	$-9.726\,268\,76 \times 10^{-1}$	$5.44 \times 10^{-7}$	1.93	$1.54 \times 10^{-2}$	1.08
arch4	174	13215	sedumi	$-9.726\,274\,18 \times 10^{-1}$	$-9.726\,249\,76 \times 10^{-1}$	$2.44 \times 10^{-6}$	2.18	1.03	1.05
arch8	174	13215	csdp	-7.056 980 05	-7.056 979 34	$1.00 \times 10^{-7}$	2.65	1.05	1.08
arch8	174	13215	sdpa	-7.058 206 12	$+\infty$	NaN	6.40	1.01	9.98
arch8	174	13215	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2.14	1.03	1.06
arch8	174	13215	sedumi	-7.056 980 05	-7.056 954 91	$3.56 \times 10^{-6}$	2.62	1.01	1.04
control10	1326	6325	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	36.48	1.07	$9.13 \times 10^{-1}$
control10	1326	6325	sdpa	$-4.602\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	90.82	$9.11 \times 10^{-1}$	1.45
control10	1326	6325	sdpt3	$-3.853\,305\,71 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	38.81	$9.42 \times 10^{-4}$	$9.04 \times 10^{-1}$
control10	1326	6325	sedumi	$-3.853\,309\,40 \times 10^1$	$-3.852\,556\,50 \times 10^1$	$1.95 \times 10^{-4}$	40.30	$9.07 \times 10^{-4}$	$9.42 \times 10^{-1}$
control11	1596	7645	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	51.47	1.00	1.15
control11	1596	7645	sdpa	$-3.432\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	130.46	1.01	1.40
control11	1596	7645	sdpt3	$-3.195\,868\,82 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	47.67	$8.19 \times 10^{-4}$	$9.72 \times 10^{-1}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
control11	1596	7645	sedumi	$-3.195\,870\,08 \times 10^1$	$-3.195\,402\,48 \times 10^1$	$1.46 \times 10^{-4}$	66.96	$5.94 \times 10^{-4}$	1.01
control1	21	70	csdp	$-1.778\,462\,67 \times 10^1$	$-1.778\,462\,65 \times 10^1$	$1.53 \times 10^{-8}$	0.04	3.77	6.55
control1	21	70	sdpa	$-1.800\,000\,00 \times 10^1$	$-3.770\,869\,03$	1.31	0.08	3.04	3.24
control1	21	70	sdpt3	$-1.778\,462\,67 \times 10^1$	$-1.778\,462\,65 \times 10^1$	$1.58 \times 10^{-8}$	0.91	$2.58 \times 10^{-2}$	4.29
control1	21	70	sedumi	$-1.778\,462\,68 \times 10^1$	$-1.778\,462\,63 \times 10^1$	$2.97 \times 10^{-8}$	0.66	$3.68 \times 10^{-2}$	1.13
control2	66	265	csdp	$-8.300\,000\,02$	$-8.299\,999\,59$	$5.15 \times 10^{-8}$	0.13	$1.90 \times 10^{-1}$	3.31
control2	66	265	sdpa	$-9.267\,000\,00$	$+\infty$	NaN	0.23	2.54	$1.28 \times 10^1$
control2	66	265	sdpt3	$-8.300\,000\,20$	$+\infty$	NaN	1.79	$1.38 \times 10^{-2}$	1.05
control2	66	265	sedumi	$-8.300\,000\,05$	$-8.299\,998\,03$	$2.44 \times 10^{-7}$	0.81	$3.04 \times 10^{-2}$	2.11
control3	136	585	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.40	1.14	1.15
control3	136	585	sdpa	$-1.374\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.62	3.36	9.01
control3	136	585	sdpt3	$-1.363\,326\,74 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.82	$8.93 \times 10^{-3}$	1.03
control3	136	585	sedumi	$-1.363\,326\,65 \times 10^1$	$-1.363\,325\,55 \times 10^1$	$8.09 \times 10^{-7}$	2.65	$9.55 \times 10^{-3}$	2.04
control4	231	1030	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.66	1.36	1.40
control4	231	1030	sdpa	$-2.275\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.54	1.05	6.58
control4	231	1030	sdpt3	$-1.979\,423\,11 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	4.29	$5.96 \times 10^{-3}$	$9.82 \times 10^{-1}$
control4	231	1030	sedumi	$-1.979\,423\,23 \times 10^1$	$-1.979\,417\,84 \times 10^1$	$2.72 \times 10^{-6}$	2.20	$1.17 \times 10^{-2}$	1.05
control5	351	1600	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.84	1.03	1.09
control5	351	1600	sdpa	$-1.819\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	3.58	$9.97 \times 10^{-1}$	4.66
control5	351	1600	sdpt3	$-1.688\,360\,38 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	6.54	$4.05 \times 10^{-3}$	2.09
control5	351	1600	sedumi	$-1.688\,360\,94 \times 10^1$	$-1.688\,310\,26 \times 10^1$	$3.00 \times 10^{-5}$	4.18	$6.39 \times 10^{-3}$	2.04
control6	496	2295	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	3.25	1.02	1.02
control6	496	2295	sdpa	$-4.205\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	8.35	1.87	3.07
control6	496	2295	sdpt3	$-3.730\,442\,95 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	9.33	$3.02 \times 10^{-3}$	1.01
control6	496	2295	sedumi	$-3.730\,447\,63 \times 10^1$	$-3.721\,977\,44 \times 10^1$	$2.27 \times 10^{-3}$	5.62	$4.90 \times 10^{-3}$	2.19
control7	666	3115	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6.28	1.01	1.02
control7	666	3115	sdpa	$-2.095\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	15.35	1.00	2.64
control7	666	3115	sdpt3	$-2.062\,507\,77 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	13.13	$2.25 \times 10^{-3}$	$9.98 \times 10^{-1}$
control7	666	3115	sedumi	$-2.062\,508\,80 \times 10^1$	$-2.062\,417\,51 \times 10^1$	$4.43 \times 10^{-5}$	8.92	$3.30 \times 10^{-3}$	1.02
control8	861	4060	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	11.14	1.01	1.02
control8	861	4060	sdpa	$-2.077\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	27.26	$9.81 \times 10^{-1}$	2.28
control8	861	4060	sdpt3	$-2.028\,636\,60 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	19.48	$1.59 \times 10^{-3}$	1.04
control8	861	4060	sedumi	$-2.028\,637\,45 \times 10^1$	$-2.028\,510\,85 \times 10^1$	$6.24 \times 10^{-5}$	14.32	$2.19 \times 10^{-3}$	1.01
control9	1081	5130	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	21.22	$9.32 \times 10^{-1}$	$9.33 \times 10^{-1}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
control9	1081	5130	sdpa	$-2.072\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	45.65	1.00	1.90
control9	1081	5130	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	30.26	$8.10 \times 10^{-1}$	$8.41 \times 10^{-1}$
control9	1081	5130	sedumi	$-1.467\,542\,88 \times 10^1$	$-1.467\,515\,62 \times 10^1$	$1.86 \times 10^{-5}$	23.43	$1.44 \times 10^{-3}$	1.01
equalG11	801	321201	csdp	$-6.291\,556\,36 \times 10^2$	$-6.291\,254\,67 \times 10^2$	$4.80 \times 10^{-5}$	156.72	1.03	$6.22 \times 10^{-1}$
equalG11	801	321201	sdpa	$-6.293\,347\,94 \times 10^2$	$6.440\,263\,95 \times 10^3$	2.00	186.89	$9.93 \times 10^{-1}$	$9.95 \times 10^{-1}$
equalG11	801	321201	sdpt3	$-6.291\,554\,11 \times 10^2$	$-6.288\,771\,34 \times 10^2$	$4.42 \times 10^{-4}$	17.95	1.12	4.58
equalG11	801	321201	sedumi	$-6.302\,808\,26 \times 10^2$	$-5.630\,746\,62 \times 10^2$	$1.13 \times 10^{-1}$	71.90	1.29	4.58
equalG51	1001	501501	csdp	$-4.005\,602\,23 \times 10^3$	$-4.005\,527\,48 \times 10^3$	$1.87 \times 10^{-5}$	331.05	1.02	$5.78 \times 10^{-1}$
equalG51	1001	501501	sdpa	$-4.006\,408\,00 \times 10^3$	$3.098\,379\,65 \times 10^4$	2.00	319.56	1.01	1.05
equalG51	1001	501501	sdpt3	$-4.005\,602\,38 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	29.93	1.14	2.18
equalG51	1001	501501	sedumi	$-4.005\,656\,68 \times 10^3$	$-4.005\,572\,63 \times 10^3$	$2.10 \times 10^{-5}$	200.32	$9.82 \times 10^{-1}$	1.17
gpp100	101	5050	csdp	$4.494\,354\,91 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.96	1.04	1.30
gpp100	101	5050	sdpa	$4.494\,117\,50 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.32	1.01	$1.08 \times 10^1$
gpp100	101	5050	sdpt3	$4.494\,354\,89 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.72	1.10	4.05
gpp100	101	5050	sedumi	$4.494\,222\,37 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.96	1.15	2.18
gpp124-1	125	7750	csdp	7.343 073 21	$+\infty$	NaN	1.60	1.17	1.26
gpp124-1	125	7750	sdpa	7.338 708 60	$+\infty$	NaN	3.57	1.01	$1.05 \times 10^1$
gpp124-1	125	7750	sdpt3	7.343 074 68	$+\infty$	NaN	0.98	1.08	2.31
gpp124-1	125	7750	sedumi	7.341 282 77	$+\infty$	NaN	1.27	1.12	6.19
gpp124-2	125	7750	csdp	$4.686\,229\,24 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.60	1.11	$9.21 \times 10^{-1}$
gpp124-2	125	7750	sdpa	$4.686\,040\,80 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	3.55	1.01	$1.06 \times 10^1$
gpp124-2	125	7750	sdpt3	$4.686\,229\,36 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.90	1.09	1.31
gpp124-2	125	7750	sedumi	$4.686\,090\,31 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.18	1.17	2.83
gpp124-3	125	7750	csdp	$1.530\,141\,04 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.47	1.15	1.35
gpp124-3	125	7750	sdpa	$1.529\,902\,70 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	3.55	$9.98 \times 10^{-1}$	$1.07 \times 10^1$
gpp124-3	125	7750	sdpt3	$1.530\,141\,24 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.86	$2.75 \times 10^{-2}$	2.66
gpp124-3	125	7750	sedumi	$1.530\,133\,48 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.23	1.08	3.59
gpp124-4	125	7750	csdp	$4.189\,875\,99 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.62	1.04	1.23
gpp124-4	125	7750	sdpa	$4.189\,650\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	3.53	1.02	$1.07 \times 10^1$
gpp124-4	125	7750	sdpt3	$4.189\,876\,09 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.89	1.09	1.86
gpp124-4	125	7750	sedumi	$4.189\,807\,85 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.40	$9.84 \times 10^{-1}$	1.33
gpp250-1	251	31375	csdp	$1.544\,472\,28 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	7.90	2.24	1.46
gpp250-1	251	31375	sdpa	$1.544\,152\,20 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	15.55	$9.81 \times 10^{-1}$	9.83
gpp250-1	251	31375	sdpt3	$1.544\,490\,36 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.54	1.03	3.86

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\overline{f_p}$	$\overline{f_d}$	$\mu(\overline{f_d}, \overline{f_p})$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
gpp250-1	251	31375	sedumi	$1.544\,364\,67 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	4.81	1.02	1.19
gpp250-2	251	31375	csdp	$8.186\,894\,33 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	7.47	1.15	1.37
gpp250-2	251	31375	sdpa	$8.186\,070\,10 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	15.10	$9.82 \times 10^{-1}$	9.97
gpp250-2	251	31375	sdpt3	$8.186\,895\,52 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.46	1.04	3.42
gpp250-2	251	31375	sedumi	$8.185\,259\,26 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	4.53	1.04	4.27
gpp250-3	251	31375	csdp	$3.035\,391\,65 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	9.61	$7.75 \times 10^{-1}$	1.81
gpp250-3	251	31375	sdpa	$3.035\,138\,40 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	15.08	1.01	9.98
gpp250-3	251	31375	sdpt3	$3.035\,393\,12 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.37	1.07	1.12
gpp250-3	251	31375	sedumi	$3.035\,275\,39 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	5.35	1.02	1.92
gpp250-4	251	31375	csdp	$7.473\,282\,35 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	8.63	$9.50 \times 10^{-1}$	1.09
gpp250-4	251	31375	sdpa	$7.472\,260\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	15.01	$9.89 \times 10^{-1}$	$1.00 \times 10^1$
gpp250-4	251	31375	sdpt3	$7.473\,282\,97 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.29	1.07	3.33
gpp250-4	251	31375	sedumi	$7.473\,193\,32 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	4.93	1.03	1.24
gpp500-1	501	125250	csdp	$2.532\,041\,15 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	54.45	1.57	1.36
gpp500-1	501	125250	sdpa	$2.531\,600\,01 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	71.44	$9.37 \times 10^{-1}$	8.63
gpp500-1	501	125250	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	7.48	1.09	1.08
gpp500-1	501	125250	sedumi	$2.529\,841\,58 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	29.83	2.07	1.22
gpp500-2	501	125250	csdp	$1.560\,599\,96 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	48.52	$8.32 \times 10^{-1}$	1.63
gpp500-2	501	125250	sdpa	$1.560\,096\,10 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	65.61	1.09	9.57
gpp500-2	501	125250	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6.99	1.10	5.66
gpp500-2	501	125250	sedumi	$1.559\,969\,90 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	29.62	1.12	1.33
gpp500-3	501	125250	csdp	$5.130\,173\,48 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	39.25	1.04	1.45
gpp500-3	501	125250	sdpa	$5.128\,538\,50 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	68.15	$9.62 \times 10^{-1}$	9.35
gpp500-3	501	125250	sdpt3	$5.130\,174\,76 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	6.99	1.10	4.27
gpp500-3	501	125250	sedumi	$5.130\,074\,79 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	28.03	1.02	1.42
gpp500-4	501	125250	csdp	$1.567\,018\,41 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	40.71	$9.76 \times 10^{-1}$	1.54
gpp500-4	501	125250	sdpa	$1.566\,922\,60 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	64.96	1.02	9.53
gpp500-4	501	125250	sdpt3	$1.567\,018\,66 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	7.16	1.10	4.59
gpp500-4	501	125250	sedumi	$1.566\,959\,16 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	28.04	$9.98 \times 10^{-1}$	2.06
hinf10	21	66	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.07	2.38	2.44
hinf10	21	66	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.07	$1.90 \times 10^1$	$2.04 \times 10^1$
hinf10	21	66	sdpt3	$-1.087\,649\,39 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.95	$1.70 \times 10^{-2}$	1.20
hinf10	21	66	sedumi	$-1.087\,719\,15 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.46	$2.30 \times 10^{-2}$	$4.63 \times 10^{-1}$
hinf11	31	97	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.10	1.63	1.65

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_a$	$\mu(\overline{f}_a, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
hinf11	31	97	sdpa	$-6.257\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.10	$1.09 \times 10^1$	$1.75 \times 10^1$
hinf11	31	97	sdpt3	$-6.590\,572\,37 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.01	$1.72 \times 10^{-2}$	1.42
hinf11	31	97	sedumi	$-6.587\,924\,15 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.43	$1.38 \times 10^{-2}$	$5.58 \times 10^{-1}$
hinf12	43	120	csdp	$-1.768\,879\,64 \times 10^{-2}$	$+\infty$	NaN	0.11	1.86	1.61
hinf12	43	120	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.12	$1.61 \times 10^1$	$1.68 \times 10^1$
hinf12	43	120	sdpt3	$-3.478\,010\,74 \times 10^{-3}$	$+\infty$	NaN	5.93	$9.17 \times 10^{-1}$	1.03
hinf12	43	120	sedumi	$-9.906\,712\,99 \times 10^{-2}$	$+\infty$	NaN	0.86	$4.01 \times 10^{-2}$	$9.69 \times 10^{-1}$
hinf13	57	178	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.14	1.38	1.33
hinf13	57	178	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.17	$1.47 \times 10^1$	$1.54 \times 10^1$
hinf13	57	178	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	3.82	$8.34 \times 10^{-1}$	1.02
hinf13	57	178	sedumi	$-4.553\,111\,96 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.85	1.01	$9.21 \times 10^{-1}$
hinf14	73	227	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.17	1.32	1.34
hinf14	73	227	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.21	$1.36 \times 10^1$	$1.43 \times 10^1$
hinf14	73	227	sdpt3	$-1.299\,455\,66 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.88	$1.18 \times 10^{-2}$	1.50
hinf14	73	227	sedumi	$-1.299\,392\,41 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	3.79	$8.93 \times 10^{-3}$	1.02
hinf15	91	273	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.22	1.25	1.23
hinf15	91	273	sdpa	$-1.453\,000\,00 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	0.26	2.55	$1.36 \times 10^1$
hinf15	91	273	sdpt3	$-2.400\,325\,19 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	5.47	$6.23 \times 10^{-3}$	$9.03 \times 10^{-1}$
hinf15	91	273	sedumi	$-2.547\,913\,45 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.80	1.30	$4.77 \times 10^{-1}$
hinf1	13	41	csdp	$-2.032\,641\,10$	$+\infty$	NaN	0.03	4.96	$1.24 \times 10^1$
hinf1	13	41	sdpa	$-1.141\,000\,00 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.05	4.95	$2.54 \times 10^1$
hinf1	13	41	sdpt3	$-2.032\,697\,91$	$+\infty$	NaN	1.46	$2.29 \times 10^{-2}$	2.57
hinf1	13	41	sedumi	$-2.032\,716\,92$	$+\infty$	NaN	0.99	$3.38 \times 10^{-2}$	1.63
hinf2	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.04	3.27	3.26
hinf2	13	51	sdpa	$-1.549\,000\,00 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.06	$1.27 \times 10^1$	$2.37 \times 10^1$
hinf2	13	51	sdpt3	$-1.096\,815\,33 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.99	$3.33 \times 10^{-2}$	1.07
hinf2	13	51	sedumi	$-1.096\,745\,92 \times 10^1$	$-1.073\,448\,84 \times 10^1$	$2.15 \times 10^{-2}$	0.71	2.15	6.42
hinf3	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.05	3.29	3.15
hinf3	13	51	sdpa	$-7.152\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.06	4.72	$2.41 \times 10^1$
hinf3	13	51	sdpt3	$-5.695\,436\,49 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.29	$2.57 \times 10^{-2}$	$9.58 \times 10^{-1}$
hinf3	13	51	sedumi	$-5.695\,734\,58 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.70	1.15	5.85
hinf4	13	51	csdp	$-2.747\,641\,05 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.04	4.59	$1.55 \times 10^1$
hinf4	13	51	sdpa	$-1.103\,000\,00 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.06	6.54	$2.42 \times 10^1$
hinf4	13	51	sdpt3	$-2.747\,647\,92 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.39	$2.34 \times 10^{-2}$	3.32

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
hinf4	13	51	sedumi	$-2.747\,640\,13 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.15	$2.90 \times 10^{-2}$	4.83
hinf5	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.05	3.30	3.19
hinf5	13	51	sdpa	$-3.578\,000\,00 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.06	4.68	$2.40 \times 10^1$
hinf5	13	51	sdpt3	$-3.625\,569\,39 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.14	$2.87 \times 10^{-2}$	1.25
hinf5	13	51	sedumi	$-3.628\,203\,33 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.85	$9.51 \times 10^{-1}$	4.53
hinf6	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.05	3.07	3.00
hinf6	13	51	sdpa	$-6.405\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.06	6.64	$2.39 \times 10^1$
hinf6	13	51	sdpt3	$-4.489\,429\,22 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.35	$2.45 \times 10^{-2}$	2.21
hinf6	13	51	sedumi	$-4.489\,734\,17 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.82	1.62	1.49
hinf7	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.05	3.15	3.13
hinf7	13	51	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.06	$2.24 \times 10^1$	$2.43 \times 10^1$
hinf7	13	51	sdpt3	$-3.908\,198\,35 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.22	1.04	2.25
hinf7	13	51	sedumi	$-4.210\,783\,54 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.63	1.09	8.04
hinf8	13	51	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.05	3.20	3.08
hinf8	13	51	sdpa	$-5.520\,000\,00 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.06	$1.44 \times 10^1$	$2.35 \times 10^1$
hinf8	13	51	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.44	$9.97 \times 10^{-1}$	1.01
hinf8	13	51	sedumi	$-1.162\,170\,23 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.82	1.96	1.20
hinf9	13	51	csdp	$-\infty$	$-2.362\,492\,32 \times 10^2$	NaN	0.05	2.86	$7.84 \times 10^{-1}$
hinf9	13	51	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.06	$2.14 \times 10^1$	$2.32 \times 10^1$
hinf9	13	51	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.34	1.05	1.05
hinf9	13	51	sedumi	$-2.362\,507\,85 \times 10^2$	$-2.362\,474\,28 \times 10^2$	$1.42 \times 10^{-5}$	0.92	1.08	$4.68 \times 10^{-2}$
infd1	10	465	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.10	1.63	1.71
infd1	10	465	sdpa	$1.206\,987\,09 \times 10^6$	$+\infty$	NaN	0.25	$5.91 \times 10^{-2}$	$1.34 \times 10^1$
infd1	10	465	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.43	1.19	$8.85 \times 10^{-1}$
infd1	10	465	sedumi	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.13	1.72	1.82
infd2	10	465	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.10	1.66	1.94
infd2	10	465	sdpa	$2.813\,783\,61 \times 10^6$	$+\infty$	NaN	0.25	$5.91 \times 10^{-2}$	$1.34 \times 10^1$
infd2	10	465	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.43	1.18	$9.65 \times 10^{-1}$
infd2	10	465	sedumi	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.12	1.61	1.48
infp1	10	465	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.10	1.57	1.74
infp1	10	465	sdpa	$-\infty$	$-8.307\,736\,55 \times 10^7$	NaN	0.24	$1.31 \times 10^1$	$1.05 \times 10^{-1}$
infp1	10	465	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.15	1.03	1.04
infp1	10	465	sedumi	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.15	1.41	1.40
infp2	10	465	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.12	1.39	1.63

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
infp2	10	465	sdpa	$-\infty$	$-1.487\,505\,07 \times 10^8$	NaN	0.24	$1.31 \times 10^1$	$1.14 \times 10^{-1}$
infp2	10	465	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.14	1.04	1.05
infp2	10	465	sedumi	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.21	$9.23 \times 10^{-1}$	$9.41 \times 10^{-1}$
maxG11	800	320400	csdp	$-6.291\,647\,84 \times 10^2$	$-6.291\,647\,81 \times 10^2$	$4.67 \times 10^{-9}$	34.06	1.06	$2.70 \times 10^{-2}$
maxG11	800	320400	sdpa	$-6.293\,995\,10 \times 10^2$	$-6.277\,964\,47 \times 10^2$	$2.55 \times 10^{-3}$	154.69	1.00	1.01
maxG11	800	320400	sdpt3	$-6.291\,647\,83 \times 10^2$	$-6.291\,647\,77 \times 10^2$	$9.57 \times 10^{-9}$	5.69	$1.85 \times 10^{-1}$	$1.62 \times 10^{-1}$
maxG11	800	320400	sedumi	$-6.291\,648\,19 \times 10^2$	$-6.291\,647\,79 \times 10^2$	$6.50 \times 10^{-8}$	48.24	1.05	$1.92 \times 10^{-2}$
maxG32	2000	2001000	csdp	$-1.567\,639\,67 \times 10^3$	$-1.567\,639\,62 \times 10^3$	$3.09 \times 10^{-8}$	396.65	1.07	$3.27 \times 10^{-2}$
maxG32	2000	2001000	sdpa	$-1.567\,864\,85 \times 10^3$	$-1.562\,224\,62 \times 10^3$	$3.60 \times 10^{-3}$	1304.14	1.01	1.02
maxG32	2000	2001000	sdpt3	$-1.567\,639\,64 \times 10^3$	$-1.567\,639\,63 \times 10^3$	$6.71 \times 10^{-9}$	40.31	$3.54 \times 10^{-1}$	$3.19 \times 10^{-1}$
maxG32	2000	2001000	sedumi	$-1.567\,639\,81 \times 10^3$	$-1.567\,639\,63 \times 10^3$	$1.13 \times 10^{-7}$	859.14	1.04	$1.52 \times 10^{-2}$
maxG51	1000	500500	csdp	$-4.006\,255\,56 \times 10^3$	$-4.006\,255\,51 \times 10^3$	$1.31 \times 10^{-8}$	106.52	1.03	$1.78 \times 10^{-2}$
maxG51	1000	500500	sdpa	$-4.007\,334\,00 \times 10^3$	$-4.003\,747\,96 \times 10^3$	$8.95 \times 10^{-4}$	253.25	$9.96 \times 10^{-1}$	1.01
maxG51	1000	500500	sdpt3	$-4.006\,255\,52 \times 10^3$	$-4.006\,255\,52 \times 10^3$	$5.31 \times 10^{-10}$	23.68	$7.89 \times 10^{-2}$	$8.00 \times 10^{-2}$
maxG51	1000	500500	sedumi	$-4.006\,256\,78 \times 10^3$	$-4.006\,255\,45 \times 10^3$	$3.30 \times 10^{-7}$	124.10	1.03	$1.52 \times 10^{-2}$
maxG55	5000	12502500	csdp	$-1.286\,986\,68 \times 10^4$	$-1.286\,986\,65 \times 10^4$	$2.64 \times 10^{-8}$	5674.65	1.08	$4.05 \times 10^{-2}$
maxG55	5000	12502500	sdpa	$-1.287\,179\,59 \times 10^4$	$-1.283\,983\,95 \times 10^4$	$2.49 \times 10^{-3}$	12461.85	1.03	1.04
maxG55	5000	12502500	sdpt3	$-1.286\,986\,67 \times 10^4$	$-1.286\,986\,66 \times 10^4$	$1.18 \times 10^{-9}$	910.05	$2.45 \times 10^{-1}$	$2.77 \times 10^{-1}$
maxG55	5000	12502500	sedumi	$-1.286\,986\,74 \times 10^4$	$-1.286\,986\,66 \times 10^4$	$6.38 \times 10^{-8}$	19991.62	1.02	$1.03 \times 10^{-2}$
maxG60	7000	24503500	csdp	$-1.522\,226\,83 \times 10^4$	$-1.522\,226\,80 \times 10^4$	$1.78 \times 10^{-8}$	14643.73	1.08	$4.50 \times 10^{-2}$
maxG60	7000	24503500	sdpa	$-1.522\,490\,37 \times 10^4$	$-1.517\,414\,87 \times 10^4$	$3.34 \times 10^{-3}$	29713.06	1.04	1.04
maxG60	7000	24503500	sdpt3	$-1.522\,226\,80 \times 10^4$	$-1.522\,226\,78 \times 10^4$	$1.39 \times 10^{-8}$	1847.93	$3.24 \times 10^{-1}$	$3.53 \times 10^{-1}$
maxG60	7000	24503500	sedumi	$-1.522\,227\,03 \times 10^4$	$-1.522\,226\,79 \times 10^4$	$1.56 \times 10^{-7}$	54046.22	1.02	$1.01 \times 10^{-2}$
mcp100	100	5050	csdp	$-2.261\,573\,58 \times 10^2$	$-2.261\,573\,49 \times 10^2$	$4.17 \times 10^{-8}$	0.44	1.18	$6.94 \times 10^{-2}$
mcp100	100	5050	sdpa	$-2.261\,920\,00 \times 10^2$	$-2.260\,826\,90 \times 10^2$	$4.83 \times 10^{-4}$	2.14	1.04	1.05
mcp100	100	5050	sdpt3	$-2.261\,573\,52 \times 10^2$	$-2.261\,573\,51 \times 10^2$	$3.96 \times 10^{-9}$	6.67	$5.75 \times 10^{-2}$	$5.39 \times 10^{-3}$
mcp100	100	5050	sedumi	$-2.261\,573\,57 \times 10^2$	$-2.261\,573\,50 \times 10^2$	$3.12 \times 10^{-8}$	1.28	$7.38 \times 10^{-1}$	$3.92 \times 10^{-2}$
mcp124-1	124	7750	csdp	$-1.419\,904\,78 \times 10^2$	$-1.419\,904\,76 \times 10^2$	$1.48 \times 10^{-8}$	0.58	1.13	$5.89 \times 10^{-2}$
mcp124-1	124	7750	sdpa	$-1.420\,036\,55 \times 10^2$	$-1.419\,241\,80 \times 10^2$	$5.60 \times 10^{-4}$	3.29	1.02	1.03
mcp124-1	124	7750	sdpt3	$-1.419\,904\,77 \times 10^2$	$-1.419\,904\,75 \times 10^2$	$1.50 \times 10^{-8}$	1.37	$8.47 \times 10^{-2}$	$1.54 \times 10^{-1}$
mcp124-1	124	7750	sedumi	$-1.419\,904\,82 \times 10^2$	$-1.419\,904\,76 \times 10^2$	$4.33 \times 10^{-8}$	1.28	$8.25 \times 10^{-1}$	$5.38 \times 10^{-2}$
mcp124-2	124	7750	csdp	$-2.698\,801\,72 \times 10^2$	$-2.698\,801\,70 \times 10^2$	$5.88 \times 10^{-9}$	0.74	1.05	$4.67 \times 10^{-2}$
mcp124-2	124	7750	sdpa	$-2.699\,266\,00 \times 10^2$	$-2.697\,796\,30 \times 10^2$	$5.45 \times 10^{-4}$	3.26	1.03	1.04
mcp124-2	124	7750	sdpt3	$-2.698\,801\,71 \times 10^2$	$-2.698\,801\,70 \times 10^2$	$8.22 \times 10^{-10}$	0.93	$2.61 \times 10^{-2}$	$3.87 \times 10^{-2}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\bar{f}_p$	$\bar{f}_d$	$\mu(\bar{f}_d, \bar{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\bar{t}/t_s$
mcp124-2	124	7750	sedumi	$-2.698\,801\,74 \times 10^2$	$-2.698\,801\,70 \times 10^2$	$1.31 \times 10^{-8}$	0.93	1.05	$8.26 \times 10^{-2}$
mcp124-3	124	7750	csdp	$-4.677\,501\,20 \times 10^2$	$-4.677\,501\,12 \times 10^2$	$1.58 \times 10^{-8}$	0.75	1.06	$4.55 \times 10^{-2}$
mcp124-3	124	7750	sdpa	$-4.677\,855\,00 \times 10^2$	$-4.676\,194\,28 \times 10^2$	$3.55 \times 10^{-4}$	3.27	1.03	1.04
mcp124-3	124	7750	sdpt3	$-4.677\,501\,14 \times 10^2$	$-4.677\,501\,10 \times 10^2$	$9.90 \times 10^{-9}$	0.90	$2.68 \times 10^{-2}$	$3.97 \times 10^{-2}$
mcp124-3	124	7750	sedumi	$-4.677\,501\,19 \times 10^2$	$-4.677\,501\,13 \times 10^2$	$1.18 \times 10^{-8}$	0.89	1.05	$3.99 \times 10^{-2}$
mcp124-4	124	7750	csdp	$-8.644\,118\,70 \times 10^2$	$-8.644\,118\,62 \times 10^2$	$9.15 \times 10^{-9}$	0.77	1.09	$4.49 \times 10^{-2}$
mcp124-4	124	7750	sdpa	$-8.644\,460\,00 \times 10^2$	$-8.642\,172\,70 \times 10^2$	$2.65 \times 10^{-4}$	3.28	1.03	1.04
mcp124-4	124	7750	sdpt3	$-8.644\,118\,64 \times 10^2$	$-8.644\,118\,63 \times 10^2$	$8.03 \times 10^{-10}$	1.18	$2.10 \times 10^{-2}$	$3.01 \times 10^{-2}$
mcp124-4	124	7750	sedumi	$-8.644\,118\,70 \times 10^2$	$-8.644\,118\,61 \times 10^2$	$1.05 \times 10^{-8}$	0.97	1.05	$3.59 \times 10^{-2}$
mcp250-1	250	31375	csdp	$-3.172\,643\,43 \times 10^2$	$-3.172\,643\,39 \times 10^2$	$1.09 \times 10^{-8}$	2.51	1.04	$3.08 \times 10^{-2}$
mcp250-1	250	31375	sdpa	$-3.172\,739\,32 \times 10^2$	$-3.170\,236\,00 \times 10^2$	$7.89 \times 10^{-4}$	13.19	1.02	1.02
mcp250-1	250	31375	sdpt3	$-3.172\,643\,40 \times 10^2$	$-3.172\,643\,40 \times 10^2$	$1.94 \times 10^{-9}$	1.93	$2.96 \times 10^{-2}$	$1.45 \times 10^{-1}$
mcp250-1	250	31375	sedumi	$-3.172\,643\,52 \times 10^2$	$-3.172\,643\,38 \times 10^2$	$4.28 \times 10^{-8}$	3.18	1.05	$2.29 \times 10^{-2}$
mcp250-2	250	31375	csdp	$-5.319\,300\,89 \times 10^2$	$-5.319\,300\,82 \times 10^2$	$1.37 \times 10^{-8}$	2.77	1.05	$2.79 \times 10^{-2}$
mcp250-2	250	31375	sdpa	$-5.320\,840\,43 \times 10^2$	$-5.316\,379\,73 \times 10^2$	$8.39 \times 10^{-4}$	13.24	1.02	1.02
mcp250-2	250	31375	sdpt3	$-5.319\,300\,84 \times 10^2$	$-5.319\,300\,81 \times 10^2$	$5.25 \times 10^{-9}$	1.92	$5.33 \times 10^{-2}$	$5.04 \times 10^{-2}$
mcp250-2	250	31375	sedumi	$-5.319\,301\,00 \times 10^2$	$-5.319\,300\,82 \times 10^2$	$3.54 \times 10^{-8}$	3.20	1.06	$2.37 \times 10^{-2}$
mcp250-3	250	31375	csdp	$-9.811\,725\,82 \times 10^2$	$-9.811\,725\,69 \times 10^2$	$1.30 \times 10^{-8}$	2.86	1.06	$2.69 \times 10^{-2}$
mcp250-3	250	31375	sdpa	$-9.812\,370\,00 \times 10^2$	$-9.807\,695\,57 \times 10^2$	$4.76 \times 10^{-4}$	13.27	1.02	1.02
mcp250-3	250	31375	sdpt3	$-9.811\,725\,72 \times 10^2$	$-9.811\,725\,65 \times 10^2$	$6.57 \times 10^{-9}$	3.98	$1.66 \times 10^{-2}$	$1.94 \times 10^{-2}$
mcp250-3	250	31375	sedumi	$-9.811\,725\,88 \times 10^2$	$-9.811\,725\,69 \times 10^2$	$1.94 \times 10^{-8}$	3.14	1.05	$2.92 \times 10^{-2}$
mcp250-4	250	31375	csdp	$-1.681\,960\,19 \times 10^3$	$-1.681\,960\,09 \times 10^3$	$6.36 \times 10^{-8}$	2.95	1.05	$2.62 \times 10^{-2}$
mcp250-4	250	31375	sdpa	$-1.682\,230\,00 \times 10^3$	$-1.681\,399\,61 \times 10^3$	$4.94 \times 10^{-4}$	13.34	1.01	1.02
mcp250-4	250	31375	sdpt3	$-1.681\,960\,11 \times 10^3$	$-1.681\,960\,10 \times 10^3$	$8.71 \times 10^{-9}$	4.99	$1.31 \times 10^{-2}$	$1.82 \times 10^{-2}$
mcp250-4	250	31375	sedumi	$-1.681\,960\,14 \times 10^3$	$-1.681\,960\,11 \times 10^3$	$1.78 \times 10^{-8}$	3.57	1.06	$2.15 \times 10^{-2}$
mcp500-1	500	125250	csdp	$-5.981\,485\,18 \times 10^2$	$-5.981\,485\,16 \times 10^2$	$4.04 \times 10^{-9}$	8.92	1.06	$3.58 \times 10^{-2}$
mcp500-1	500	125250	sdpa	$-5.984\,230\,95 \times 10^2$	$-5.974\,069\,50 \times 10^2$	$1.70 \times 10^{-3}$	54.75	1.01	1.02
mcp500-1	500	125250	sdpt3	$-5.981\,485\,17 \times 10^2$	$-5.981\,485\,16 \times 10^2$	$1.11 \times 10^{-9}$	4.22	$5.96 \times 10^{-2}$	$9.25 \times 10^{-2}$
mcp500-1	500	125250	sedumi	$-5.981\,485\,48 \times 10^2$	$-5.981\,485\,15 \times 10^2$	$5.46 \times 10^{-8}$	18.81	1.03	$1.52 \times 10^{-2}$
mcp500-2	500	125250	csdp	$-1.070\,056\,77 \times 10^3$	$-1.070\,056\,76 \times 10^3$	$4.94 \times 10^{-9}$	15.18	1.04	$2.24 \times 10^{-2}$
mcp500-2	500	125250	sdpa	$-1.070\,253\,80 \times 10^3$	$-1.069\,177\,14 \times 10^3$	$1.01 \times 10^{-3}$	55.56	1.02	1.02
mcp500-2	500	125250	sdpt3	$-1.070\,056\,77 \times 10^3$	$-1.070\,056\,76 \times 10^3$	$2.45 \times 10^{-9}$	7.13	$4.25 \times 10^{-2}$	$6.02 \times 10^{-2}$
mcp500-2	500	125250	sedumi	$-1.070\,056\,81 \times 10^3$	$-1.070\,056\,76 \times 10^3$	$4.22 \times 10^{-8}$	18.35	1.05	$1.69 \times 10^{-2}$
mcp500-3	500	125250	csdp	$-1.847\,970\,03 \times 10^3$	$-1.847\,970\,01 \times 10^3$	$8.83 \times 10^{-9}$	15.11	1.04	$2.10 \times 10^{-2}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_a$	$\mu(\overline{f}_a, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
mcp500-3	500	125250	sdpa	$-1.848\,135\,60 \times 10^3$	$-1.846\,823\,22 \times 10^3$	$7.10 \times 10^{-4}$	55.70	1.01	1.02
mcp500-3	500	125250	sdpt3	$-1.847\,970\,02 \times 10^3$	$-1.847\,970\,02 \times 10^3$	$7.05 \times 10^{-10}$	8.35	$3.69 \times 10^{-2}$	$3.80 \times 10^{-2}$
mcp500-3	500	125250	sedumi	$-1.847\,970\,06 \times 10^3$	$-1.847\,970\,02 \times 10^3$	$2.41 \times 10^{-8}$	18.70	1.04	$1.67 \times 10^{-2}$
mcp500-4	500	125250	csdp	$-3.566\,738\,11 \times 10^3$	$-3.566\,738\,03 \times 10^3$	$2.18 \times 10^{-8}$	15.47	1.04	$2.06 \times 10^{-2}$
mcp500-4	500	125250	sdpa	$-3.567\,289\,00 \times 10^3$	$-3.565\,034\,54 \times 10^3$	$6.32 \times 10^{-4}$	55.60	1.02	1.02
mcp500-4	500	125250	sdpt3	$-3.566\,738\,05 \times 10^3$	$-3.566\,737\,99 \times 10^3$	$1.63 \times 10^{-8}$	8.08	$3.87 \times 10^{-2}$	$3.90 \times 10^{-2}$
mcp500-4	500	125250	sedumi	$-3.566\,738\,10 \times 10^3$	$-3.566\,738\,04 \times 10^3$	$1.68 \times 10^{-8}$	19.02	1.04	$1.66 \times 10^{-2}$
qap10	1021	5151	csdp	$1.092\,602\,26 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	4.22	1.04	3.07
qap10	1021	5151	sdpa	$-1.574\,250\,00 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	5.54	$9.40 \times 10^{-1}$	6.82
qap10	1021	5151	sdpt3	$1.092\,573\,87 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	3.11	$6.36 \times 10^{-3}$	$8.90 \times 10^{-1}$
qap10	1021	5151	sedumi	$1.092\,585\,60 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	8.41	$2.33 \times 10^{-3}$	$9.37 \times 10^{-1}$
qap5	136	351	csdp	$4.359\,999\,96 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.13	2.63	6.61
qap5	136	351	sdpa	$3.214\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.27	1.12	$1.24 \times 10^1$
qap5	136	351	sdpt3	$4.360\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.69	$1.00 \times 10^{-2}$	5.57
qap5	136	351	sedumi	$4.359\,999\,99 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.47	$3.29 \times 10^{-2}$	3.81
qap6	229	703	csdp	$3.814\,331\,78 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.28	1.10	4.34
qap6	229	703	sdpa	$-2.947\,000\,00 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.47	1.16	$1.20 \times 10^1$
qap6	229	703	sdpt3	$3.814\,160\,84 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	5.33	$8.26 \times 10^{-1}$	1.22
qap6	229	703	sedumi	$3.814\,265\,92 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.34	$1.17 \times 10^{-2}$	1.91
qap7	358	1275	csdp	$4.248\,151\,99 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.53	1.06	1.69
qap7	358	1275	sdpa	$-9.560\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.86	1.11	$1.08 \times 10^1$
qap7	358	1275	sdpt3	$4.248\,041\,58 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	6.01	$2.72 \times 10^{-3}$	2.51
qap7	358	1275	sedumi	$4.248\,119\,47 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.33	$6.96 \times 10^{-3}$	1.08
qap8	529	2145	csdp	$7.569\,386\,42 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.05	1.05	1.75
qap8	529	2145	sdpa	$-1.945\,400\,00 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	1.58	1.03	9.42
qap8	529	2145	sdpt3	$7.568\,977\,71 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1.34	$1.28 \times 10^{-2}$	1.16
qap8	529	2145	sedumi	$7.569\,345\,28 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.73	$6.19 \times 10^{-3}$	1.30
qap9	748	3403	csdp	$1.409\,934\,78 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	2.08	1.02	3.20
qap9	748	3403	sdpa	$-4.044\,000\,00 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	2.90	$9.52 \times 10^{-1}$	8.36
qap9	748	3403	sdpt3	$1.409\,929\,93 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	1.46	$1.25 \times 10^{-2}$	3.24
qap9	748	3403	sedumi	$1.409\,914\,02 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	3.48	$5.20 \times 10^{-3}$	2.33
qpG11	800	1280800	csdp	$-2.448\,659\,14 \times 10^3$	$-2.448\,659\,12 \times 10^3$	$8.70 \times 10^{-9}$	73.64	1.09	$3.50 \times 10^{-2}$
qpG11	800	1280800	sdpa	$-2.448\,876\,00 \times 10^3$	$-2.437\,809\,20 \times 10^3$	$4.53 \times 10^{-3}$	599.73	1.01	1.02
qpG11	800	1280800	sdpt3	$-2.448\,659\,13 \times 10^3$	$-2.448\,659\,09 \times 10^3$	$1.70 \times 10^{-8}$	6.61	$4.25 \times 10^{-1}$	$4.49 \times 10^{-1}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
qpG11	800	1280800	sedumi	$-2.448\,659\,20 \times 10^3$	$-2.448\,659\,10 \times 10^3$	$3.81 \times 10^{-8}$	404.68	1.01	1.03
qpG51	1000	2001000	csdp	$-1.181\,800\,00 \times 10^4$	$-1.181\,799\,99 \times 10^4$	$1.19 \times 10^{-8}$	160.66	1.07	$3.58 \times 10^{-2}$
qpG51	1000	2001000	sdpa	$-\infty$	$-1.181\,563\,64 \times 10^4$	NaN	1019.05	$1.11 \times 10^1$	5.05
qpG51	1000	2001000	sdpt3	$-1.181\,800\,00 \times 10^4$	$-1.181\,800\,00 \times 10^4$	$4.23 \times 10^{-9}$	23.85	$2.27 \times 10^{-1}$	$2.67 \times 10^{-1}$
qpG51	1000	2001000	sedumi	$-1.181\,800\,00 \times 10^4$	$-1.181\,799\,99 \times 10^4$	$1.17 \times 10^{-8}$	1723.53	1.01	1.02
ss30	132	43497	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	16.81	1.06	$2.90 \times 10^{-1}$
ss30	132	43497	sdpa	$-2.024\,006\,41 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	23.70	2.00	8.58
ss30	132	43497	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6.59	$9.87 \times 10^{-1}$	$7.19 \times 10^{-1}$
ss30	132	43497	sedumi	$-2.023\,951\,06 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	12.08	1.02	$2.15 \times 10^{-1}$
theta1	104	1275	csdp	$-2.300\,000\,00 \times 10^1$	$-2.300\,000\,00 \times 10^1$	$1.15 \times 10^{-9}$	0.22	1.29	$1.18 \times 10^{-1}$
theta1	104	1275	sdpa	$-\infty$	$-2.295\,111\,36 \times 10^1$	NaN	0.60	$1.18 \times 10^1$	1.13
theta1	104	1275	sdpt3	$-2.300\,000\,01 \times 10^1$	$-2.299\,999\,97 \times 10^1$	$1.68 \times 10^{-8}$	1.48	$1.08 \times 10^{-2}$	$1.84 \times 10^{-2}$
theta1	104	1275	sedumi	$-2.300\,000\,00 \times 10^1$	$-2.299\,999\,26 \times 10^1$	$3.23 \times 10^{-7}$	0.46	$3.52 \times 10^{-2}$	1.16
theta2	498	5050	csdp	$-3.287\,916\,90 \times 10^1$	$-3.287\,916\,89 \times 10^1$	$5.07 \times 10^{-9}$	1.22	1.04	$2.51 \times 10^{-2}$
theta2	498	5050	sdpa	$-3.289\,000\,00 \times 10^1$	$-3.278\,897\,95 \times 10^1$	$3.08 \times 10^{-3}$	2.68	1.03	1.04
theta2	498	5050	sdpt3	$-3.287\,916\,90 \times 10^1$	$-3.287\,916\,89 \times 10^1$	$2.87 \times 10^{-9}$	0.82	$2.46 \times 10^{-2}$	$3.90 \times 10^{-2}$
theta2	498	5050	sedumi	$-3.287\,916\,90 \times 10^1$	$-3.287\,915\,27 \times 10^1$	$4.98 \times 10^{-7}$	1.22	$1.64 \times 10^{-2}$	1.05
theta3	1106	11325	csdp	$-4.216\,698\,15 \times 10^1$	$-4.216\,698\,12 \times 10^1$	$6.07 \times 10^{-9}$	5.23	1.00	$7.53 \times 10^{-3}$
theta3	1106	11325	sdpa	$-\infty$	$-4.198\,373\,20 \times 10^1$	NaN	8.16	$1.11 \times 10^1$	2.03
theta3	1106	11325	sdpt3	$-4.216\,698\,15 \times 10^1$	$-4.216\,698\,13 \times 10^1$	$5.27 \times 10^{-9}$	1.56	$1.77 \times 10^{-2}$	$2.63 \times 10^{-2}$
theta3	1106	11325	sedumi	$-4.216\,698\,16 \times 10^1$	$-4.216\,691\,16 \times 10^1$	$1.66 \times 10^{-6}$	5.04	$5.48 \times 10^{-3}$	1.02
theta4	1949	20100	csdp	$-5.032\,122\,22 \times 10^1$	$-5.032\,122\,10 \times 10^1$	$2.41 \times 10^{-8}$	19.71	1.01	$2.68 \times 10^{-3}$
theta4	1949	20100	sdpa	$-5.049\,000\,00 \times 10^1$	$-5.023\,764\,79 \times 10^1$	$5.01 \times 10^{-3}$	25.97	1.01	1.01
theta4	1949	20100	sdpt3	$-5.032\,122\,20 \times 10^1$	$-5.032\,122\,14 \times 10^1$	$1.25 \times 10^{-8}$	3.74	$1.07 \times 10^{-2}$	$3.55 \times 10^{-2}$
theta4	1949	20100	sedumi	$-5.032\,122\,20 \times 10^1$	$-5.032\,112\,06 \times 10^1$	$2.02 \times 10^{-6}$	22.83	$1.74 \times 10^{-3}$	1.01
theta5	3028	31375	csdp	$-5.723\,230\,73 \times 10^1$	$-5.723\,230\,71 \times 10^1$	$2.81 \times 10^{-9}$	69.57	1.00	$1.05 \times 10^{-3}$
theta5	3028	31375	sdpa	$-5.759\,000\,00 \times 10^1$	$-5.710\,556\,78 \times 10^1$	$8.45 \times 10^{-3}$	84.35	1.01	1.00
theta5	3028	31375	sdpt3	$-5.723\,230\,73 \times 10^1$	$-5.723\,230\,69 \times 10^1$	$7.04 \times 10^{-9}$	7.31	$7.75 \times 10^{-3}$	$1.03 \times 10^{-2}$
theta5	3028	31375	sedumi	$-5.723\,230\,74 \times 10^1$	$-5.723\,214\,76 \times 10^1$	$2.79 \times 10^{-6}$	100.53	$5.67 \times 10^{-4}$	1.00
theta6	4375	45150	csdp	$-6.347\,708\,72 \times 10^1$	$-6.347\,708\,69 \times 10^1$	$4.92 \times 10^{-9}$	199.06	1.00	$4.95 \times 10^{-4}$
theta6	4375	45150	sdpa	$-6.351\,000\,00 \times 10^1$	$-6.331\,460\,58 \times 10^1$	$3.08 \times 10^{-3}$	238.81	1.00	1.00
theta6	4375	45150	sdpt3	$-6.347\,708\,72 \times 10^1$	$-6.347\,708\,70 \times 10^1$	$3.16 \times 10^{-9}$	14.92	$5.39 \times 10^{-3}$	$6.86 \times 10^{-3}$
theta6	4375	45150	sedumi	$-6.347\,708\,72 \times 10^1$	$-6.347\,695\,87 \times 10^1$	$2.02 \times 10^{-6}$	312.62	$2.60 \times 10^{-4}$	1.99
thetaG11	2401	321201	csdp	$-4.000\,000\,00 \times 10^2$	$-3.999\,999\,99 \times 10^2$	$3.11 \times 10^{-9}$	97.72	1.02	$1.01 \times 10^{-2}$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
thetaG11	2401	321201	sdpa	$-\infty$	$-3.997\,960\,38 \times 10^2$	NaN	206.25	$1.10 \times 10^1$	4.02
thetaG11	2401	321201	sdpt3	$-4.000\,000\,00 \times 10^2$	$-3.999\,999\,95 \times 10^2$	$1.36 \times 10^{-8}$	15.30	$5.68 \times 10^{-2}$	$6.12 \times 10^{-2}$
thetaG11	2401	321201	sedumi	$-4.000\,000\,00 \times 10^2$	$-3.999\,999\,99 \times 10^2$	$3.12 \times 10^{-9}$	168.68	1.01	1.01
thetaG51	6910	501501	csdp	$-3.490\,005\,82 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1960.89	1.00	1.85
thetaG51	6910	501501	sdpa	$-3.612\,317\,45 \times 10^2$	$-3.440\,060\,69 \times 10^2$	$4.89 \times 10^{-2}$	1731.97	1.01	1.13
thetaG51	6910	501501	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	359.86	1.11	1.00
thetaG51	6910	501501	sedumi	$-3.490\,000\,08 \times 10^2$	$-3.489\,983\,84 \times 10^2$	$4.66 \times 10^{-6}$	1934.41	1.00	1.19
truss1	6	18	csdp	8.999 996 31	8.999 996 37	$6.11 \times 10^{-9}$	0.03	5.58	2.37
truss1	6	18	sdpa	8.997 000 00	9.001 103 00	$4.56 \times 10^{-4}$	0.04	$3.09 \times 10^1$	$1.45 \times 10^1$
truss1	6	18	sdpt3	8.999 996 29	8.999 996 51	$2.54 \times 10^{-8}$	0.83	$6.45 \times 10^{-2}$	$7.74 \times 10^{-2}$
truss1	6	18	sedumi	8.999 996 31	8.999 996 38	$7.43 \times 10^{-9}$	0.55	$9.67 \times 10^{-2}$	1.23
truss2	58	331	csdp	$1.233\,803\,56 \times 10^2$	$1.233\,803\,56 \times 10^2$	$1.13 \times 10^{-9}$	0.61	$5.29 \times 10^{-1}$	$5.42 \times 10^{-1}$
truss2	58	331	sdpa	$1.233\,075\,74 \times 10^2$	$1.266\,000\,00 \times 10^2$	$2.63 \times 10^{-2}$	0.80	3.43	4.99
truss2	58	331	sdpt3	$1.233\,803\,56 \times 10^2$	$1.233\,803\,57 \times 10^2$	$7.77 \times 10^{-9}$	20.41	$1.63 \times 10^{-2}$	1.15
truss2	58	331	sedumi	$1.233\,803\,56 \times 10^2$	$1.233\,803\,58 \times 10^2$	$1.05 \times 10^{-8}$	4.92	1.07	1.03
truss3	27	91	csdp	9.109 996 20	9.109 996 22	$1.34 \times 10^{-9}$	0.08	2.87	$9.06 \times 10^{-1}$
truss3	27	91	sdpa	9.101 798 83	$+\infty$	NaN	0.13	7.92	$1.84 \times 10^1$
truss3	27	91	sdpt3	9.109 996 13	9.109 996 27	$1.51 \times 10^{-8}$	1.24	$5.11 \times 10^{-2}$	$6.02 \times 10^{-2}$
truss3	27	91	sedumi	9.109 996 15	9.109 996 33	$2.02 \times 10^{-8}$	0.61	1.22	1.25
truss4	12	37	csdp	9.009 996 27	9.009 996 33	$7.26 \times 10^{-9}$	0.04	4.58	1.74
truss4	12	37	sdpa	$-\infty$	9.012 000 00	NaN	0.07	$2.67 \times 10^1$	$1.15 \times 10^1$
truss4	12	37	sdpt3	9.009 996 29	9.009 996 61	$3.50 \times 10^{-8}$	1.36	$4.67 \times 10^{-2}$	1.13
truss4	12	37	sedumi	9.009 996 26	9.009 996 37	$1.18 \times 10^{-8}$	0.63	1.29	1.31
truss5	208	1816	csdp	$1.326\,356\,77 \times 10^2$	$1.326\,356\,78 \times 10^2$	$1.06 \times 10^{-8}$	2.19	1.33	$1.59 \times 10^{-1}$
truss5	208	1816	sdpa	$1.302\,427\,11 \times 10^2$	$1.332\,000\,00 \times 10^2$	$2.25 \times 10^{-2}$	3.07	3.52	4.71
truss5	208	1816	sdpt3	$1.326\,356\,78 \times 10^2$	$1.326\,356\,78 \times 10^2$	$1.38 \times 10^{-9}$	7.27	$4.71 \times 10^{-2}$	2.39
truss5	208	1816	sedumi	$1.326\,356\,77 \times 10^2$	$1.326\,356\,79 \times 10^2$	$1.50 \times 10^{-8}$	5.72	$8.95 \times 10^{-1}$	$8.84 \times 10^{-1}$
truss6	172	901	csdp	$9.010\,013\,82 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	7.49	$1.90 \times 10^{-1}$	1.22
truss6	172	901	sdpa	$8.922\,020\,00 \times 10^2$	$9.017\,000\,00 \times 10^2$	$1.06 \times 10^{-2}$	7.74	$1.24 \times 10^1$	3.88
truss6	172	901	sdpt3	$9.010\,013\,49 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	452.68	$3.28 \times 10^{-3}$	$9.16 \times 10^{-1}$
truss6	172	901	sedumi	$9.010\,013\,99 \times 10^2$	$9.010\,014\,15 \times 10^2$	$1.75 \times 10^{-8}$	54.29	$2.73 \times 10^{-2}$	1.09
truss7	86	451	csdp	$9.000\,014\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	4.17	$3.40 \times 10^{-1}$	1.39
truss7	86	451	sdpa	$8.983\,000\,00 \times 10^2$	$9.007\,021\,24 \times 10^2$	$2.67 \times 10^{-3}$	4.01	$1.31 \times 10^1$	6.05
truss7	86	451	sdpt3	$9.000\,013\,71 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	235.71	$6.26 \times 10^{-3}$	1.00

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.1 [SDPLIB (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
truss7	86	451	sedumi	$9.000\,013\,99 \times 10^2$	$9.000\,014\,63 \times 10^2$	$7.16 \times 10^{-8}$	124.28	$1.18 \times 10^{-2}$	2.78
truss8	496	6271	csdp	$1.331\,145\,89 \times 10^2$	$1.331\,145\,89 \times 10^2$	$1.98 \times 10^{-9}$	5.93	1.13	$6.37 \times 10^{-2}$
truss8	496	6271	sdpa	$1.227\,035\,10 \times 10^2$	$1.337\,000\,00 \times 10^2$	$8.58 \times 10^{-2}$	8.88	2.13	5.35
truss8	496	6271	sdpt3	$1.331\,145\,89 \times 10^2$	$1.331\,145\,89 \times 10^2$	$1.89 \times 10^{-9}$	10.31	$3.42 \times 10^{-2}$	2.15
truss8	496	6271	sedumi	$1.331\,145\,88 \times 10^2$	$1.331\,145\,90 \times 10^2$	$1.47 \times 10^{-8}$	5.67	1.15	2.24

Tabelle B.2.: Rigorose untere und obere Fehlerschranken für die SDPLIB-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 3.3.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
arch0	174	13215	mosek	$-5.665\,191\,48 \times 10^{-1}$	$-5.585\,548\,78 \times 10^{-1}$	$7.96 \times 10^{-3}$	0.34	$6.67 \times 10^{-1}$	1.56
arch2	174	13215	mosek	$-6.715\,204\,63 \times 10^{-1}$	$-6.584\,510\,32 \times 10^{-1}$	$1.31 \times 10^{-2}$	0.27	$4.68 \times 10^{-2}$	1.16
arch4	174	13215	mosek	$-9.726\,337\,42 \times 10^{-1}$	$-9.552\,975\,31 \times 10^{-1}$	$1.73 \times 10^{-2}$	0.29	$4.39 \times 10^{-2}$	1.15
arch8	174	13215	mosek	$-7.056\,990\,60$	$-7.034\,917\,97$	$3.13 \times 10^{-3}$	0.33	$3.67 \times 10^{-2}$	1.14
control10	1326	6325	mosek	$-3.853\,306\,16 \times 10^1$	$-3.852\,961\,85 \times 10^1$	$8.94 \times 10^{-5}$	8.74	$2.21 \times 10^{-3}$	1.00
control11	1596	7645	mosek	$-3.195\,869\,19 \times 10^1$	$-3.195\,258\,48 \times 10^1$	$1.91 \times 10^{-4}$	11.75	$1.32 \times 10^{-3}$	3.02
control1	21	70	mosek	$-1.778\,462\,97 \times 10^1$	$-1.778\,461\,16 \times 10^1$	$1.02 \times 10^{-6}$	0.03	$4.14 \times 10^{-1}$	1.79
control2	66	265	mosek	$-8.300\,001\,18$	$-8.299\,975\,91$	$3.04 \times 10^{-6}$	0.03	$2.01 \times 10^{-1}$	2.92
control3	136	585	mosek	$-1.363\,327\,56 \times 10^1$	$-1.363\,307\,32 \times 10^1$	$1.48 \times 10^{-5}$	0.08	$8.96 \times 10^{-2}$	1.28
control4	231	1030	mosek	$-1.979\,427\,11 \times 10^1$	$-1.979\,331\,51 \times 10^1$	$4.83 \times 10^{-5}$	0.20	$3.86 \times 10^{-2}$	1.13
control5	351	1600	mosek	$-1.688\,364\,28 \times 10^1$	$-1.688\,229\,52 \times 10^1$	$7.98 \times 10^{-5}$	0.44	$1.97 \times 10^{-2}$	1.09
control6	496	2295	mosek	$-3.730\,447\,12 \times 10^1$	$-3.730\,290\,74 \times 10^1$	$4.19 \times 10^{-5}$	0.90	$1.14 \times 10^{-2}$	1.08
control7	666	3115	mosek	$-2.062\,513\,56 \times 10^1$	$-2.062\,261\,95 \times 10^1$	$1.22 \times 10^{-4}$	1.75	$6.57 \times 10^{-3}$	1.03
control8	861	4060	mosek	$-2.028\,640\,19 \times 10^1$	$-2.028\,291\,89 \times 10^1$	$1.72 \times 10^{-4}$	2.65	$4.72 \times 10^{-3}$	1.01
control9	1081	5130	mosek	$-1.467\,553\,74 \times 10^1$	$-1.466\,878\,08 \times 10^1$	$4.61 \times 10^{-4}$	3.75	$3.59 \times 10^{-3}$	1.03
equalG11	801	321201	mosek	$-\infty$	$-6.261\,561\,38 \times 10^2$	NaN	36.61	$9.48 \times 10^{-1}$	$7.43 \times 10^{-1}$
equalG51	1001	501501	mosek	$-\infty$	$-3.998\,459\,61 \times 10^3$	NaN	69.56	1.01	$8.54 \times 10^{-1}$
gpp100	101	5050	mosek	$4.494\,354\,42 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.36	$2.68 \times 10^{-2}$	$8.71 \times 10^{-1}$
gpp124-1	125	7750	mosek	$7.343\,070\,98$	$+\infty$	NaN	0.44	1.14	1.11
gpp124-2	125	7750	mosek	$4.686\,228\,95 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.35	$3.17 \times 10^{-2}$	1.43
gpp124-3	125	7750	mosek	$1.530\,141\,05 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.48	$2.14 \times 10^{-2}$	1.08
gpp124-4	125	7750	mosek	$4.189\,875\,78 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.43	$3.54 \times 10^{-2}$	1.13
gpp250-1	251	31375	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2.80	$9.19 \times 10^{-1}$	1.54
gpp250-2	251	31375	mosek	$8.186\,895\,27 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	2.88	1.01	$8.34 \times 10^{-1}$
gpp250-3	251	31375	mosek	$3.035\,392\,69 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.58	$8.58 \times 10^{-3}$	$8.33 \times 10^{-1}$
gpp250-4	251	31375	mosek	$7.473\,281\,06 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2.24	$1.37 \times 10^{-2}$	1.32
gpp500-1	501	125250	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	11.09	1.05	1.22
gpp500-2	501	125250	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	12.61	$9.38 \times 10^{-1}$	$9.28 \times 10^{-1}$
gpp500-3	501	125250	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	11.46	1.18	1.11
gpp500-4	501	125250	mosek	$1.567\,018\,74 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	13.75	$4.98 \times 10^{-3}$	$9.29 \times 10^{-1}$
hinf10	21	66	mosek	$-1.087\,145\,01 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.03	$4.02 \times 10^{-1}$	1.61

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.2 [SDPLIB (System 2)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\overline{f_p}$	$\overline{f_d}$	$\mu(\overline{f_d}, \overline{f_p})$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
hinf11	31	97	mosek	$-6.586\,408\,15 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.04	$2.59 \times 10^{-1}$	1.56
hinf12	43	120	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.04	4.92	$1.60 \times 10^1$
hinf13	57	178	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.08	1.38	1.45
hinf14	73	227	mosek	$-1.299\,049\,54 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.09	$1.88 \times 10^{-1}$	1.39
hinf15	91	273	mosek	$-2.399\,909\,34 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.06	$1.73 \times 10^{-1}$	2.06
hinf1	13	41	mosek	$-2.032\,602\,58$	$+\infty$	NaN	0.02	$5.28 \times 10^{-1}$	2.16
hinf2	13	51	mosek	$-1.096\,715\,36 \times 10^1$	$-1.094\,210\,39 \times 10^1$	$2.29 \times 10^{-3}$	0.03	$7.09 \times 10^{-1}$	2.00
hinf3	13	51	mosek	$-5.694\,093\,57 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.03	$4.72 \times 10^{-1}$	2.17
hinf4	13	51	mosek	$-2.747\,643\,46 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.02	$6.58 \times 10^{-1}$	$1.01 \times 10^1$
hinf5	13	51	mosek	$-3.622\,815\,77 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.02	$5.37 \times 10^{-1}$	1.83
hinf6	13	51	mosek	$-4.489\,291\,35 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.03	2.05	2.29
hinf7	13	51	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.03	1.89	2.38
hinf8	13	51	mosek	$-1.161\,461\,69 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.04	$4.22 \times 10^{-1}$	3.10
hinf9	13	51	mosek	$-2.362\,492\,78 \times 10^2$	$-2.362\,491\,58 \times 10^2$	$5.06 \times 10^{-7}$	0.02	2.53	3.98
infd1	10	465	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.03	$1.39 \times 10^1$	$1.03 \times 10^1$
infd2	10	465	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.02	$1.72 \times 10^1$	$1.21 \times 10^1$
infp1	10	465	mosek	$-\infty$	$-2.316\,139\,44 \times 10^1$	NaN	0.01	$2.27 \times 10^1$	2.65
infp2	10	465	mosek	$-\infty$	$-1.625\,864\,16 \times 10^1$	NaN	0.01	$2.36 \times 10^1$	2.87
maxG11	800	320400	mosek	$-6.291\,659\,61 \times 10^2$	$-6.291\,646\,47 \times 10^2$	$2.09 \times 10^{-6}$	7.24	1.03	$3.40 \times 10^{-2}$
maxG32	2000	2001000	mosek	$-1.567\,670\,17 \times 10^3$	$-1.567\,637\,44 \times 10^3$	$2.09 \times 10^{-5}$	99.10	1.11	$1.86 \times 10^{-2}$
maxG51	1000	500500	mosek	$-4.006\,259\,18 \times 10^3$	$-4.006\,255\,35 \times 10^3$	$9.56 \times 10^{-7}$	14.12	1.06	1.14
maxG55	5000	12502500	mosek	$-1.286\,989\,87 \times 10^4$	$-1.286\,986\,59 \times 10^4$	$2.55 \times 10^{-6}$	1590.34	1.03	$1.66 \times 10^{-2}$
maxG60	7000	24503500	mosek	$-1.522\,227\,89 \times 10^4$	$-1.522\,226\,78 \times 10^4$	$7.27 \times 10^{-7}$	3462.26	1.07	$1.77 \times 10^{-2}$
mcp100	100	5050	mosek	$-2.261\,574\,18 \times 10^2$	$-2.261\,573\,44 \times 10^2$	$3.28 \times 10^{-7}$	0.06	1.35	1.47
mcp124-1	124	7750	mosek	$-1.419\,904\,97 \times 10^2$	$-1.419\,904\,75 \times 10^2$	$1.60 \times 10^{-7}$	0.09	1.29	$1.69 \times 10^{-1}$
mcp124-2	124	7750	mosek	$-2.698\,802\,16 \times 10^2$	$-2.698\,801\,67 \times 10^2$	$1.82 \times 10^{-7}$	0.09	1.30	1.41
mcp124-3	124	7750	mosek	$-4.677\,501\,55 \times 10^2$	$-4.677\,501\,11 \times 10^2$	$9.47 \times 10^{-8}$	0.08	1.32	1.41
mcp124-4	124	7750	mosek	$-8.644\,119\,29 \times 10^2$	$-8.644\,118\,58 \times 10^2$	$8.16 \times 10^{-8}$	0.09	1.32	1.41
mcp250-1	250	31375	mosek	$-3.172\,643\,89 \times 10^2$	$-3.172\,643\,35 \times 10^2$	$1.68 \times 10^{-7}$	0.38	1.12	$7.48 \times 10^{-2}$
mcp250-2	250	31375	mosek	$-5.319\,303\,74 \times 10^2$	$-5.319\,300\,64 \times 10^2$	$5.82 \times 10^{-7}$	0.36	1.17	$7.85 \times 10^{-2}$
mcp250-3	250	31375	mosek	$-9.811\,726\,95 \times 10^2$	$-9.811\,725\,63 \times 10^2$	$1.34 \times 10^{-7}$	0.34	1.18	1.22
mcp250-4	250	31375	mosek	$-1.681\,960\,35 \times 10^3$	$-1.681\,960\,10 \times 10^3$	$1.51 \times 10^{-7}$	0.35	1.15	1.19
mcp500-1	500	125250	mosek	$-5.981\,487\,08 \times 10^2$	$-5.981\,485\,09 \times 10^2$	$3.33 \times 10^{-7}$	1.95	1.09	$3.71 \times 10^{-2}$
mcp500-2	500	125250	mosek	$-1.070\,057\,06 \times 10^3$	$-1.070\,056\,75 \times 10^3$	$2.97 \times 10^{-7}$	1.82	1.10	1.11

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.2 [SDPLIB (System 2)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\overline{f_p}$	$\overline{f_d}$	$\mu(\overline{f_d}, \overline{f_p})$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
mcp500-3	500	125250	mosek	$-1.847\,970\,78 \times 10^3$	$-1.847\,969\,99 \times 10^3$	$4.28 \times 10^{-7}$	1.98	1.28	1.29
mcp500-4	500	125250	mosek	$-3.566\,738\,55 \times 10^3$	$-3.566\,738\,04 \times 10^3$	$1.44 \times 10^{-7}$	2.36	1.03	$3.31 \times 10^{-2}$
qap10	1021	5151	mosek	$1.092\,596\,42 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	1.02	$9.90 \times 10^{-3}$	1.53
qap5	136	351	mosek	$4.360\,000\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.02	$2.67 \times 10^{-1}$	7.67
qap6	229	703	mosek	$3.814\,371\,57 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.08	$6.51 \times 10^{-2}$	1.62
qap7	358	1275	mosek	$4.248\,172\,24 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.22	$3.17 \times 10^{-2}$	1.12
qap8	529	2145	mosek	$7.569\,489\,50 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	0.34	$2.31 \times 10^{-2}$	1.30
qap9	748	3403	mosek	$1.409\,931\,13 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.62	$1.90 \times 10^{-2}$	1.29
qpG11	800	1280800	mosek	$-2.448\,659\,71 \times 10^3$	$-2.448\,658\,99 \times 10^3$	$2.94 \times 10^{-7}$	53.07	1.02	1.00
qpG51	1000	2001000	mosek	$-1.181\,800\,01 \times 10^4$	$-1.181\,799\,93 \times 10^4$	$6.67 \times 10^{-8}$	139.53	1.05	1.06
ss30	132	43497	mosek	$-2.023\,951\,10 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.36	$2.13 \times 10^{-2}$	$8.46 \times 10^{-1}$
theta1	104	1275	mosek	$-2.300\,000\,00 \times 10^1$	$-2.299\,999\,70 \times 10^1$	$1.31 \times 10^{-7}$	0.03	1.35	1.72
theta2	498	5050	mosek	$-3.287\,916\,91 \times 10^1$	$-3.287\,909\,91 \times 10^1$	$2.13 \times 10^{-6}$	0.18	1.14	1.18
theta3	1106	11325	mosek	$-4.216\,698\,16 \times 10^1$	$-4.216\,690\,23 \times 10^1$	$1.88 \times 10^{-6}$	0.66	1.04	1.14
theta4	1949	20100	mosek	$-5.032\,122\,22 \times 10^1$	$-5.032\,119\,57 \times 10^1$	$5.26 \times 10^{-7}$	2.44	$9.29 \times 10^{-1}$	$9.88 \times 10^{-1}$
theta5	3028	31375	mosek	$-5.723\,230\,73 \times 10^1$	$-5.723\,223\,38 \times 10^1$	$1.29 \times 10^{-6}$	4.77	$5.91 \times 10^{-3}$	1.11
theta6	4375	45150	mosek	$-6.347\,708\,73 \times 10^1$	$-6.347\,706\,23 \times 10^1$	$3.95 \times 10^{-7}$	13.84	$9.76 \times 10^{-1}$	$9.00 \times 10^{-1}$
thetaG11	2401	321201	mosek	$-4.000\,000\,00 \times 10^2$	$-3.999\,999\,99 \times 10^2$	$1.54 \times 10^{-9}$	9.91	1.19	1.21
thetaG51	6910	501501	mosek	$-3.490\,005\,47 \times 10^2$	$-3.489\,984\,30 \times 10^2$	$6.07 \times 10^{-6}$	76.08	1.00	1.71
truss1	6	18	mosek	8.999 996 27	8.999 996 43	$1.73 \times 10^{-8}$	0.01	5.52	5.61
truss2	58	331	mosek	$1.233\,803\,56 \times 10^2$	$1.233\,803\,57 \times 10^2$	$8.58 \times 10^{-9}$	0.04	8.51	8.68
truss3	27	91	mosek	9.109 996 20	9.109 996 23	$3.70 \times 10^{-9}$	0.02	4.09	4.48
truss4	12	37	mosek	9.009 996 21	9.009 996 45	$2.65 \times 10^{-8}$	0.01	6.39	7.12
truss5	208	1816	mosek	$1.326\,356\,77 \times 10^2$	$1.326\,356\,79 \times 10^2$	$1.80 \times 10^{-8}$	0.13	3.40	3.48
truss6	172	901	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.21	4.09	$1.45 \times 10^1$
truss7	86	451	mosek	$9.000\,013\,99 \times 10^2$	$9.000\,027\,70 \times 10^2$	$1.52 \times 10^{-6}$	0.10	5.00	$3.09 \times 10^1$
truss8	496	6271	mosek	$1.331\,145\,84 \times 10^2$	$1.331\,145\,95 \times 10^2$	$8.37 \times 10^{-8}$	0.64	1.50	1.61

Tabelle B.3.: Rigorose untere und obere Fehlerschranken für die SPARSE-SDP-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 1. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 3.3.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
buck1	36	661	csdp	$-1.464\,191\,54 \times 10^2$	$-1.464\,191\,51 \times 10^2$	$2.11 \times 10^{-8}$	0.11	2.10	2.31
buck1	36	661	sdpa	$-1.464\,631\,01 \times 10^2$	$-1.087\,434\,98 \times 10^2$	$2.96 \times 10^{-1}$	0.33	4.77	1.35
buck1	36	661	sdpt3	$-1.464\,191\,52 \times 10^2$	$-1.464\,191\,51 \times 10^2$	$5.97 \times 10^{-9}$	1.69	$1.59 \times 10^{-2}$	$9.95 \times 10^{-1}$
buck1	36	661	sedumi	$-1.464\,191\,53 \times 10^2$	$-1.464\,191\,37 \times 10^2$	$1.11 \times 10^{-7}$	0.97	$7.91 \times 10^{-1}$	$8.15 \times 10^{-1}$
buck2	144	9553	csdp	$-\infty$	$-2.923\,682\,79 \times 10^2$	NaN	1.33	1.68	1.09
buck2	144	9553	sdpa	$-2.923\,791\,46 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	4.20	2.03	$1.06 \times 10^1$
buck2	144	9553	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.72	$9.81 \times 10^{-1}$	2.09
buck2	144	9553	sedumi	$-2.923\,682\,98 \times 10^2$	$-2.923\,682\,78 \times 10^2$	$6.66 \times 10^{-8}$	3.11	1.03	1.03
buck3	544	103585	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	88.64	$8.15 \times 10^{-1}$	1.04
buck3	544	103585	sdpa	$-6.076\,925\,28 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	48.92	1.01	9.48
buck3	544	103585	sdpt3	$-6.076\,060\,66 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	8.69	$2.22 \times 10^{-2}$	1.01
buck3	544	103585	sedumi	$-6.076\,180\,29 \times 10^2$	$-6.075\,883\,78 \times 10^2$	$4.88 \times 10^{-5}$	56.85	$9.77 \times 10^{-1}$	$9.66 \times 10^{-1}$
buck4	1200	454129	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	531.45	1.21	1.62
buck4	1200	454129	sdpa	$-4.879\,169\,12 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	270.54	1.02	7.55
buck4	1200	454129	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	33.03	1.09	1.04
buck4	1200	454129	sedumi	$-4.861\,420\,99 \times 10^2$	$-4.861\,418\,92 \times 10^2$	$4.26 \times 10^{-7}$	406.05	1.00	1.99
buck5	3280	3104401	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2944.63	1.01	$9.74 \times 10^{-1}$
buck5	3280	3104401	sdpa	$-4.362\,923\,64 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2886.26	4.03	4.95
buck5	3280	3104401	sdpt3	$-4.362\,608\,68 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	277.32	$6.89 \times 10^{-2}$	1.06
buck5	3280	3104401	sedumi	$-4.362\,822\,26 \times 10^2$	$-4.362\,258\,32 \times 10^2$	$1.29 \times 10^{-4}$	9137.33	1.08	1.26
mater-1	103	1322	csdp	$1.434\,654\,38 \times 10^2$	$1.434\,654\,40 \times 10^2$	$1.41 \times 10^{-8}$	0.72	1.62	$3.02 \times 10^{-1}$
mater-1	103	1322	sdpa	$-\infty$	$1.618\,000\,00 \times 10^2$	NaN	1.20	$1.33 \times 10^1$	6.28
mater-1	103	1322	sdpt3	$1.434\,654\,38 \times 10^2$	$1.434\,654\,41 \times 10^2$	$2.17 \times 10^{-8}$	22.05	$9.15 \times 10^{-3}$	1.02
mater-1	103	1322	sedumi	$1.434\,654\,38 \times 10^2$	$1.434\,654\,43 \times 10^2$	$3.51 \times 10^{-8}$	3.40	$5.95 \times 10^{-2}$	1.13
mater-2	423	6074	csdp	$1.415\,918\,66 \times 10^2$	$1.415\,918\,67 \times 10^2$	$8.80 \times 10^{-9}$	10.70	1.18	$8.95 \times 10^{-2}$
mater-2	423	6074	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	12.64	$1.19 \times 10^1$	$1.19 \times 10^1$
mater-2	423	6074	sdpt3	$1.415\,918\,66 \times 10^2$	$1.415\,918\,67 \times 10^2$	$5.95 \times 10^{-9}$	471.87	$1.95 \times 10^{-3}$	1.01
mater-2	423	6074	sedumi	$1.415\,918\,66 \times 10^2$	$1.415\,918\,84 \times 10^2$	$1.25 \times 10^{-7}$	51.95	1.99	1.01
mater-3	1439	21518	csdp	$1.339\,162\,56 \times 10^2$	$1.339\,162\,57 \times 10^2$	$9.14 \times 10^{-9}$	127.83	1.06	4.18
mater-3	1439	21518	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	125.17	$1.13 \times 10^1$	$1.14 \times 10^1$
mater-3	1439	21518	sedumi	$1.339\,162\,48 \times 10^2$	$1.339\,215\,85 \times 10^2$	$3.99 \times 10^{-5}$	179.80	2.27	5.11

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.3 [SPARSE-SDP (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
mater-4	4807	74978	csdp	$1.342\,627\,16 \times 10^2$	$1.342\,627\,19 \times 10^2$	$2.53 \times 10^{-8}$	1722.95	1.01	9.09
mater-4	4807	74978	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1367.65	$1.11 \times 10^1$	$1.12 \times 10^1$
mater-4	4807	74978	sedumi	$1.342\,626\,80 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	1170.27	1.79	9.70
mater-5	10143	160910	csdp	$1.338\,016\,40 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	10212.04	1.00	$1.11 \times 10^1$
mater-5	10143	160910	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6123.98	$1.10 \times 10^1$	$1.11 \times 10^1$
mater-5	10143	160910	sedumi	$1.338\,015\,95 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	2325.03	$1.03 \times 10^{-2}$	9.88
mater-6	20463	327758	csdp	$1.335\,387\,15 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	62380.01	1.00	$1.11 \times 10^1$
mater-6	20463	327758	sdpa	$-\infty$	$+\infty$	NaN	24713.30	$1.11 \times 10^1$	$1.11 \times 10^1$
mater-6	20463	327758	sedumi	$1.335\,384\,97 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	3955.47	$1.23 \times 10^{-2}$	$1.19 \times 10^1$
shmup1	16	1713	csdp	$-1.884\,149\,94 \times 10^2$	$-1.884\,148\,29 \times 10^2$	$8.71 \times 10^{-7}$	0.23	3.09	1.62
shmup1	16	1713	sdpa	$-1.884\,421\,86 \times 10^2$	$3.382\,105\,32 \times 10^2$	2.00	0.78	1.11	1.15
shmup1	16	1713	sdpt3	$-1.884\,148\,33 \times 10^2$	$-1.884\,148\,29 \times 10^2$	$1.90 \times 10^{-8}$	1.15	$2.38 \times 10^{-2}$	$3.61 \times 10^{-2}$
shmup1	16	1713	sedumi	$-1.884\,148\,41 \times 10^2$	$-1.884\,147\,92 \times 10^2$	$2.59 \times 10^{-7}$	0.99	1.07	1.11
shmup2	200	194881	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	301.90	1.02	$8.45 \times 10^{-1}$
shmup2	200	194881	sdpa	$-3.462\,508\,25 \times 10^3$	$1.136\,481\,30 \times 10^7$	2.00	100.30	$9.98 \times 10^{-1}$	1.71
shmup2	200	194881	sdpt3	$-3.462\,426\,84 \times 10^3$	$-3.462\,426\,38 \times 10^3$	$1.33 \times 10^{-7}$	14.62	1.03	1.06
shmup2	200	194881	sedumi	$-3.462\,429\,03 \times 10^3$	$-3.462\,423\,00 \times 10^3$	$1.74 \times 10^{-6}$	106.38	1.01	$3.66 \times 10^{-3}$
shmup3	420	812641	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2918.09	1.09	$8.93 \times 10^{-1}$
shmup3	420	812641	sdpa	$-2.098\,887\,28 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	516.71	1.02	7.08
shmup3	420	812641	sdpt3	$-2.098\,837\,89 \times 10^3$	$-2.098\,837\,01 \times 10^3$	$4.20 \times 10^{-7}$	65.89	1.07	2.10
shmup3	420	812641	sedumi	$-2.098\,841\,15 \times 10^3$	$-2.098\,832\,08 \times 10^3$	$4.32 \times 10^{-6}$	951.10	$9.98 \times 10^{-1}$	1.00
shmup4	800	2827361	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2809.31	$8.68 \times 10^{-1}$	$9.18 \times 10^{-1}$
shmup4	800	2827361	sdpa	$-7.992\,598\,58 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	2447.14	$6.48 \times 10^{-3}$	5.35
shmup4	800	2827361	sdpt3	$-7.992\,551\,59 \times 10^3$	$-7.992\,544\,50 \times 10^3$	$8.87 \times 10^{-7}$	381.56	1.09	1.07
shmup4	800	2827361	sedumi	$-7.992\,866\,52 \times 10^3$	$-7.992\,069\,08 \times 10^3$	$9.98 \times 10^{-5}$	8866.13	1.01	$1.43 \times 10^{-3}$
shmup5	1800	13849441	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	27042.60	$9.60 \times 10^{-1}$	$7.75 \times 10^{-1}$
shmup5	1800	13849441	sdpa	$-2.385\,914\,39 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	23342.31	$9.99 \times 10^{-1}$	2.89
shmup5	1800	13849441	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2371.37	1.07	1.16
shmup5	1800	13849441	sedumi	$-\infty$	$9.825\,860\,21 \times 10^5$	NaN	93959.42	$2.20 \times 10^{-1}$	$9.97 \times 10^{-1}$
trto1	36	361	csdp	$-1.104\,500\,00 \times 10^3$	$-1.104\,500\,00 \times 10^3$	$5.96 \times 10^{-9}$	0.06	2.44	2.84
trto1	36	361	sdpa	$-1.104\,500\,02 \times 10^3$	$+\infty$	NaN	0.19	$8.37 \times 10^{-2}$	$1.40 \times 10^1$
trto1	36	361	sdpt3	$-1.104\,500\,00 \times 10^3$	$-1.104\,500\,00 \times 10^3$	$2.79 \times 10^{-9}$	0.78	$2.00 \times 10^{-2}$	$3.64 \times 10^{-2}$
trto1	36	361	sedumi	$-1.104\,500\,00 \times 10^3$	$-1.104\,499\,98 \times 10^3$	$1.66 \times 10^{-8}$	0.54	1.13	1.12
trto2	144	4897	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.18	$9.82 \times 10^{-1}$	1.04

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.3 [SPARSE-SDP (System 1)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
trto2	144	4897	sdpa	$-1.280\,015\,41 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	2.16	1.03	$1.08 \times 10^1$
trto2	144	4897	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.10	1.01	1.05
trto2	144	4897	sedumi	$-1.280\,000\,02 \times 10^4$	$-1.279\,999\,83 \times 10^4$	$1.44 \times 10^{-7}$	4.19	$8.60 \times 10^{-1}$	$7.41 \times 10^{-1}$
trto3	544	52225	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	27.51	1.01	$9.57 \times 10^{-1}$
trto3	544	52225	sdpa	$-1.280\,008\,81 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	24.02	$3.90 \times 10^{-3}$	9.70
trto3	544	52225	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	4.04	1.05	1.00
trto3	544	52225	sedumi	$-1.280\,000\,12 \times 10^4$	$-1.279\,999\,94 \times 10^4$	$1.44 \times 10^{-7}$	21.28	1.01	2.03
trto4	1200	228001	sdpa	$-1.276\,591\,83 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	120.46	1.01	8.46
trto4	1200	228001	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	16.17	1.08	1.06
trto4	1200	228001	sedumi	$-1.276\,583\,61 \times 10^4$	$-1.276\,580\,84 \times 10^4$	$2.17 \times 10^{-6}$	189.32	1.89	$9.77 \times 10^{-1}$
trto5	3280	1554721	sdpa	$-1.280\,304\,59 \times 10^4$	$+\infty$	NaN	1162.09	$8.22 \times 10^{-3}$	6.04
trto5	3280	1554721	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	108.98	1.09	1.09
trto5	3280	1554721	sedumi	$-1.280\,123\,72 \times 10^4$	$-1.279\,533\,40 \times 10^4$	$4.61 \times 10^{-4}$	4220.75	$9.52 \times 10^{-1}$	$9.82 \times 10^{-1}$
vibra1	36	661	csdp	$-4.081\,901\,26 \times 10^1$	$-4.081\,901\,22 \times 10^1$	$9.89 \times 10^{-9}$	0.32	$9.52 \times 10^{-1}$	$5.22 \times 10^{-1}$
vibra1	36	661	sdpa	$-4.082\,152\,45 \times 10^1$	$-3.185\,029\,66 \times 10^1$	$2.47 \times 10^{-1}$	0.42	6.57	2.13
vibra1	36	661	sdpt3	$-4.081\,901\,24 \times 10^1$	$-4.081\,901\,23 \times 10^1$	$3.64 \times 10^{-9}$	1.35	$1.94 \times 10^{-2}$	$2.91 \times 10^{-2}$
vibra1	36	661	sedumi	$-4.081\,901\,34 \times 10^1$	$-4.081\,901\,14 \times 10^1$	$4.82 \times 10^{-8}$	1.14	$8.26 \times 10^{-1}$	$8.45 \times 10^{-1}$
vibra2	144	9553	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	2.58	$9.85 \times 10^{-1}$	$9.82 \times 10^{-1}$
vibra2	144	9553	sdpa	$-1.660\,209\,76 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	4.32	$8.18 \times 10^{-3}$	$1.04 \times 10^1$
vibra2	144	9553	sdpt3	$-1.660\,153\,65 \times 10^2$	$-1.660\,153\,34 \times 10^2$	$1.86 \times 10^{-7}$	1.89	$1.89 \times 10^{-2}$	$2.54 \times 10^{-2}$
vibra2	144	9553	sedumi	$-1.660\,153\,92 \times 10^2$	$-1.660\,153\,13 \times 10^2$	$4.74 \times 10^{-7}$	2.76	1.03	1.04
vibra3	544	103585	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	81.57	$9.29 \times 10^{-1}$	$9.31 \times 10^{-1}$
vibra3	544	103585	sdpa	$-1.726\,225\,05 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	50.69	1.01	9.10
vibra3	544	103585	sdpt3	$-1.726\,132\,00 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	8.67	$2.01 \times 10^{-2}$	1.02
vibra3	544	103585	sedumi	$-1.726\,131\,84 \times 10^2$	$-1.726\,128\,28 \times 10^2$	$2.06 \times 10^{-6}$	48.28	1.01	$4.18 \times 10^{-3}$
vibra4	1200	454129	csdp	$-\infty$	$+\infty$	NaN	532.00	$9.70 \times 10^{-1}$	$9.89 \times 10^{-1}$
vibra4	1200	454129	sdpa	$-1.656\,169\,77 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	263.01	2.02	7.72
vibra4	1200	454129	sdpt3	$-\infty$	$+\infty$	NaN	41.34	1.04	1.04
vibra4	1200	454129	sedumi	$-1.656\,148\,58 \times 10^2$	$-1.656\,111\,52 \times 10^2$	$2.24 \times 10^{-5}$	391.06	1.00	$3.02 \times 10^{-3}$
vibra5	3280	3104401	sdpa	$-1.659\,069\,89 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	3143.55	$6.05 \times 10^{-3}$	4.50
vibra5	3280	3104401	sdpt3	$-1.659\,044\,45 \times 10^2$	$+\infty$	NaN	436.75	$4.37 \times 10^{-2}$	1.04
vibra5	3280	3104401	sedumi	$-1.659\,070\,01 \times 10^2$	$-1.659\,002\,59 \times 10^2$	$4.06 \times 10^{-5}$	11181.51	$9.80 \times 10^{-1}$	$9.93 \times 10^{-1}$

Tabelle B.4.: Rigorose untere und obere Fehlerschranken für die SPARSE-SDP-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 3.3.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
buck1	36	661	mosek	$-1.464\,191\,55 \times 10^2$	$-1.464\,191\,18 \times 10^2$	$2.52 \times 10^{-7}$	0.06	7.86	7.03
buck2	144	9553	mosek	$-\infty$	$-2.923\,681\,88 \times 10^2$	NaN	0.32	1.24	1.19
buck3	544	103585	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	8.19	$9.00 \times 10^{-1}$	$9.48 \times 10^{-1}$
buck4	1200	454129	mosek	$-4.861\,421\,67 \times 10^2$	$-4.861\,392\,50 \times 10^2$	$6.00 \times 10^{-6}$	38.54	$8.05 \times 10^{-1}$	$8.11 \times 10^{-1}$
buck5	3280	3104401	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	787.56	1.17	1.10
mater-1	103	1322	mosek	$1.434\,654\,38 \times 10^2$	$1.434\,654\,45 \times 10^2$	$4.94 \times 10^{-8}$	0.04	1.35	3.93
mater-2	423	6074	mosek	$1.415\,918\,66 \times 10^2$	$1.415\,918\,74 \times 10^2$	$5.46 \times 10^{-8}$	0.16	4.82	5.80
mater-3	1439	21518	mosek	$1.339\,162\,56 \times 10^2$	$1.339\,162\,62 \times 10^2$	$4.62 \times 10^{-8}$	0.64	1.84	8.35
mater-4	4807	74978	mosek	$1.342\,627\,16 \times 10^2$	$1.342\,627\,25 \times 10^2$	$6.72 \times 10^{-8}$	2.36	1.91	$1.72 \times 10^1$
mater-5	10143	160910	mosek	$1.338\,016\,40 \times 10^2$	$1.338\,016\,51 \times 10^2$	$8.64 \times 10^{-8}$	5.15	1.63	4.78
mater-6	20463	327758	mosek	$1.335\,387\,15 \times 10^2$	$1.335\,387\,52 \times 10^2$	$2.80 \times 10^{-7}$	12.70	1.51	$1.44 \times 10^1$
shmup1	16	1713	mosek	$-1.884\,148\,34 \times 10^2$	$-1.884\,146\,37 \times 10^2$	$1.04 \times 10^{-6}$	0.05	1.51	2.98
shmup2	200	194881	mosek	$-3.462\,426\,86 \times 10^3$	$-3.462\,422\,82 \times 10^3$	$1.17 \times 10^{-6}$	9.38	1.04	$9.58 \times 10^{-1}$
shmup3	420	812641	mosek	$-\infty$	$-2.098\,822\,39 \times 10^3$	NaN	65.08	1.20	1.02
shmup4	800	2827361	mosek	$-\infty$	$-7.992\,514\,32 \times 10^3$	NaN	583.49	$8.02 \times 10^{-1}$	$8.38 \times 10^{-1}$
shmup5	1800	13849441	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6513.42	$7.88 \times 10^{-1}$	1.22
trto1	36	361	mosek	$-1.104\,500\,01 \times 10^3$	$-1.104\,499\,93 \times 10^3$	$7.28 \times 10^{-8}$	0.04	1.27	1.18
trto2	144	4897	mosek	$-\infty$	$-1.279\,999\,62 \times 10^4$	NaN	0.21	1.47	1.15
trto3	544	52225	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	5.71	1.33	1.09
trto4	1200	228001	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	41.91	1.23	$9.75 \times 10^{-1}$
trto5	3280	1554721	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	511.31	$9.41 \times 10^{-1}$	$9.32 \times 10^{-1}$
vibra1	36	661	mosek	$-4.081\,901\,54 \times 10^1$	$-4.081\,900\,24 \times 10^1$	$3.20 \times 10^{-7}$	0.03	1.61	1.84
vibra2	144	9553	mosek	$-\infty$	$-1.660\,153\,43 \times 10^2$	NaN	0.40	1.04	$8.42 \times 10^{-1}$
vibra3	544	103585	mosek	$-\infty$	$-1.726\,127\,10 \times 10^2$	NaN	7.73	$9.31 \times 10^{-1}$	$8.45 \times 10^{-1}$
vibra4	1200	454129	mosek	$-1.656\,134\,87 \times 10^2$	$-1.656\,128\,89 \times 10^2$	$3.61 \times 10^{-6}$	36.23	1.00	1.01
vibra5	3280	3104401	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	838.91	1.45	1.40

Tabelle B.5.: Rigorose untere und obere Fehlerschranken für die DIMACS-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 3.3.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
bm1	883	389403	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	49.24	1.05	1.11
copo14	1275	1834	mosek	$-1.255\,066\,16 \times 10^{-9}$	$8.661\,419\,81 \times 10^{-10}$	$2.12 \times 10^{-9}$	0.25	1.50	1.52
copo23	5820	8119	mosek	$-8.730\,702\,74 \times 10^{-9}$	$5.154\,209\,73 \times 10^{-9}$	$1.39 \times 10^{-8}$	3.84	$2.56 \times 10^{-2}$	$9.23 \times 10^{-1}$
copo68	154905	209644	mosek	$-4.235\,311\,69 \times 10^{-8}$	$2.265\,522\,43 \times 10^{-8}$	$6.50 \times 10^{-8}$	11768.10	$3.82 \times 10^{-5}$	$7.32 \times 10^{-1}$
fap09	30276	43275	mosek	$1.079\,746\,16 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1647.95	4.64	$1.75 \times 10^{-5}$
filter48_socp	969	2156	mosek	1.416 129 02	1.416 144 31	$1.08 \times 10^{-5}$	0.15	2.40	1.33
filtinfl	983	2219	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.17	1.10	4.67
hamming_10_2	23041	524800	mosek	$-1.024\,000\,00 \times 10^2$	$-1.023\,999\,99 \times 10^2$	$7.01 \times 10^{-9}$	249.19	1.17	1.03
hamming_11_2	56321	2098176	mosek	$-1.706\,666\,67 \times 10^2$	$-1.706\,663\,91 \times 10^2$	$1.62 \times 10^{-6}$	2159.49	1.18	1.03
hamming_7_5_6	1793	8256	mosek	$-4.266\,666\,67 \times 10^1$	$-4.266\,666\,67 \times 10^1$	$4.31 \times 10^{-12}$	0.66	1.01	1.06
hamming_8_3_4	16129	32896	mosek	$-2.560\,000\,00 \times 10^1$	$-2.559\,999\,98 \times 10^1$	$8.90 \times 10^{-9}$	97.33	$9.99 \times 10^{-1}$	$9.96 \times 10^{-1}$
hamming_9_5_6	53761	131328	mosek	$-8.533\,333\,34 \times 10^1$	$-8.533\,333\,33 \times 10^1$	$1.60 \times 10^{-9}$	1932.97	1.99	1.12
hamming_9_8	2305	131328	mosek	$-2.240\,000\,00 \times 10^2$	$-2.240\,000\,00 \times 10^2$	$7.76 \times 10^{-10}$	2.82	1.10	1.12
hinf12	43	120	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.03	4.61	$1.62 \times 10^1$
hinf13	57	178	mosek	$-4.434\,660\,41 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.06	$1.91 \times 10^{-1}$	1.01
minphase	48	1176	mosek	5.982 512 25	$+\infty$	NaN	0.11	$5.09 \times 10^{-2}$	$9.64 \times 10^{-1}$
nb_L1	915	3176	mosek	$-\infty$	$-1.301\,227\,06 \times 10^1$	NaN	0.23	$5.00 \times 10^1$	$1.26 \times 10^1$
nb_L2	123	4195	mosek	$-\infty$	-1.628 971 98	NaN	0.18	$3.06 \times 10^1$	$1.45 \times 10^1$
nb_L2_bessel	123	2641	mosek	$-\infty$	$-1.025\,695\,11 \times 10^{-1}$	NaN	0.13	$5.56 \times 10^1$	9.58
nb	123	2383	mosek	$-\infty$	$-5.070\,309\,36 \times 10^{-2}$	NaN	0.16	$1.02 \times 10^2$	$3.32 \times 10^1$
nql180	130080	226802	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	6.54	$5.87 \times 10^1$	3.82
nql180old	129601	292560	mosek	$-\infty$	$9.407\,477\,69 \times 10^{-1}$	NaN	11.19	4.60	$4.86 \times 10^1$
nql30	3680	6302	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.14	$7.50 \times 10^1$	$6.47 \times 10^{-1}$
nql30old	3601	8260	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.21	$2.19 \times 10^1$	$6.09 \times 10^1$
nql60	14560	25202	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.60	$6.57 \times 10^1$	1.07
nql60old	14401	32720	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.03	$1.36 \times 10^1$	$5.16 \times 10^1$
qssp180	130141	261366	mosek	-6.639 768 02	-6.637 244 44	$3.80 \times 10^{-4}$	5.98	$2.38 \times 10^1$	$4.36 \times 10^1$
qssp180old	196024	390964	mosek	$-\infty$	6.640 288 14	NaN	6.43	$1.34 \times 10^2$	$2.38 \times 10^1$
qssp30	3691	7566	mosek	-6.496 678 99	-6.496 669 35	$1.48 \times 10^{-6}$	0.14	$2.78 \times 10^1$	$2.78 \times 10^1$
qssp30old	5674	11164	mosek	$-\infty$	6.496 678 99	NaN	0.16	$1.39 \times 10^2$	$2.46 \times 10^1$
qssp60	14581	29526	mosek	-6.562 711 67	-6.562 692 69	$2.89 \times 10^{-6}$	0.54	$2.81 \times 10^1$	$4.44 \times 10^1$

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.5 [DIMACS (System 2)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{f}_p$	$\overline{f}_d$	$\mu(\overline{f}_d, \underline{f}_p)$	$t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
qssp60old	22144	43924	mosek	$-\infty$	6.562 711 67	NaN	0.64	$1.36 \times 10^2$	$2.40 \times 10^1$
sched_100_100_orig	8338	18240	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.86	1.01	$5.11 \times 10^{-2}$
sched_100_100_scaled	8337	18238	mosek	$2.733\,074\,36 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.39	1.03	$8.95 \times 10^{-2}$
sched_100_50_orig	4844	9746	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	0.38	1.36	$5.98 \times 10^{-2}$
sched_100_50_scaled	4843	9744	mosek	$6.716\,502\,11 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	0.22	1.04	$1.07 \times 10^{-1}$
sched_200_100_orig	18087	37889	mosek	$-\infty$	$+\infty$	NaN	1.67	1.41	1.16
sched_200_100_scaled	18086	37887	mosek	$5.181\,191\,23 \times 10^1$	$+\infty$	NaN	1.03	$7.70 \times 10^{-3}$	$7.71 \times 10^{-2}$
sched_50_50_orig	2527	4979	mosek	$2.667\,299\,63 \times 10^4$	$2.667\,357\,94 \times 10^4$	$2.19 \times 10^{-5}$	0.17	1.16	2.07
sched_50_50_scaled	2526	4977	mosek	7.852 028 08	7.852 298 12	$3.44 \times 10^{-5}$	0.09	1.09	1.32
torusg3-15	3375	5697000	mosek	$-3.188\,109\,81 \times 10^8$	$-3.188\,108\,10 \times 10^8$	$5.36 \times 10^{-7}$	438.44	1.05	1.06
torusg3-8	512	131328	mosek	$-4.834\,095\,33 \times 10^7$	$-4.834\,091\,76 \times 10^7$	$7.39 \times 10^{-7}$	2.29	1.07	1.09
toruspm3-15-50	3375	5697000	mosek	$-3.474\,796\,12 \times 10^3$	$-3.474\,793\,99 \times 10^3$	$6.13 \times 10^{-7}$	389.19	1.07	$1.77 \times 10^{-2}$
toruspm3-8-50	512	131328	mosek	$-5.278\,088\,16 \times 10^2$	$-5.278\,086\,46 \times 10^2$	$3.21 \times 10^{-7}$	2.52	1.09	$9.47 \times 10^{-1}$
truss5	208	1816	mosek	$1.326\,356\,77 \times 10^2$	$1.326\,356\,79 \times 10^2$	$1.80 \times 10^{-8}$	0.10	2.88	2.91
truss8	496	6271	mosek	$1.331\,145\,84 \times 10^2$	$1.331\,145\,95 \times 10^2$	$8.37 \times 10^{-8}$	0.57	1.41	1.37

Tabelle B.6.: Rigorose obere und untere Fehlerschranken für die ESC-Bibliothek. Alle Berechnungen erfolgten mit System 2. Für eine Beschreibung, siehe Abschnitt 4.4.

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{E}_2$	$\underline{E} - \underline{E}_2$	$\overline{E}$	$\mu(\overline{E}, \underline{E}_2)$	$\mu(\overline{E}, \underline{E})$	$t_s$	$\underline{t}_2/t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
AIH	7230	2569260	mosek	$-2.415\,074\,75 \times 10^2$	$-3.11 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	5525.00	$2.69 \times 10^{-4}$	1.92	1.43
AIH	7230	2569260	sdpt3	$-2.415\,072\,97 \times 10^2$	$4.79 \times 10^{-7}$	$-2.415\,072\,92 \times 10^2$	$2.10 \times 10^{-8}$	$1.90 \times 10^{-8}$	35630.92	$4.12 \times 10^{-5}$	1.01	$4.51 \times 10^{-5}$
B2	7230	2569260	mosek	$-4.901\,650\,98 \times 10^1$	$-\infty$	$+\infty$	NaN	NaN	7252.70	$2.03 \times 10^{-4}$	$9.36 \times 10^{-1}$	$5.22 \times 10^{-3}$
B2	7230	2569260	sdpt3	$-4.901\,594\,49 \times 10^1$	$-\infty$	$-4.901\,575\,86 \times 10^1$	$3.80 \times 10^{-6}$	NaN	32243.62	$4.13 \times 10^{-5}$	1.00	$5.25 \times 10^{-5}$
BF	7230	2569260	mosek	$-1.236\,124\,93 \times 10^2$	$-2.38 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	5490.66	$2.57 \times 10^{-4}$	1.05	1.26
BF	7230	2569260	sdpt3	$-1.236\,124\,28 \times 10^2$	$4.56 \times 10^{-7}$	$-1.236\,124\,21 \times 10^2$	$5.34 \times 10^{-8}$	$4.97 \times 10^{-8}$	35792.27	$3.45 \times 10^{-5}$	1.00	$4.47 \times 10^{-5}$
BH+	948	116692	mosek	$-2.480\,145\,26 \times 10^1$	$-3.10 \times 10^{-5}$	$-2.480\,143\,76 \times 10^1$	$6.09 \times 10^{-7}$	$1.86 \times 10^{-6}$	22.58	$5.64 \times 10^{-3}$	1.00	3.43
BH+	948	116692	sdpt3	$-2.480\,144\,42 \times 10^1$	$1.99 \times 10^{-10}$	$-2.480\,144\,37 \times 10^1$	$1.95 \times 10^{-8}$	$1.95 \times 10^{-8}$	125.54	$1.02 \times 10^{-3}$	$1.27 \times 10^{-3}$	$1.09 \times 10^{-3}$
BH2	1743	296271	mosek	$-2.570\,316\,55 \times 10^1$	$-1.82 \times 10^{-5}$	$-2.570\,314\,70 \times 10^1$	$7.18 \times 10^{-7}$	$1.42 \times 10^{-6}$	150.29	$1.25 \times 10^{-3}$	1.87	2.84
BH2	1743	296271	sdpt3	$-2.570\,315\,54 \times 10^1$	$1.58 \times 10^{-8}$	$-2.570\,315\,51 \times 10^1$	$1.23 \times 10^{-8}$	$1.17 \times 10^{-8}$	631.70	$2.98 \times 10^{-4}$	1.04	$4.31 \times 10^{-4}$
BH	948	116692	mosek	$-2.505\,940\,63 \times 10^1$	$-1.65 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	27.94	$4.67 \times 10^{-3}$	$9.12 \times 10^{-1}$	1.23
BH	948	116692	sdpt3	$-2.505\,940\,00 \times 10^1$	$2.30 \times 10^{-9}$	$-2.505\,939\,96 \times 10^1$	$1.88 \times 10^{-8}$	$1.87 \times 10^{-8}$	133.48	$9.69 \times 10^{-4}$	$1.20 \times 10^{-3}$	$1.05 \times 10^{-3}$
BO	7230	2569260	mosek	$-9.925\,880\,27 \times 10^1$	$1.36 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6516.00	$2.22 \times 10^{-4}$	2.04	1.08
BO	7230	2569260	sdpt3	$-9.925\,869\,01 \times 10^1$	$-\infty$	$-9.925\,859\,16 \times 10^1$	$9.93 \times 10^{-7}$	NaN	33995.41	$4.14 \times 10^{-5}$	$9.96 \times 10^{-1}$	$4.86 \times 10^{-5}$
BeF	7230	2569260	mosek	$-1.136\,410\,29 \times 10^2$	$-1.24 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	5650.37	$2.35 \times 10^{-4}$	1.05	1.65
BeF	7230	2569260	sdpt3	$-1.136\,409\,31 \times 10^2$	$2.64 \times 10^{-6}$	$-1.136\,409\,17 \times 10^2$	$1.20 \times 10^{-7}$	$9.65 \times 10^{-8}$	35853.85	$3.88 \times 10^{-5}$	3.02	$4.49 \times 10^{-5}$
BeH	948	116692	mosek	$-1.511\,629\,16 \times 10^1$	$-2.58 \times 10^{-5}$	$-1.511\,628\,31 \times 10^1$	$5.63 \times 10^{-7}$	$2.27 \times 10^{-6}$	25.37	$5.12 \times 10^{-3}$	1.05	2.04
BeH	948	116692	sdpt3	$-1.511\,628\,47 \times 10^1$	$2.27 \times 10^{-10}$	$-1.511\,628\,45 \times 10^1$	$1.44 \times 10^{-8}$	$1.44 \times 10^{-8}$	128.01	$1.02 \times 10^{-3}$	$1.29 \times 10^{-3}$	$1.07 \times 10^{-3}$
BeO	7230	2569260	mosek	$-8.920\,149\,38 \times 10^1$	$-2.90 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6224.19	$2.15 \times 10^{-4}$	1.04	1.27
BeO	7230	2569260	sdpt3	$-8.920\,140\,42 \times 10^1$	$-2.61 \times 10^{-5}$	$-8.920\,139\,48 \times 10^1$	$1.06 \times 10^{-7}$	$3.98 \times 10^{-7}$	34196.80	$4.23 \times 10^{-5}$	$9.90 \times 10^{-1}$	$4.88 \times 10^{-5}$
C2+	7230	2569260	mosek	$-7.507\,817\,29 \times 10^1$	$-\infty$	$+\infty$	NaN	NaN	8108.61	$1.68 \times 10^{-4}$	2.01	1.08
C2+	7230	2569260	sdpt3	$-7.507\,792\,62 \times 10^1$	$-\infty$	$-7.507\,784\,04 \times 10^1$	$1.14 \times 10^{-6}$	NaN	33146.56	$4.40 \times 10^{-5}$	$9.98 \times 10^{-1}$	$4.75 \times 10^{-5}$
C2-	7230	2569260	mosek	$-7.531\,592\,66 \times 10^1$	$-\infty$	$+\infty$	NaN	NaN	7387.23	$1.81 \times 10^{-4}$	$9.24 \times 10^{-1}$	1.06
C2-	7230	2569260	sdpt3	$-7.531\,535\,58 \times 10^1$	$-\infty$	$-7.531\,527\,88 \times 10^1$	$1.02 \times 10^{-6}$	NaN	34016.78	$4.19 \times 10^{-5}$	$9.99 \times 10^{-1}$	$4.66 \times 10^{-5}$
C2	7230	2569260	mosek	$-7.543\,822\,04 \times 10^1$	$-1.78 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	7240.81	$1.91 \times 10^{-4}$	$9.97 \times 10^{-1}$	1.44
C2	7230	2569260	sdpt3	$-7.543\,796\,53 \times 10^1$	$-1.93 \times 10^{-5}$	$-7.543\,795\,38 \times 10^1$	$1.52 \times 10^{-7}$	$4.09 \times 10^{-7}$	31066.17	$4.30 \times 10^{-5}$	$9.98 \times 10^{-1}$	$5.20 \times 10^{-5}$
CH+	948	116692	mosek	$-3.788\,524\,34 \times 10^1$	$-2.47 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	26.77	$4.81 \times 10^{-3}$	1.01	1.41
CH+	948	116692	sdpt3	$-3.788\,523\,29 \times 10^1$	$1.41 \times 10^{-9}$	$-3.788\,523\,27 \times 10^1$	$5.34 \times 10^{-9}$	$5.30 \times 10^{-9}$	127.75	$1.06 \times 10^{-3}$	$1.30 \times 10^{-3}$	$1.11 \times 10^{-3}$
CH-	948	116692	mosek	$-3.796\,722\,24 \times 10^1$	$-1.22 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	22.15	$6.09 \times 10^{-3}$	1.01	1.95
CH-	948	116692	sdpt3	$-3.796\,721\,77 \times 10^1$	$3.40 \times 10^{-9}$	$-3.796\,721\,73 \times 10^1$	$1.19 \times 10^{-8}$	$1.18 \times 10^{-8}$	123.79	$1.04 \times 10^{-3}$	$1.38 \times 10^{-3}$	$1.12 \times 10^{-3}$
CH2_1A1	1743	296271	mosek	$-3.881\,076\,09 \times 10^1$	$-4.19 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	140.67	$1.42 \times 10^{-3}$	1.80	1.34

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.6 [ESC (System 2)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{E}_2$	$\underline{E} - \underline{E}_2$	$\overline{E}$	$\mu(\overline{E}, \underline{E}_2)$	$\mu(\overline{E}, \underline{E})$	$t_s$	$\underline{t}_2/t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
CH2_1A1	1743	296271	sdpt3	$-3.881\,073\,57 \times 10^1$	$-6.77 \times 10^{-8}$	$-3.881\,073\,52 \times 10^1$	$1.46 \times 10^{-8}$	$1.63 \times 10^{-8}$	574.27	$3.49 \times 10^{-4}$	$9.99 \times 10^{-1}$	$6.05 \times 10^{-4}$
CH2_3B1	1743	296271	mosek	$-3.885\,337\,05 \times 10^1$	$-4.07 \times 10^{-5}$	$-3.885\,332\,37 \times 10^1$	$1.21 \times 10^{-6}$	$2.25 \times 10^{-6}$	124.85	$1.62 \times 10^{-3}$	3.15	2.38
CH2_3B1	1743	296271	sdpt3	$-3.885\,334\,57 \times 10^1$	$5.02 \times 10^{-8}$	$-3.885\,334\,53 \times 10^1$	$9.04 \times 10^{-9}$	$7.75 \times 10^{-9}$	595.74	$3.38 \times 10^{-4}$	1.99	$3.21 \times 10^{-4}$
CH	948	116692	mosek	$-3.818\,709\,22 \times 10^1$	$-2.06 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	28.23	$4.60 \times 10^{-3}$	1.04	4.16
CH	948	116692	sdpt3	$-3.818\,708\,65 \times 10^1$	$-\infty$	$-3.818\,708\,64 \times 10^1$	$3.80 \times 10^{-9}$	NaN	124.80	$1.05 \times 10^{-3}$	$9.67 \times 10^{-1}$	$1.15 \times 10^{-3}$
CO+	7230	2569260	mosek	$-1.120\,373\,54 \times 10^2$	$-1.33 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	7641.87	$1.74 \times 10^{-4}$	2.93	1.04
CO+	7230	2569260	sdpt3	$-1.120\,372\,88 \times 10^2$	$-\infty$	$+\infty$	NaN	NaN	34886.36	$4.21 \times 10^{-5}$	$9.99 \times 10^{-1}$	$9.47 \times 10^{-1}$
CO	7230	2569260	mosek	$-1.124\,438\,99 \times 10^2$	$-3.79 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6193.79	$2.41 \times 10^{-4}$	1.00	$6.71 \times 10^{-3}$
CO	7230	2569260	sdpt3	$-1.124\,437\,91 \times 10^2$	$-3.86 \times 10^{-7}$	$-1.124\,437\,85 \times 10^2$	$5.01 \times 10^{-8}$	$5.35 \times 10^{-8}$	33287.37	$4.41 \times 10^{-5}$	$9.91 \times 10^{-1}$	$4.79 \times 10^{-5}$
H2O+	1743	296271	mosek	$-7.541\,874\,92 \times 10^1$	$-7.70 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	136.66	$1.50 \times 10^{-3}$	$9.85 \times 10^{-1}$	3.14
H2O+	1743	296271	sdpt3	$-7.541\,872\,10 \times 10^1$	$1.21 \times 10^{-7}$	$-7.541\,872\,00 \times 10^1$	$1.37 \times 10^{-8}$	$1.21 \times 10^{-8}$	626.91	$3.25 \times 10^{-4}$	1.00	$3.64 \times 10^{-4}$
H2O	1743	296271	mosek	$-7.572\,873\,64 \times 10^1$	$-3.01 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	127.27	$1.82 \times 10^{-3}$	1.03	1.46
H2O	1743	296271	sdpt3	$-7.572\,872\,50 \times 10^1$	$7.81 \times 10^{-9}$	$-7.572\,872\,45 \times 10^1$	$7.05 \times 10^{-9}$	$6.95 \times 10^{-9}$	610.42	$3.31 \times 10^{-4}$	$7.88 \times 10^{-4}$	$5.59 \times 10^{-4}$
H3O+	2964	664922	mosek	$-7.610\,482\,54 \times 10^1$	$-1.19 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	601.25	$6.77 \times 10^{-4}$	1.03	1.42
H3O+	2964	664922	sdpt3	$-7.610\,477\,67 \times 10^1$	$8.69 \times 10^{-8}$	$-7.610\,477\,57 \times 10^1$	$1.24 \times 10^{-8}$	$1.13 \times 10^{-8}$	2652.76	$1.51 \times 10^{-4}$	$9.90 \times 10^{-1}$	$1.61 \times 10^{-4}$
HF+	948	116692	mosek	$-9.912\,784\,73 \times 10^1$	$-5.36 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	21.42	$6.36 \times 10^{-3}$	1.02	2.51
HF+	948	116692	sdpt3	$-9.912\,782\,99 \times 10^1$	$1.07 \times 10^{-9}$	$-9.912\,782\,87 \times 10^1$	$1.18 \times 10^{-8}$	$1.18 \times 10^{-8}$	120.85	$1.11 \times 10^{-3}$	$1.39 \times 10^{-3}$	$1.18 \times 10^{-3}$
HF	948	116692	mosek	$-9.952\,566\,41 \times 10^1$	$-4.07 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	18.88	$7.22 \times 10^{-3}$	1.00	2.35
HF	948	116692	sdpt3	$-9.952\,565\,08 \times 10^1$	$4.04 \times 10^{-9}$	$-9.952\,565\,01 \times 10^1$	$7.18 \times 10^{-9}$	$7.14 \times 10^{-9}$	102.89	$1.34 \times 10^{-3}$	$1.75 \times 10^{-3}$	$1.46 \times 10^{-3}$
HS+	7230	2569260	mosek	$-3.964\,986\,23 \times 10^2$	$-1.81 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	5905.68	$2.29 \times 10^{-4}$	1.00	1.76
HS+	7230	2569260	sdpt3	$-3.964\,985\,61 \times 10^2$	$1.18 \times 10^{-7}$	$-3.964\,985\,53 \times 10^2$	$1.96 \times 10^{-8}$	$1.93 \times 10^{-8}$	34217.47	$3.89 \times 10^{-5}$	$6.67 \times 10^{-5}$	$4.52 \times 10^{-5}$
Li2	7230	2569260	mosek	$-1.483\,765\,15 \times 10^1$	$-3.99 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	7039.65	$1.93 \times 10^{-4}$	1.00	1.43
Li2	7230	2569260	sdpt3	$-1.483\,763\,83 \times 10^1$	$-1.31 \times 10^{-7}$	$-1.483\,763\,81 \times 10^1$	$1.47 \times 10^{-8}$	$2.35 \times 10^{-8}$	34954.88	$4.28 \times 10^{-5}$	$9.97 \times 10^{-1}$	$4.55 \times 10^{-5}$
LiF	7230	2569260	mosek	$-1.064\,440\,14 \times 10^2$	$-1.96 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6221.43	$2.13 \times 10^{-4}$	$9.87 \times 10^{-1}$	1.34
LiF	7230	2569260	sdpt3	$-1.064\,439\,76 \times 10^2$	$-2.44 \times 10^{-6}$	$-1.064\,439\,73 \times 10^2$	$3.34 \times 10^{-8}$	$5.63 \times 10^{-8}$	34121.79	$4.00 \times 10^{-5}$	$9.98 \times 10^{-1}$	$4.48 \times 10^{-5}$
LiH	948	116692	mosek	$-7.972\,335\,39$	$-5.17 \times 10^{-6}$	$+\infty$	NaN	NaN	25.92	$5.14 \times 10^{-3}$	2.02	2.74
LiH	948	116692	sdpt3	$-7.972\,330\,87$	$6.97 \times 10^{-11}$	$-7.972\,330\,72$	$1.81 \times 10^{-8}$	$1.81 \times 10^{-8}$	130.70	$9.94 \times 10^{-4}$	$2.50 \times 10^{-3}$	$2.58 \times 10^{-3}$
N2+	7230	2569260	mosek	$-1.082\,244\,90 \times 10^2$	$6.01 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	7593.40	$1.80 \times 10^{-4}$	1.98	1.05
N2+	7230	2569260	sdpt3	$-1.082\,237\,81 \times 10^2$	$-\infty$	$-1.082\,237\,32 \times 10^2$	$4.53 \times 10^{-7}$	NaN	34315.69	$3.75 \times 10^{-5}$	$9.69 \times 10^{-1}$	$4.71 \times 10^{-5}$
N2	7230	2569260	mosek	$-1.087\,017\,26 \times 10^2$	$-1.65 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	5852.11	$2.22 \times 10^{-4}$	1.01	1.48
N2	7230	2569260	sdpt3	$-1.087\,016\,78 \times 10^2$	$-3.04 \times 10^{-6}$	$-1.087\,016\,75 \times 10^2$	$2.71 \times 10^{-8}$	$5.50 \times 10^{-8}$	32961.68	$4.15 \times 10^{-5}$	3.02	$4.80 \times 10^{-5}$
NF	7230	2569260	mosek	$-1.532\,449\,40 \times 10^2$	$-8.96 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	6458.59	$2.01 \times 10^{-4}$	$9.98 \times 10^{-1}$	$6.53 \times 10^{-3}$
NF	7230	2569260	sdpt3	$-1.532\,448\,75 \times 10^2$	$2.65 \times 10^{-7}$	$-1.532\,448\,72 \times 10^2$	$1.69 \times 10^{-8}$	$1.52 \times 10^{-8}$	37465.19	$3.47 \times 10^{-5}$	2.02	$4.19 \times 10^{-5}$
NH+	948	116692	mosek	$-5.439\,746\,50 \times 10^1$	$-4.39 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	26.82	$5.00 \times 10^{-3}$	1.02	1.26

wird fortgesetzt ...

... Fortsetzung Tabelle B.6 [ESC (System 2)]

Name	$m$	$n$	Löser	$\underline{E}_2$	$\underline{E} - \underline{E}_2$	$\overline{E}$	$\mu(\overline{E}, \underline{E}_2)$	$\mu(\overline{E}, \underline{E})$	$t_s$	$\underline{t}_2/t_s$	$\underline{t}/t_s$	$\overline{t}/t_s$
NH+	948	116692	sdpt3	$-5.439\,745\,49 \times 10^1$	$6.54 \times 10^{-9}$	$-5.439\,745\,46 \times 10^1$	$4.48 \times 10^{-9}$	$4.36 \times 10^{-9}$	123.77	$1.07 \times 10^{-3}$	$1.35 \times 10^{-3}$	$1.22 \times 10^{-3}$
NH-	948	116692	mosek	$-5.451\,669\,09 \times 10^1$	$-1.93 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	29.52	$4.37 \times 10^{-3}$	1.66	1.26
NH-	948	116692	sdpt3	$-5.451\,668\,30 \times 10^1$	$3.49 \times 10^{-10}$	$-5.451\,668\,20 \times 10^1$	$1.72 \times 10^{-8}$	$1.72 \times 10^{-8}$	124.35	$1.05 \times 10^{-3}$	$1.37 \times 10^{-3}$	$1.15 \times 10^{-3}$
NH2	1743	296271	mosek	$-5.541\,572\,37 \times 10^1$	$-3.51 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	146.75	$1.44 \times 10^{-3}$	1.89	1.29
NH2	1743	296271	sdpt3	$-5.541\,570\,76 \times 10^1$	$7.09 \times 10^{-8}$	$-5.541\,570\,67 \times 10^1$	$1.64 \times 10^{-8}$	$1.51 \times 10^{-8}$	630.89	$3.63 \times 10^{-4}$	2.01	$3.77 \times 10^{-4}$
NH3	2964	664922	mosek	$-5.601\,448\,17 \times 10^1$	$-4.89 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	665.86	$5.65 \times 10^{-4}$	$9.93 \times 10^{-1}$	1.53
NH3	2964	664922	sdpt3	$-5.601\,436\,74 \times 10^1$	$-7.05 \times 10^{-7}$	$-5.601\,436\,67 \times 10^1$	$1.35 \times 10^{-8}$	$2.61 \times 10^{-8}$	2732.15	$1.40 \times 10^{-4}$	2.00	$1.46 \times 10^{-4}$
NH	948	116692	mosek	$-5.481\,617\,56 \times 10^1$	$-2.08 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	21.98	$5.97 \times 10^{-3}$	2.00	1.99
NH	948	116692	sdpt3	$-5.481\,617\,08 \times 10^1$	$6.07 \times 10^{-9}$	$-5.481\,616\,97 \times 10^1$	$1.92 \times 10^{-8}$	$1.90 \times 10^{-8}$	115.74	$1.16 \times 10^{-3}$	$1.43 \times 10^{-3}$	$1.18 \times 10^{-3}$
NO-	7230	2569260	mosek	$-1.286\,657\,86 \times 10^2$	$-7.84 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	6607.04	$2.05 \times 10^{-4}$	1.95	1.33
NO-	7230	2569260	sdpt3	$-1.286\,657\,25 \times 10^2$	$6.45 \times 10^{-7}$	$-1.286\,657\,22 \times 10^2$	$2.16 \times 10^{-8}$	$1.66 \times 10^{-8}$	37613.65	$3.51 \times 10^{-5}$	1.00	$4.12 \times 10^{-5}$
NaH	7230	2569260	mosek	$-1.617\,381\,20 \times 10^2$	$-1.09 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6002.38	$2.21 \times 10^{-4}$	2.02	1.64
NaH	7230	2569260	sdpt3	$-1.617\,379\,32 \times 10^2$	$4.17 \times 10^{-8}$	$-1.617\,379\,28 \times 10^2$	$2.45 \times 10^{-8}$	$2.42 \times 10^{-8}$	32861.71	$4.38 \times 10^{-5}$	2.01	$4.78 \times 10^{-5}$
O2+	7230	2569260	mosek	$-1.487\,961\,46 \times 10^2$	$5.54 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	7331.47	$1.83 \times 10^{-4}$	$9.67 \times 10^{-1}$	1.01
O2+	7230	2569260	sdpt3	$-1.487\,955\,42 \times 10^2$	$-\infty$	$-1.487\,955\,01 \times 10^2$	$2.76 \times 10^{-7}$	NaN	33049.01	$3.86 \times 10^{-5}$	$9.96 \times 10^{-1}$	$4.71 \times 10^{-5}$
O2	7230	2569260	mosek	$-1.491\,640\,43 \times 10^2$	$-8.22 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	6799.63	$1.92 \times 10^{-4}$	1.00	2.05
O2	7230	2569260	sdpt3	$-1.491\,639\,21 \times 10^2$	$5.00 \times 10^{-7}$	$-1.491\,639\,18 \times 10^2$	$2.07 \times 10^{-8}$	$1.74 \times 10^{-8}$	37736.16	$3.76 \times 10^{-5}$	2.00	$4.25 \times 10^{-5}$
OH+	948	116692	mosek	$-7.477\,187\,91 \times 10^1$	$-7.71 \times 10^{-6}$	$+\infty$	NaN	NaN	21.20	$6.15 \times 10^{-3}$	2.03	1.70
OH+	948	116692	sdpt3	$-7.477\,187\,14 \times 10^1$	$8.62 \times 10^{-10}$	$-7.477\,187\,01 \times 10^1$	$1.73 \times 10^{-8}$	$1.73 \times 10^{-8}$	109.23	$1.31 \times 10^{-3}$	$1.47 \times 10^{-3}$	$1.23 \times 10^{-3}$
OH-	948	116692	mosek	$-7.480\,372\,30 \times 10^1$	$-1.63 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	18.03	$7.23 \times 10^{-3}$	2.06	2.40
OH-	948	116692	sdpt3	$-7.480\,371\,08 \times 10^1$	$1.88 \times 10^{-8}$	$-7.480\,370\,96 \times 10^1$	$1.65 \times 10^{-8}$	$1.63 \times 10^{-8}$	93.18	$1.41 \times 10^{-3}$	$1.65 \times 10^{-3}$	1.00
OH	948	116692	mosek	$-7.510\,138\,92 \times 10^1$	$-3.91 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	21.43	$6.20 \times 10^{-3}$	$9.73 \times 10^{-1}$	1.88
OH	948	116692	sdpt3	$-7.510\,137\,87 \times 10^1$	$4.31 \times 10^{-9}$	$-7.510\,137\,76 \times 10^1$	$1.54 \times 10^{-8}$	$1.54 \times 10^{-8}$	114.25	$1.12 \times 10^{-3}$	$1.40 \times 10^{-3}$	$1.19 \times 10^{-3}$
SiH-	7230	2569260	mosek	$-2.881\,319\,32 \times 10^2$	$-8.72 \times 10^{-5}$	$+\infty$	NaN	NaN	5967.29	$2.21 \times 10^{-4}$	$9.97 \times 10^{-1}$	1.30
SiH-	7230	2569260	sdpt3	$-2.881\,319\,00 \times 10^2$	$3.82 \times 10^{-8}$	$-2.881\,318\,96 \times 10^2$	$1.40 \times 10^{-8}$	$1.39 \times 10^{-8}$	35173.46	$3.68 \times 10^{-5}$	$6.11 \times 10^{-5}$	$4.20 \times 10^{-5}$
SiH	7230	2569260	mosek	$-2.883\,777\,39 \times 10^2$	$-1.31 \times 10^{-4}$	$+\infty$	NaN	NaN	6540.85	$1.99 \times 10^{-4}$	2.00	3.19
SiH	7230	2569260	sdpt3	$-2.883\,776\,30 \times 10^2$	$2.94 \times 10^{-5}$	$-2.883\,775\,59 \times 10^2$	$2.44 \times 10^{-7}$	$1.42 \times 10^{-7}$	33221.45	$4.19 \times 10^{-5}$	$9.74 \times 10^{-1}$	$4.64 \times 10^{-5}$

# Literatur

- [1] R. Ahlrichs, P. Scharf und C. Ehrhardt. „The coupled pair functional (CPF). A size consistent modification of the CI(SD) based on an energy functional“. In: *The Journal of Chemical Physics* 82.2 (1985), S. 890–898. DOI: [10.1063/1.448517](https://doi.org/10.1063/1.448517).
- [2] M. F. Anjos. „Conic Linear Optimization“. In: *Advances and Trends in Optimization with Engineering Applications*. Hrsg. von T. Terlaky, M. F. Anjos und S. Ahmed. SIAM, 2017. Kap. 9, S. 107–120. ISBN: 978-1-61197-467-6. DOI: [10.1137/1.9781611974683.ch9](https://doi.org/10.1137/1.9781611974683.ch9).
- [3] M. F. Anjos und J. B. Lasserre. *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*. Bd. 166. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2012. ISBN: 978-1-4614-0768-3. DOI: [10.1007/978-1-4614-0769-0](https://doi.org/10.1007/978-1-4614-0769-0).
- [4] MOSEK ApS. *The MOSEK optimization toolbox for MATLAB manual. Version 8.1*. 2018. URL: <https://docs.mosek.com/8.1/toolbox/index.html>.
- [5] A. Ben-Tal und A. Nemirovski. *Lectures on Modern Convex Optimization*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2001. ISBN: 978-0-89871-491-3. DOI: [10.1137/1.9780898718829](https://doi.org/10.1137/1.9780898718829).
- [6] A. Ben-Tal u. a. „Free Material Design via Semidefinite Programming: The Multiload Case with Contact Conditions“. In: *SIAM Review* 42.4 (2000), S. 695–715. DOI: [10.1137/S0036144500372081](https://doi.org/10.1137/S0036144500372081).
- [7] B. Borchers. *CSDP 6.2.0 User's Guide*. 2017. URL: <https://projects.coin-or.org/Csdp/attachment/wiki/WikiStart/csdpuser.pdf>.
- [8] B. Borchers. „SDPLIB 1.2, a library of semidefinite programming test problems“. In: *Optimization Methods and Software* 11.1-4 (1999), S. 683–690. DOI: [10.1080/10556789908805769](https://doi.org/10.1080/10556789908805769).
- [9] S. Boyd und L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004. ISBN: 978-0521833783. URL: <https://web.stanford.edu/~boyd/cvxbook>.
- [10] B. J. Braams, J. K. Percus und Z. Zhao. „The T1 and T2 Representability Conditions“. In: D. A. Mazziotti. *Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules*. Bd. 134. Advances in Chemical Physics. John Wiley & Sons, Inc., 2007, S. 93–102. ISBN: 978-0470106600. DOI: [10.1002/9780470106600.ch5](https://doi.org/10.1002/9780470106600.ch5).
- [11] Z.-H. Cao, J.-J. Xie und R.-C. Li. „A sharp version of Kahan's theorem on clustered eigenvalues“. In: *Linear Algebra and its Applications* 245 (1996), S. 147–155. DOI: [10.1016/0024-3795\(94\)00226-6](https://doi.org/10.1016/0024-3795(94)00226-6).

- [12] D. Chaykin. „Verification of semidefinite optimization problems with application to variational electronic structure calculation“. Diss. Technische Universität Hamburg, 2009. DOI: [10.15480/882.849](https://doi.org/10.15480/882.849).
- [13] D. Chaykin u. a. *Rigorous results in electronic structure calculations*. Optimization Online. 2016. URL: [http://www.optimization-online.org/DB\\_HTML/2016/11/5730.html](http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2016/11/5730.html).
- [14] L. Cohen und C. Frishberg. „Hierarchy equations for reduced density matrices“. In: *Physical Review A* 13 (3 1976), S. 927–930. DOI: [10.1103/PhysRevA.13.927](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.13.927).
- [15] A. J. Coleman. „N-Representability“. In: D. A. Mazziotti. *Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules*. Bd. 134. Advances in Chemical Physics. John Wiley & Sons, Inc., 2007, S. 1–9. ISBN: 978-0470106600. DOI: [10.1002/9780470106600.ch1](https://doi.org/10.1002/9780470106600.ch1).
- [16] A. J. Coleman. „Structure of Fermion Density Matrices“. In: *Reviews of Modern Physics* 35 (3 1963), S. 668–686. DOI: [10.1103/RevModPhys.35.668](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.35.668).
- [17] A. J. Coleman und V. I. Yukalov. *Reduced Density Matrices. Coulson’s Challenge*. Bd. 72. Lecture Notes in Chemistry. Springer, 2000. ISBN: 978-3-540-67148-0. URL: <http://www.springer.com/in/book/9783540671480>.
- [18] F. Colmenero, C. Pérez del Valle und C. Valdemoro. „Approximating q-order reduced density matrices in terms of the lower-order ones. I. General relations“. In: *Physical Review A* 47 (2 1993), S. 971–978. DOI: [10.1103/PhysRevA.47.971](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.47.971).
- [19] F. Colmenero und C. Valdemoro. „Approximating q-order reduced density matrices in terms of the lower-order ones. II. Applications“. In: *Physical Review A* 47 (2 1993), S. 979–985. DOI: [10.1103/PhysRevA.47.979](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.47.979).
- [20] E. R. Davidson, Hrsg. *Reduced Density Matrices in Quantum Chemistry*. Bd. 6. Theoretical Chemistry. Elsevier, 1976. ISBN: 978-0-12-205850-9. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/bookseries/00823961>.
- [21] C. Davis, W. M. Kahan und H. F. Weinberger. „Norm-Preserving Dilations and Their Applications to Optimal Error Bounds“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 19.3 (1982), S. 445–469. DOI: [10.1137/0719029](https://doi.org/10.1137/0719029).
- [22] M. M. Deza und M. Laurent. *Geometry of Cuts and Metrics*. Springer, 1997. ISBN: 978-3-642-04295-9. DOI: [10.1007/978-3-642-04295-9](https://doi.org/10.1007/978-3-642-04295-9).
- [23] John W. Eaton u. a. *GNU Octave version 4.4.1 manual: a high-level interactive language for numerical computations*. 2018. URL: <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v4.4.1/>.
- [24] R. M. Erdahl. „On the structure of the diagonal conditions“. In: *International Journal of Quantum Chemistry* 13.6 (1978), S. 731–736. DOI: [10.1002/qua.560130605](https://doi.org/10.1002/qua.560130605).
- [25] C. A. Floudas. *Deterministic Global Optimization*. Bd. 37. Nonconvex Optimization and Its Applications. Springer, 2000. ISBN: 978-1-4419-4820-5. DOI: [10.1007/978-1-4419-4820-5](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-4820-5).

- [26] R. M. Freund, F. Ordóñez und K.-C. Toh. „Behavioral measures and their correlation with IPM iteration counts on semi-definite programming problems“. In: *Mathematical Programming* 109.2-3 (2007), S. 445–475. DOI: [10.1007/s10107-006-0035-y](https://doi.org/10.1007/s10107-006-0035-y).
- [27] K. Fujisawa u. a. *SDPA-M (SemiDefinite Programming Algorithm in MATLAB) User's Manual — Version 6.2.0*. Research Report. Tokyo Institute of Technology, 2005. URL: <https://sourceforge.net/projects/sdpa/files/sdpa-m/sdpamManual.pdf>.
- [28] M. Fukuda u. a. „Large-scale semidefinite programs in electronic structure calculation“. In: *Mathematical Programming* 109.2-3 (2007), S. 553–580. DOI: [10.1007/s10107-006-0027-y](https://doi.org/10.1007/s10107-006-0027-y).
- [29] C. Garrod und J. K. Percus. „Reduction of the N-Particle Variational Problem“. In: *Journal of Mathematical Physics* 5.12 (1964), S. 1756–1776. DOI: [10.1063/1.1704098](https://doi.org/10.1063/1.1704098).
- [30] V. Härter, C. Jansson und M. Lange. *VSDP: A Matlab toolbox for verified semidefinite-quadratic-linear programming*. Optimization Online. 2012. URL: [http://www.optimization-online.org/DB\\_HTML/2013/01/3724.html](http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2013/01/3724.html).
- [31] O. Heimlich. *GNU Octave Interval Package*. Version 3.2.0. 2018. URL: <https://octave.sourceforge.io/interval/>.
- [32] T. Helgaker, P. Jørgensen und J. Olsen. *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons, Ltd, 2000. ISBN: 9781119019572. DOI: [10.1002/9781119019572](https://doi.org/10.1002/9781119019572).
- [33] G. Herzberger und J. Alefeld. *Introduction to Interval Computation*. Academic Press, 1983. ISBN: 978-0-12-049820-8. DOI: [10.1016/B978-0-08-091636-1.50007-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-091636-1.50007-1).
- [34] Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). *754-2008 - IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic*. 2008. DOI: [10.1109/IEEESTD.2008.4610935](https://doi.org/10.1109/IEEESTD.2008.4610935).
- [35] C. Jansson. „A Rigorous Lower Bound for the Optimal Value of Convex Optimization Problems“. In: *Journal of Global Optimization* 28.1 (2004), S. 121–137. DOI: [10.1023/B:JOG0.0000006720.68398.8c](https://doi.org/10.1023/B:JOG0.0000006720.68398.8c).
- [36] C. Jansson. „Calculation of exact bounds for the solution set of linear interval systems“. In: *Linear Algebra and its Applications* 251 (1997), S. 321–340. DOI: [10.1016/S0024-3795\(96\)00681-7](https://doi.org/10.1016/S0024-3795(96)00681-7).
- [37] C. Jansson. „Guaranteed Accuracy for Conic Programming Problems in Vector Lattices“. In: *ArXiv e-prints* (2007). arXiv: [0707.4366](https://arxiv.org/abs/0707.4366) [[math.OC](https://arxiv.org/abs/0707.4366)].
- [38] C. Jansson. „On verified numerical computations in convex programming“. In: *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* 26.2-3 (2009), S. 337–363. DOI: [10.1007/BF03186539](https://doi.org/10.1007/BF03186539).
- [39] C. Jansson. *Quantum information theory for engineers: an interpretative approach*. Technische Universität Hamburg, 2017. DOI: [10.15480/882.1441](https://doi.org/10.15480/882.1441).

- [40] C. Jansson. „Rigorous Lower and Upper Bounds in Linear Programming“. In: *SIAM Journal on Optimization* 14.3 (2004), S. 914–935. DOI: [10.1137/S1052623402416839](https://doi.org/10.1137/S1052623402416839).
- [41] C. Jansson. *VSDP: Verified SemiDefinite Programming*. Optimization Online. 2006. URL: [http://www.optimization-online.org/DB\\_HTML/2006/12/1547.html](http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2006/12/1547.html).
- [42] C. Jansson, D. Chaykin und C. Keil. „Rigorous Error Bounds for the Optimal Value in Semidefinite Programming“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 46.1 (2007), S. 180–200. DOI: [10.1137/050622870](https://doi.org/10.1137/050622870).
- [43] C. Jansson, M. Lange und K. T. Ohlhus. *VSDP: A Matlab/GNU Octave toolbox for verified semidefinite-quadratic-linear programming*. Optimization Online. 2019. in preparation.
- [44] M. Kočvara. „On the modelling and solving of the truss design problem with global stability constraints“. In: *Structural and Multidisciplinary Optimization* 23.3 (2002), S. 189–203. DOI: [10.1007/s00158-002-0177-3](https://doi.org/10.1007/s00158-002-0177-3).
- [45] C. Kollmar. „A size extensive energy functional derived from a double configuration interaction approach: The role of N representability conditions“. In: *The Journal of Chemical Physics* 125.8 (2006). DOI: [10.1063/1.2336210](https://doi.org/10.1063/1.2336210).
- [46] H. Kummer. „n-Representability Problem for Reduced Density Matrices“. In: *Journal of Mathematical Physics* 8.10 (1967), S. 2063–2081. DOI: [10.1063/1.1705122](https://doi.org/10.1063/1.1705122).
- [47] L. Landau. „Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik“. In: *Zeitschrift für Physik* 45.5-6 (1927), S. 430–441. DOI: [10.1007/BF01343064](https://doi.org/10.1007/BF01343064).
- [48] Y.-K. Liu, M. Christandl und F. Verstraete. „Quantum Computational Complexity of the N-Representability Problem: QMA Complete“. In: *Physical Review Letters* 98 (11 2007), S. 110503. DOI: [10.1103/PhysRevLett.98.110503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.110503).
- [49] P.-O. Löwdin. „Quantum Theory of Many-Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction“. In: *Physical Review* 97 (6 1955), S. 1474–1489. DOI: [10.1103/PhysRev.97.1474](https://doi.org/10.1103/PhysRev.97.1474).
- [50] J. Malick u. a. „Regularization Methods for Semidefinite Programming“. In: *SIAM Journal on Optimization* 20.1 (2009), S. 336–356. DOI: [10.1137/070704575](https://doi.org/10.1137/070704575).
- [51] G. Mayer. *Interval Analysis and Automatic Result Verification*. Bd. 65. De Gruyter Studies in Mathematics. De Gruyter, 2017. ISBN: 978-3-11-049805-9. URL: <https://www.degruyter.com/isbn/978-3-11-049946-9>.
- [52] G. Mayer. „Result Verification for Eigenvectors and Eigenvalues“. In: *Topics in validated computations*. Hrsg. von J. Herzberger. Studies in computational mathematics. Elsevier, 1994, S. 209–276. ISBN: 978-0444816856.
- [53] J. E. Mayer. „Electron Correlation“. In: *Physical Review* 100 (6 1955), S. 1579–1586. DOI: [10.1103/PhysRev.100.1579](https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.1579).

- [54] D. A. Mazziotti. „Contracted Schrödinger equation: Determining quantum energies and two-particle density matrices without wave functions“. In: *Physical Review A* 57 (6 1998), S. 4219–4234. DOI: [10.1103/PhysRevA.57.4219](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.57.4219).
- [55] D. A. Mazziotti. „First-order semidefinite programming for the direct determination of two-electron reduced density matrices with application to many-electron atoms and molecules“. In: *The Journal of Chemical Physics* 121.22 (2004), S. 10957–10966. DOI: [10.1063/1.1810134](https://doi.org/10.1063/1.1810134).
- [56] D. A. Mazziotti. „Large-Scale Semidefinite Programming for Many-Electron Quantum Mechanics“. In: *Physical Review Letters* 106 (8 2011), S. 083001. DOI: [10.1103/PhysRevLett.106.083001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.083001).
- [57] D. A. Mazziotti. „Pure- $N$ -representability conditions of two-fermion reduced density matrices“. In: *Physical Review A* 94 (3 2016), S. 032516. DOI: [10.1103/PhysRevA.94.032516](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.032516).
- [58] D. A. Mazziotti. „Purification of correlated reduced density matrices“. In: *Physical Review E* 65 (2 2002), S. 026704. DOI: [10.1103/PhysRevE.65.026704](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.026704).
- [59] D. A. Mazziotti. „Realization of Quantum Chemistry without Wave Functions through First-Order Semidefinite Programming“. In: *Physical Review Letters* 93 (21 2004), S. 213001. DOI: [10.1103/PhysRevLett.93.213001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.213001).
- [60] D. A. Mazziotti. *Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules*. Bd. 134. Advances in Chemical Physics. John Wiley & Sons, Inc., 2007. ISBN: 978-0470106600. DOI: [10.1002/0470106603](https://doi.org/10.1002/0470106603).
- [61] D. A. Mazziotti. „Structure of Fermionic Density Matrices: Complete  $N$ -Representability Conditions“. In: *Physical Review Letters* 108 (26 2012), S. 263002. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.263002](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.263002).
- [62] D. A. Mazziotti. „Two-Electron Reduced Density Matrix as the Basic Variable in Many-Electron Quantum Chemistry and Physics“. In: *Chemical Reviews* 112.1 (2012), S. 244–262. DOI: [10.1021/cr2000493](https://doi.org/10.1021/cr2000493).
- [63] D. A. Mazziotti. „Variational reduced-density-matrix method using three-particle  $N$ -representability conditions with application to many-electron molecules“. In: *Physical Review A* 74 (3 2006), S. 032501. DOI: [10.1103/PhysRevA.74.032501](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.032501).
- [64] David A. Mazziotti. „Enhanced Constraints for Accurate Lower Bounds on Many-Electron Quantum Energies from Variational Two-Electron Reduced Density Matrix Theory“. In: *Physical Review Letters* 117 (15 2016), S. 153001. DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.153001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.153001).
- [65] R. McWeeny. „Some Recent Advances in Density Matrix Theory“. In: *Reviews of Modern Physics* 32 (2 1960), S. 335–369. DOI: [10.1103/RevModPhys.32.335](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.32.335).
- [66] H. D. Mittelmann. *Decision Tree for Optimization Software*. 2018. URL: <http://plato.asu.edu/guide.html>.

- [67] H. D. Mittelmann. „The State-of-the-Art in Conic Optimization Software“. In: M. F. Anjos und J. B. Lasserre. *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*. Bd. 166. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2012, S. 671–686. ISBN: 978-1-4614-0768-3. DOI: [10.1007/978-1-4614-0769-0\\_23](https://doi.org/10.1007/978-1-4614-0769-0_23).
- [68] S. Miyajima, T. Ogita und S. Oishi. „Fast Verification for Respective Eigenvalues of Symmetric Matrix“. In: *Computer Algebra in Scientific Computing*. Hrsg. von V. G. Ganzha, E. W. Mayr und E. V. Vorozhtsov. Springer, 2005, S. 306–317. ISBN: 978-3-540-32070-8.
- [69] R. E. Moore. *Methods and Applications of Interval Analysis*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1979. DOI: [10.1137/1.9781611970906](https://doi.org/10.1137/1.9781611970906).
- [70] R. E. Moore, R. B. Kearfott und M. J. Cloud. *Introduction to Interval Analysis*. SIAM, 2009. ISBN: 978-0-89871-669-6. DOI: [10.1137/1.9780898717716](https://doi.org/10.1137/1.9780898717716).
- [71] J.-M. Muller u. a. *Handbook of Floating-Point Arithmetic*. 2. Aufl. Birkhäuser, 2018. ISBN: 978-3-319-76525-9. DOI: [10.1007/978-3-319-76526-6](https://doi.org/10.1007/978-3-319-76526-6).
- [72] M. Nakata und J. S. M. Anderson. „On the size-consistency of the reduced-density-matrix method and the unitary invariant diagonal N-representability conditions“. In: *AIP Advances* 2.3 (2012). DOI: [10.1063/1.4740246](https://doi.org/10.1063/1.4740246).
- [73] M. Nakata u. a. „Variational calculation of second-order reduced density matrices by strong N-representability conditions and an accurate semidefinite programming solver“. In: *The Journal of Chemical Physics* 128.16 (2008). DOI: [10.1063/1.2911696](https://doi.org/10.1063/1.2911696).
- [74] M. Nakata u. a. „Variational calculations of fermion second-order reduced density matrices by semidefinite programming algorithm“. In: *The Journal of Chemical Physics* 114.19 (2001), S. 8282–8292. DOI: [10.1063/1.1360199](https://doi.org/10.1063/1.1360199).
- [75] H. Nakatsuji. „Equation for the direct determination of the density matrix“. In: *Physical Review A* 14 (1 1976), S. 41–50. DOI: [10.1103/PhysRevA.14.41](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.14.41).
- [76] H. Nakatsuji und K. Yasuda. „Direct Determination of the Quantum-Mechanical Density Matrix Using the Density Equation“. In: *Physical Review Letters* 76 (7 1996), S. 1039–1042. DOI: [10.1103/PhysRevLett.76.1039](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1039).
- [77] A. Neumaier. „Complete Search in Continuous Global Optimization and Constraint Satisfaction“. In: *Acta Numerica*. Bd. 13. Cambridge University Press, 2004, S. 271–369. ISBN: 978-0521838115. DOI: [10.1017/S0962492904000194](https://doi.org/10.1017/S0962492904000194).
- [78] A. Neumaier. *Interval methods for systems of equations*. Encyclopedia of mathematics and its applications. Cambridge University Press, 1990. ISBN: 978-0521331968.
- [79] A. Neumaier. *Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 2001. ISBN: 9780521336109. DOI: [10.1017/CB09780511612916](https://doi.org/10.1017/CB09780511612916).
- [80] J. von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, 1932. URL: <http://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?PPN379400774>.

- [81] B. Parlett. *The Symmetric Eigenvalue Problem*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998. DOI: [10.1137/1.9781611971163](https://doi.org/10.1137/1.9781611971163).
- [82] G. Pataki und S. H. Schmieta. *The DIMACS library of mixed semidefinite-quadratic-linear programs*. Techn. Ber. Columbia University, 2002. URL: <http://dimacs.rutgers.edu/archive/Challenges/Seventh/Instances/>.
- [83] S. M. Rump. „Gleitkommaarithmetik auf dem Prüfstand“. In: *Jahresbericht der Deutschen Mathematiker-Vereinigung* (2016), S. 1–48. DOI: [10.1365/s13291-016-0138-1](https://doi.org/10.1365/s13291-016-0138-1).
- [84] S. M. Rump. „INTLAB - INTerval LABoratory“. In: *Developments in Reliable Computing*. Hrsg. von T. Csendes. Springer, 1999, S. 77–104. ISBN: 978-90-481-5350-3. DOI: [10.1007/978-94-017-1247-7\\_7](https://doi.org/10.1007/978-94-017-1247-7_7).
- [85] S. M. Rump. „Validated Solution of Large Linear Systems“. In: *Validation Numerics*. Hrsg. von R. Albrecht, G. Alefeld und H.J. Stetter. Bd. 9. Computing Supplementum. Springer, 1993, S. 191–212. ISBN: 978-3-211-82451-1. DOI: [10.1007/978-3-7091-6918-6\\_15](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-6918-6_15).
- [86] S. M. Rump. „Verification Methods for Dense and Sparse Systems of Equations“. In: *Topics in validated computations*. Hrsg. von J. Herzberger. Studies in computational mathematics. Elsevier, 1994, S. 63–136. ISBN: 978-0444816856.
- [87] S. M. Rump. „Verification methods: Rigorous results using floating-point arithmetic“. In: *Acta Numerica* 19 (2010), S. 287–449. DOI: [10.1017/S096249291000005X](https://doi.org/10.1017/S096249291000005X).
- [88] J. F. Sturm. „Using SeDuMi 1.02, A Matlab toolbox for optimization over symmetric cones“. In: *Optimization Methods and Software* 11.1-4 (1999), S. 625–653. DOI: [10.1080/10556789908805766](https://doi.org/10.1080/10556789908805766).
- [89] A. Szabo und N. S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Books on Chemistry Series. Dover Publications, 1996. ISBN: 978-0486691862.
- [90] T. Terlaky, M. F. Anjos und S. Ahmed, Hrsg. *Advances and Trends in Optimization with Engineering Applications*. SIAM, 2017. ISBN: 978-1-61197-467-6. DOI: [10.1137/1.9781611974683](https://doi.org/10.1137/1.9781611974683).
- [91] K. C. Toh, M. J. Todd und R. H. Tütüncü. „SDPT3 - A Matlab software package for semidefinite programming, Version 1.3“. In: *Optimization Methods and Software* 11.1-4 (1999), S. 545–581. DOI: [10.1080/10556789908805762](https://doi.org/10.1080/10556789908805762).
- [92] K.-C. Toh, M. J. Todd und R. H. Tütüncü. „On the Implementation and Usage of SDPT3 – A Matlab Software Package for Semidefinite-Quadratic-Linear Programming, Version 4.0“. In: M. F. Anjos und J. B. Lasserre. *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*. Bd. 166. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2012, S. 715–754. ISBN: 978-1-4614-0768-3. DOI: [10.1007/978-1-4614-0769-0\\_25](https://doi.org/10.1007/978-1-4614-0769-0_25).
- [93] R. H. Tredgold. „Density Matrix and the Many-Body Problem“. In: *Physical Review* 105 (5 1957), S. 1421–1423. DOI: [10.1103/PhysRev.105.1421](https://doi.org/10.1103/PhysRev.105.1421).

- [94] W. Tucker. *Validated Numerics: A Short Introduction to Rigorous Computations*. Princeton University Press, 2011. ISBN: 978-0-691-14781-9.
- [95] R. H. Tütüncü, K. C. Toh und M. J. Todd. „Solving semidefinite-quadratic-linear programs using SDPT3“. In: *Mathematical Programming* 95.2 (2003), S. 189–217. DOI: [10.1007/s10107-002-0347-5](https://doi.org/10.1007/s10107-002-0347-5).
- [96] C. Valdemoro. „Theory and Methodology of The Contracted Schrödinger Equation“. In: *Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules*. Hrsg. von D. A. Mazziotti. Bd. 134. Advances in Chemical Physics. John Wiley & Sons, Inc., 2007, S. 119–164. ISBN: 978-0470106600. DOI: [10.1002/9780470106600.ch7](https://doi.org/10.1002/9780470106600.ch7).
- [97] C. Valdemoro. „Theory and Practice of the Spin-Adapted Reduced Hamiltonians (SRH)“. In: *Density Matrices and Density Functionals, Proceedings of the A. John Coleman Symposium*. Hrsg. von Robert Erdahl und Jr. Smith VadeneH. Springer, 1987, S. 275–288. ISBN: 978-94-010-8214-3. DOI: [10.1007/978-94-009-3855-7\\_14](https://doi.org/10.1007/978-94-009-3855-7_14).
- [98] L. Vandenberghe und S. Boyd. „Semidefinite Programming“. In: *SIAM Review* 38.1 (1996), S. 49–95. DOI: [10.1137/1038003](https://doi.org/10.1137/1038003).
- [99] S. Veeraraghavan und D. A. Mazziotti. „Global solutions of Hartree-Fock theory and their consequences for strongly correlated quantum systems“. In: *Physical Review A* 89 (1 2014), S. 010502. DOI: [10.1103/PhysRevA.89.010502](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.010502).
- [100] S. Veeraraghavan und D. A. Mazziotti. „Global solutions of restricted open-shell Hartree-Fock theory from semidefinite programming with applications to strongly correlated quantum systems“. In: *The Journal of Chemical Physics* 140.12 (2014). DOI: [10.1063/1.4868242](https://doi.org/10.1063/1.4868242).
- [101] S. Veeraraghavan und D. A. Mazziotti. „Semidefinite programming formulation of linear-scaling electronic structure theories“. In: *Physical Review A* 92 (2 2015), S. 022512. DOI: [10.1103/PhysRevA.92.022512](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.022512).
- [102] D. Werner. *Funktionalanalysis*. 7. Aufl. Springer, 2011. ISBN: 978-3-642-21016-7.
- [103] H. Wolkowicz, R. Saigal und L. Vandenberghe. *Handbook of Semidefinite Programming*. Springer, 2000. ISBN: 978-1-4613-6970-7. DOI: [10.1007/978-1-4615-4381-7](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4381-7).
- [104] M. Yamashita, K. Fujisawa und M. Kojima. „SDPARA: SemiDefinite Programming Algorithm paRAllel version“. In: *Parallel Computing* 29.8 (2003), S. 1053–1067. DOI: [10.1016/S0167-8191\(03\)00087-5](https://doi.org/10.1016/S0167-8191(03)00087-5).
- [105] M. Yamashita u. a. „Algorithm 925: Parallel Solver for Semidefinite Programming Problem Having Sparse Schur Complement Matrix“. In: *ACM Transactions on Mathematical Software* 39.1 (2012), S. 1–22. DOI: [10.1145/2382585.2382591](https://doi.org/10.1145/2382585.2382591).

- [106] M. Yamashita u. a. „Latest Developments in the SDPA Family for Solving Large-Scale SDPs“. In: M. F. Anjos und J. B. Lasserre. *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*. Bd. 166. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2012, S. 687–713. ISBN: 978-1-4614-0768-3. DOI: [10.1007/978-1-4614-0769-0\\_24](https://doi.org/10.1007/978-1-4614-0769-0_24).
- [107] K. Yasuda und H. Nakatsuji. „Direct determination of the quantum-mechanical density matrix using the density equation. II.“ In: *Physical Review A* 56 (4 1997), S. 2648–2657. DOI: [10.1103/PhysRevA.56.2648](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.2648).
- [108] E. Zeidler. *Springer-Handbuch der Mathematik III. Begründet von I. N. Bronstein und K. A. Semendjaew Weitergeführt von G. Grosche, V. Ziegler und D. Ziegler*. Hrsg. von E. Zeidler. Springer, 2013. ISBN: 978-3-658-00275-6. DOI: [10.1007/978-3-658-00275-6](https://doi.org/10.1007/978-3-658-00275-6).
- [109] Z. Zhao. „The Reduced Density Matrix Method for Electronic Structure Calculations - Application of Semidefinite Programming to N-fermion Systems“. Diss. New York University, 2004. URL: <http://cs.nyu.edu/overton/phdtheses/zhengji.pdf>.
- [110] Z. Zhao u. a. „The reduced density matrix method for electronic structure calculations and the role of three-index representability conditions“. In: *The Journal of Chemical Physics* 120.5 (2004), S. 2095–2104. DOI: [10.1063/1.1636721](https://doi.org/10.1063/1.1636721).
- [111] J. Zowe, M. Kočvara und M. P. Bendsøe. „Free material optimization via mathematical programming“. In: *Mathematical Programming* 79.1 (1997), S. 445–466. DOI: [10.1007/BF02614328](https://doi.org/10.1007/BF02614328).
- [112] L. Zülicke. *Molekulare Theoretische Chemie. Eine Einführung*. Studienbücher Chemie. Springer, 2015. ISBN: 978-3-658-00488-0. DOI: [10.1007/978-3-658-00489-7](https://doi.org/10.1007/978-3-658-00489-7).

# Index

## A

Antikommutator, 43

## B

Born-Oppenheimer-Approximation, 37

Bornsche Regel, 38

Bosonen, 39

Boundedness Qualification

Dual (DBQ), 17

Primal (PBQ), 17

## D

Dirac-Notation, 38

Dualität

schwache, 13

starke, 14

## E

Einschließungseigenschaft, 9

## F

Fermionen, 39

## G

Grundzustandsenergie, 38

## H

Hadamard-Produkt, 4

Hamiltonoperator, 37

Hilbertraum, 6

## I

IEEE-754, 21

Indexmenge, 3, 54

Intervallarithmetik, 8

## K

Kegel, 6

dualer, 7

konvexer, 6

nicht-negativer, 6

Kompaktifizierte Matrix, 54

Konisches Optimierungsproblem

duales (DCP), 13

primales (CP), 12

Kronecker-Delta, 5

## L

Lineares Programm (LP), 23

## N

N-Darstellbarkeit, 44, 49

## O

Orbital-

Erzeugungsoperator, 43

Vernichtungsoperator, 43

## P

Pauli-Prinzip, 39

## R

Reduzierte Dichtematrix

1-RDM, 40, 44

2-RDM, 41, 44

p-RDM, 40

## S

Schlupfvariable, 14

Semidefinites Programm (SDP), 25

Slater-Bedingung, 14

Slater-Determinante, 42

Standardskalarprodukt, 4

Subdistributivität, 9

## W

Wellenfunktion, 38

## Z

Zweite Quantisierung, 43

# Lebenslauf

## Persönliche Daten

Name	Kai Torben Ohlhus
Staatsangehörigkeit	deutsch
Geburtsdatum	22. August 1988
Geburtsort, -land	Elmshorn, Deutschland

## Schulischer Werdegang, Wehrdienst, Studium und Beruf

08/1994 - 07/1998	Grundschule Kaltenweide in Elmshorn
08/1998 - 07/2004	Realschule am Propstenfeld in Elmshorn
08/2004 - 07/2007	Berufliches Gymnasium Meinert-Johannsen-Schule in Elmshorn Abschluss: Abitur
10/2007 - 06/2008	Grundwehrdienst in Kellinghusen
10/2008 - 12/2011	Studium „Informatik-Ingenieurwesen“ an der Technischen Universität Hamburg Abschluss: Bachelor
12/2011 - 12/2013	Studium „Informatik-Ingenieurwesen“ an der Technischen Universität Hamburg Abschluss: Master
01/2014 - heute	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Zuverlässiges Rechnen an der Technischen Universität Hamburg