Anmerkungen zur line search:

- Gegeben x^k, s^k setze $\phi(t) := f(x^k + t s^k)$
- Gesucht ist eine lokale Minimalstelle $\bar{t}$ von

  ϕ mit $\phi(\bar{t}) \leq \phi(0)$.

  (Manche schlecht implementierten line-search-Algorithmen wie z.B. fminbnd in Matlab liefern auch Werte $\bar{t}$ mit $\phi(\bar{t}) > \phi(0)$.)

- Das Verfahren des goldenen Schnitts (Einf. Opt.) konvergiert mit einer Rate von $\frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.61803\ldots$
- Zur lokalen Konvergenzbeschleunigung bietet sich quadratische Interpolation durch die letzten 3 Iterierte an, die Auswertung von deren Minimalstelle und verschiedene "safe guards".

  Recht technisch, kaum Veröffentlichungen, da zu trivial.

- Nutzung von kubischen Splines anstelle der quadrat. Interpolierenden (5 Stützpunkte)

1)) Zu $t_0, t_1, \ldots, t_n$ und $\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_n$ berechne die kubische Spline-Fkt s mit

$s(t_j) = \phi_j \qquad (0 \leq j \leq n)$ und

$s'(t_0) = 0$

$s''(t_0) = 0.$

s kann ganz einfach berechnet werden:

Auf $[t_0, t_1]$ gilt $s(t) = \Phi_0 + s'(t_0)(t-t_0) + s''(t_0)\frac{(t-t_0)^2}{2} + \alpha(t-t_0)^3$,

wobei $s(t_0), s'(t_0), s''(t_0)$ gegeben sind und α so zu bestimmen ist, dass $s(t_1) = \Phi_1$ erfüllt ist, also

$$\alpha = \frac{\Phi(t_1) - s(t_0) - s'(t_0)(t_1-t_0) - s''(t)(t_1-t_0)^2/2}{(t_1-t_0)^3}.$$

Damit ist s auf $[t_0, t_1]$ vollständig bestimmt.

$\Rightarrow$ $s(t_1) = \Phi_1$ und $s'(t_1)$ sowie $s''(t_1)$ sind bekannt,

$$s'(t_1) = s'(t_0) + (t_1-t_0)s''(t_0) + 3\alpha(t_1-t_0)^2,$$
$$s''(t_1) = s''(t_0) + 6\alpha(t_1-t_0).$$

Analog kann jetzt s auf $[t_1, t_2], [t_2, t_3] \dots$ berechnet werden.

Die Ableitungen $s'(t_0) = 0 = s''(t_0)$ waren dabei willkürlich gewählt.

Bestimme auf dieselbe Weise zwei Spline-Funktionen $\hat{s}$ und $\bar{s}$ mit $\hat{s}(t_j) = \bar{s}(t_j) = 0$ für $0 \le j \le n$

und $\hat{s}'(0) = 1$ sowie $\bar{s}'(0) = 0$

$\hat{s}''(0) = 0$ $\qquad$ $\bar{s}''(0) = 1$.

Jede interpolierende Spline-Funktion hat die Form $t \longmapsto s(t) + \alpha\hat{s}(t) + \beta\bar{s}(t)$ mit festem $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2$.

Möchte man nun z.B. α, β so wählen, dass

$s'''(t_1)$ und $s'''(t_{n-1})$ existieren ("not-a-knot-spline")

so ergibt sich mit der Notation $s_-'''(t_j) := \lim\limits_{t \nearrow t_j} s'''(t)$

und $s_+'''(t_j) := \lim\limits_{t \searrow t_j} s'''(t)$ die Forderung:

$$\underbrace{s_-'''(t_1)} + \alpha \hat{s}_-'''(t_1) + \beta \bar{s}_-'''(t_1) = s_+'''(t_1) + \alpha \hat{s}_+'''(t_1) + \beta \bar{s}_+'''(t_1)$$

s: kub. Polynom
auf $[t_0, t_1]$

und analog bei $t = t_{n-1}$.

Die Koeffizienten sind explizit gegeben, es ergibt sich ein lineares Gleichungssystem mit 2 Variablen & 2 Unbekannten.

(!) Das System kann schlecht konditioniert sein, ggf. muss s mit den gegebenen Anfangswerten α, β neu berechnet werden.

. Analog kann man auch den natürlichen Spline berechnen

. " " " " einen "least-squares-spline"

berechnen, der α, β so bestimmt, dass eine gewichtete Quadratsumme der Sprünge der 3. Ableitung an den Stellen $t_1, t_2, \dots, t_{n-1}$ minimiert wird.

(zB. Gewichte $w_i = \dfrac{1}{t_{i+1} - t_{i-1}}$). (warum?)

§3 Verfahren auf diskreten Gittern

Problem (1') $\quad \min f(x) \quad | \quad l \leq x \leq u.$

Diesmal $l \leq u$, $l, u \in \mathbb{R}^n$.

Wähle $\nu_i \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ für $1 \leq i \leq n$ und setze $h_i := \frac{u_i - l_i}{\nu_i}$

$$G := \{x \mid \frac{x_i - l_i}{h_i} \in \{0, 1, \dots, \nu_i\} \text{ für } 1 \leq i \leq n\}$$

$$= \{ l + \sum_{i=1}^{n} j_i h_i e_i \mid j_i \in \{0, 1, \dots, \nu_i\} \text{ für } 1 \leq i \leq n\}$$

wobei e_i der i-te kanonische Einheitsvektor sei. "Gitter G".

Zu $x \in G$ sei $N(x) := \{x\} \cup \{x \pm h_i e_i\}_{1 \leq i \leq n} \cap [l, u]$ die Nachbarschaft von x in G bei der je maximal eine Komponente von x geändert wird.

<u>Ansatz</u>: $x^1 \in G$ gegeben.

Für $k = 1, 2, \dots$

$\bar{x} := x^k$

Für $i = 1, 2, \dots, n$

Ersetze $\bar{x}$ durch $\bar{x} + z h_i e_i \in G$ (mit $z \in \mathbb{Z}$).

Falls $z \neq 0$ so gelte dabei $f(\bar{x} + z h_i e_i) < f(\bar{x})$ (*)

und in jedem Fall gelte $f(\bar{x} + z h_i e_i) \leq f(\bar{x}^{\pm})$

für $\bar{x}^{\pm} \in \{\bar{x} + h_i e_i, \bar{x} - h_i e_i\} \cap G$.

End

Falls $\bar{x} = x^k$ stop sonst $x^{k+1} := \bar{x}$.

End.