Задание №12
Метод сопряженных градиентов

Постановка задачи

Дана функция $f(\vec{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, которую необходимо минимизировать, т.е. найти такой $\vec{x}_{\text{M}}$, что

$$\min_{\vec{x}\in\mathbb{R}^n} f(\vec{x}) = f(\vec{x}_{\text{M}}).$$

Алгоритм

Дано: целевая функция $f(\vec{x})$, начальная точка $\vec{x}_0$, точность ε. Градиент функции обозначим как $\vec{g}(\vec{x}) = \vec{\nabla} f(\vec{x})$.

1. Инициализация:

$$\begin{aligned} \vec{x}_0 &\text{ — начальное приближение} \\ \vec{g}_0 &= \vec{\nabla} f(\vec{x}_0) \\ \vec{p}_0 &= -\vec{g}_0 \\ k &= 0 \end{aligned}$$

2. Итерационный процесс (пока $||\vec{g}_k|| > \varepsilon$):

   (a) Линейный поиск: Найти $\alpha_k > 0$, решающую задачу:

   $$\min_{\alpha>0} f(\vec{x}_k + \alpha\vec{p}_k)$$

   (b) Обновление точки:

   $$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \alpha_k\vec{p}_k$$

   (c) Вычисление градиента:

   $$\vec{g}_{k+1} = \vec{\nabla} f(\vec{x}_{k+1})$$

   (d) Проверка сходимости: Если $||\vec{g}_{k+1}|| < \varepsilon$, остановка.

   (e) Иначе вычисляем коэффициент β_k (можно воспользоваться одним из двух вариантов):

   - Формула Флетчера-Ривса:

   $$\beta_k^{\text{FR}} = \frac{\vec{g}_{k+1} \cdot \vec{g}_{k+1}}{\vec{g}_k \cdot \vec{g}_k}$$

- Формула Полака-Рибьера:

$$\beta_k^{\mathrm{PR}} = \frac{\vec{g}_{k+1} \cdot (\vec{g}_{k+1} - \vec{g}_k)}{\vec{g}_k \cdot \vec{g}_k}$$

(f) Обновление направления:

$$\vec{p}_{k+1} = -\vec{g}_{k+1} + \beta_k \vec{p}_k$$

(g) Переходим на следующую итерацию: $k = k + 1$.

В практически значимых случаях рекомендуется использовать периодический «перезапуск» алгоритма. Возможные варианты

- Каждые m итераций.
- При нарушении условия убывания: $\vec{g}_{k+1} \cdot \vec{g}_k > \gamma ||\vec{g}_{k+1}||^2$, где коэффициент $\gamma \approx 0.2$.

При перезапуске: $\vec{p}_{k+1} = -\vec{g}_{k+1}$ (сбрасываем «память»).

Задание

Требуется программно реализовать описанный выше алгоритм. Функция может быть задана аналитически, но ее градиент при необходимости требуется вычислять численно. Выбор способа вычисления β_k и условия перезапуска — на ваше усмотрение (рекомендуется попробовать разные варианты и выбрать более эффективный).

Технические условия

Реализация должна представлять собой функцию, принимающую в качестве параметров название минимизируемой функции (или указатель на нее), вектор начального приближения и требуемую точность, возвращающую вектор с координатами найденной точки минимума. Можно ввести дополнительные параметры (например, предельное количество итераций и параметр, задающий периодичность «перезапуска»). Естественно, нужно также написать тестирующую программу, вызывающую функцию, реализующую алгоритм.