ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης

ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΕΡΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

($7^{ο}$ Εξάμηνο Σχολής Μηχ.Μηχ. ΕΜΠ)

Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΣΥΖΥΓΩΝ ΚΛΙΣΕΩΝ

Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου
Καθηγητής ΕΜΠ

kgianna@central.ntua.gr

http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research/

Γιατί ασχολούμαστε με τετραγωνικές μορφές;

Ορισμός 3.1 *Ορίζουμε ως* **τετραγωνική μορφή** *(quadratic form) ενός διανύσματος $\overrightarrow{x}$ κάθε βαθμωτή συνάρτηση της μορφής*

$$F(\overrightarrow{x}) = \frac{1}{2}\overrightarrow{x}^T A\overrightarrow{x} - \overrightarrow{b}^T\overrightarrow{x} + c \tag{3.7}$$

όπου A ένα τετραγωνικό μητρώο και c μια βαθμωτή σταθερά.

Θεώρημα 3.1 *Αν το A είναι συμμετρικό και θετικά ορισμένο μητρώο, τότε το ελάχιστο της $F(\overrightarrow{x})$ (σχέση 3.7) ταυτίζεται με τη λύση του γραμμικού συστήματος*

$$A\overrightarrow{x} = \overrightarrow{b}$$

όπου A ένα τετραγωνικό μητρώο και c μια βαθμωτή σταθερά.

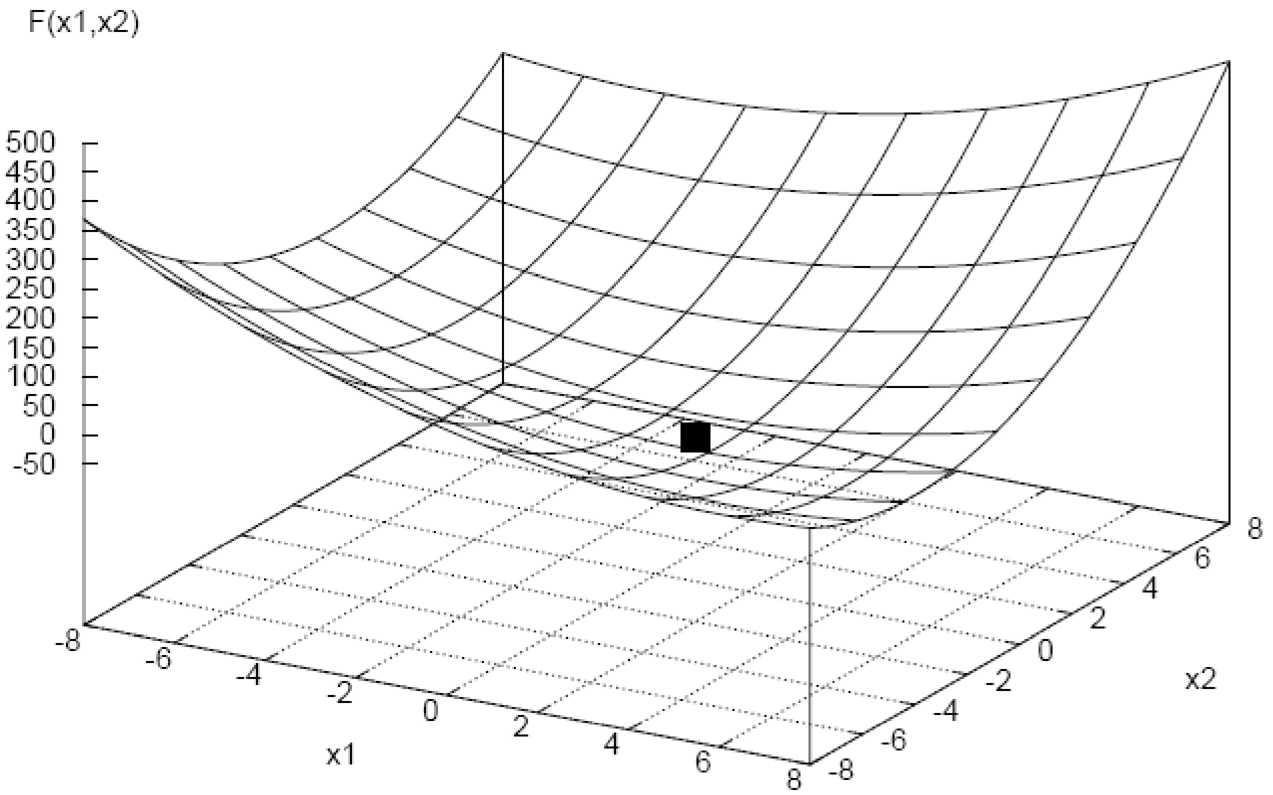
$$\nabla F(\overrightarrow{x}) = \frac{1}{2}A^T\overrightarrow{x} + \frac{1}{2}A\overrightarrow{x} - \overrightarrow{b}$$

$$\nabla F(\overrightarrow{x}) = A\overrightarrow{x} - \overrightarrow{b}$$

Γιατί ασχολούμαστε με τετραγωνικές μορφές;

$$
\begin{aligned}
F(\vec{x}^* + \vec{e}) &= \frac{1}{2}(\vec{x}^* + \vec{e})^T A(\vec{x}^* + \vec{e}) - \vec{b}^T(\vec{x}^* + \vec{e}) + c \\
&= \frac{1}{2}\vec{x}^{*T} A\vec{x}^* + \vec{e}^T A\vec{x}^* + \frac{1}{2}\vec{e}^T A\vec{e} - \vec{b}^T\vec{x}^* - \vec{b}^T\vec{e} + c \\
&= \frac{1}{2}\vec{x}^{*T} A\vec{x}^* - \vec{b}^T\vec{x}^* + c + \vec{e}^T\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{e}^T A\vec{e} - \vec{b}^T\vec{e} \\
&= F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2}\vec{e}^T A\vec{e}
\end{aligned}
$$

Γραφική παράσταση τετραγωνικής Συνάρτησης



Απότομη Κάθοδος για Γραμμικά Προβλήματα

Μέθ. Απότομης Καθόδου

$$\vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \eta\, \vec{p}^{\,n}$$
$$\vec{p}^{\,n} = -\nabla F(\vec{x}^{\,n})$$

Για την ελαχιστοποίηση της

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{2}\vec{x}^{\,T} A \vec{x} - \vec{b}^{\,T}\vec{x} + c$$

Είναι ως να λύνεται η

$$A\,\vec{x} = \vec{b}$$

Με υπόλοιπο της εξίσωσης το

$$\vec{r}^{\,n} = \vec{b} - A\vec{x}^{\,n}$$

Άρα θα είναι

$$\vec{r}^{\,n} = \vec{p}^{\,n} = -\nabla F(\vec{x}^{\,n}) = \vec{b} - A\vec{x}^{\,n}$$

$$\vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \eta^{n}\, \vec{r}^{\,n}$$

Ποιο το βέλτιστο βήμα η ;

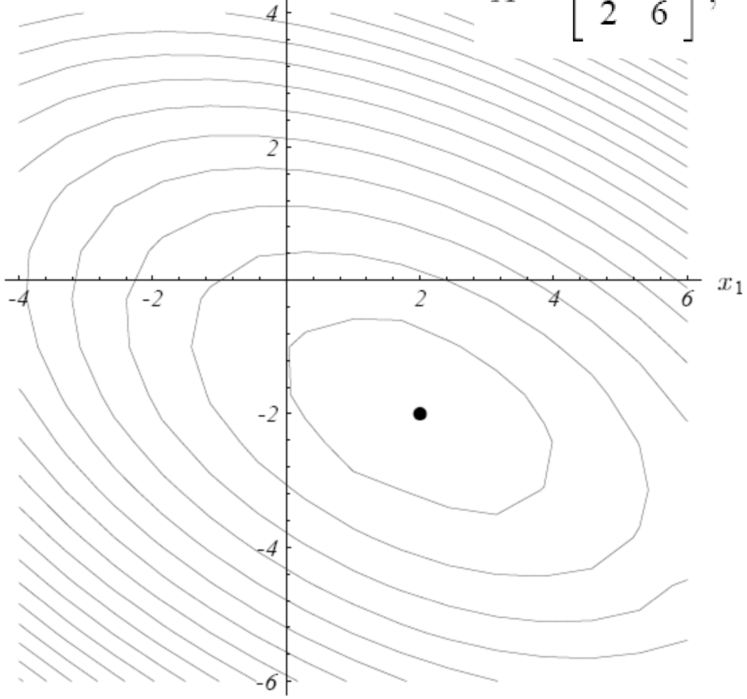
$$\frac{d}{d\eta}F(\overrightarrow{x}^{n+1}) = \nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1})^T \frac{d}{d\eta}\overrightarrow{x}^{n+1} = 0$$

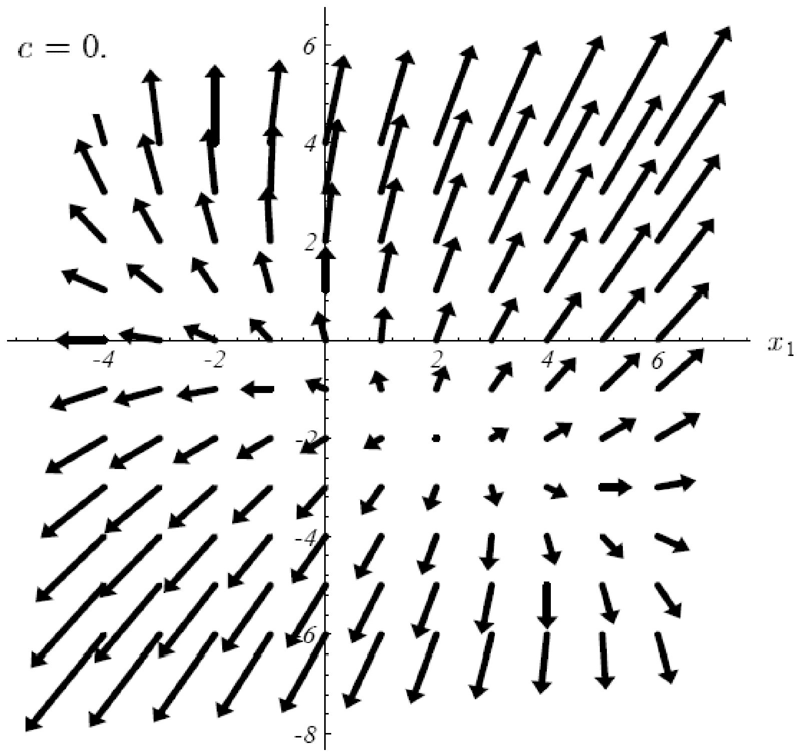
ή

$$\nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1})^T \overrightarrow{r}^{n} = -\overrightarrow{r}^{n+1^T} \overrightarrow{r}^{n} = 0$$

Κατανόηση του τρόπου που προχωρά η Απότομη Κάθοδος:

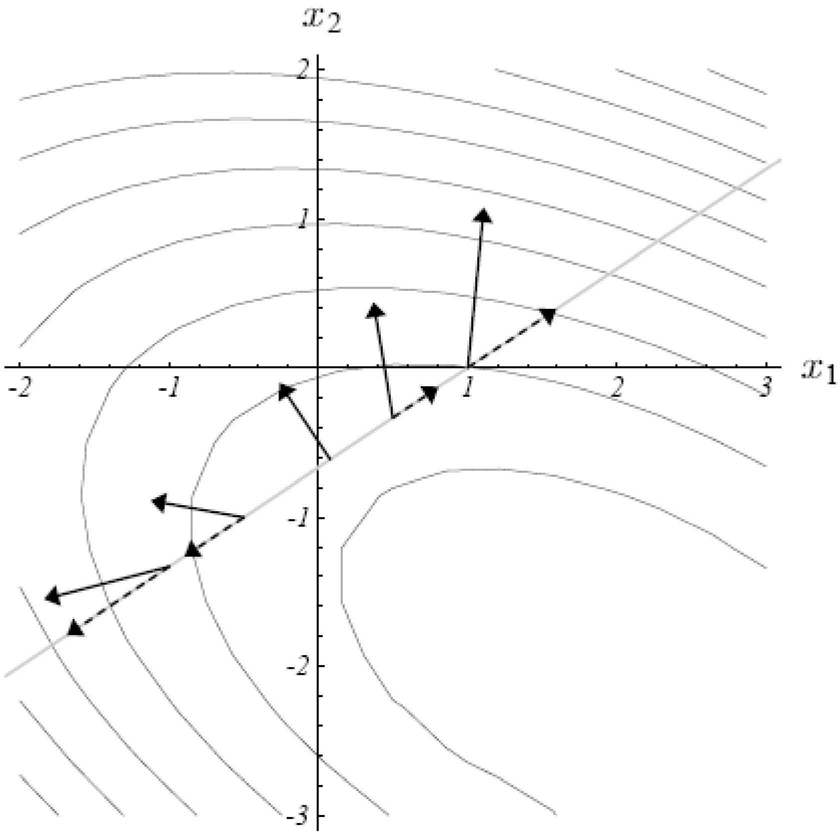
$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}, \qquad c = 0.$$





Απότομη Κάθοδος για Γραμμικά Προβλήματα

Έστω ότι ξεκινώ από το (-2,-2):



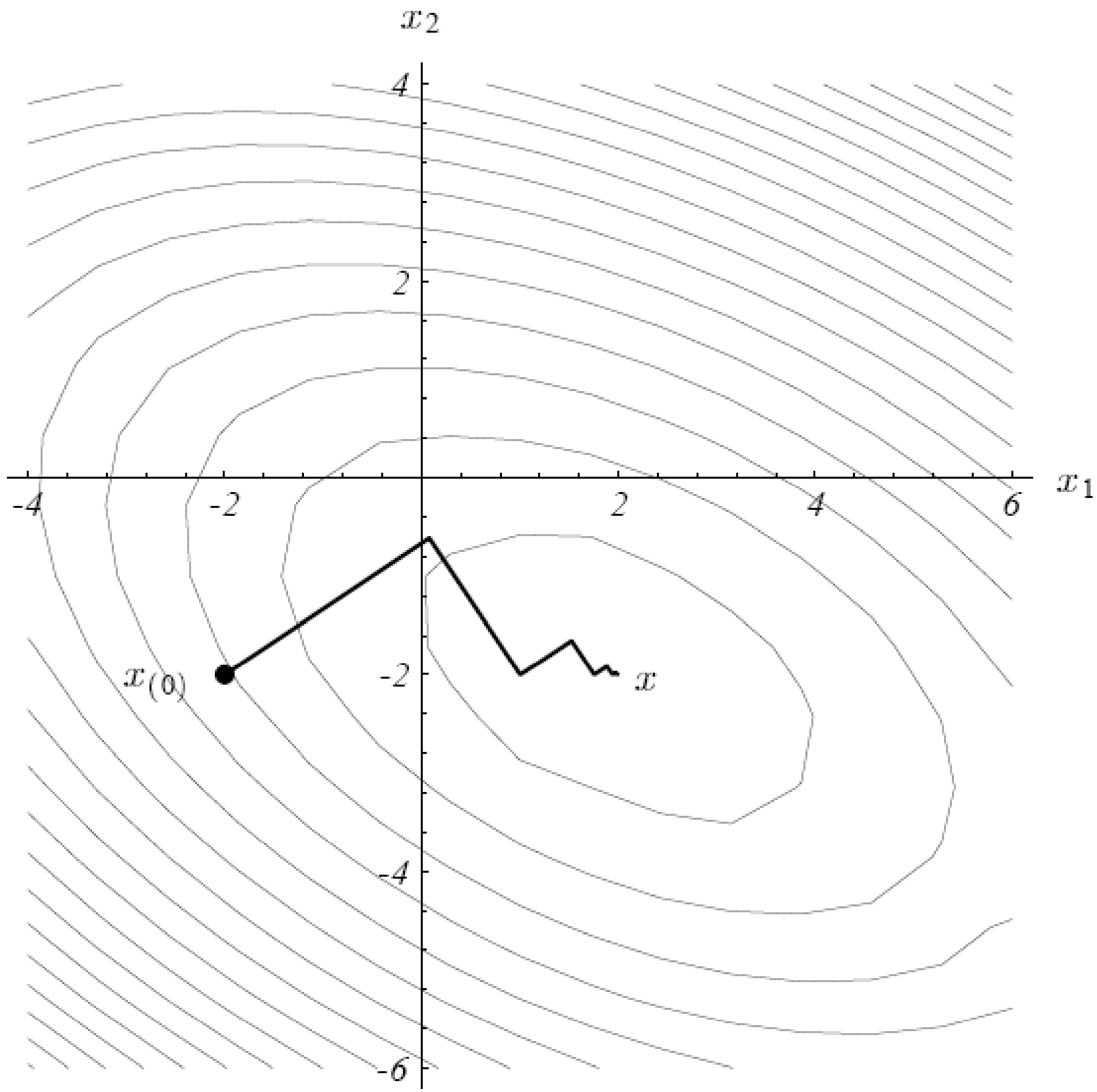
Παράδειγμα από το:

An Introduction to
the Conjugate Gradient Method
Without the Agonizing Pain
Edition $1\frac{1}{4}$

Jonathan Richard Shewchuk
August 4, 1994

Απότομη Κάθοδος για Γραμμικά Προβλήματα

Έστω ότι ξεκινώ από το (-2,-2). Πως καταλήγω στο (2,-2):



Μέθοδος Καθόδου & Βασικές Γνώσεις

ΜΕΘΟΔΟΣ ΚΑΘΟΔΟΥ:

$$\vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \eta^{n} \vec{p}^{\,n}$$

Ψάχνουμε βέλτιστα $\underline{\eta \;\&\; \vec{p}}$

ΒΑΣΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ

$$\left.\begin{array}{ll} \text{ακριβής λύση} & A\vec{x}^{*} = b \\ \text{προσεγγ. λύση} & A\vec{x} \cong b \end{array}\right\} \quad \text{error} \quad \vec{e} = \vec{x}^{*} - \vec{x}$$

$$\text{residual} \quad \vec{r} = \underset{\substack{\uparrow \\ A\vec{x}^{*}}}{\vec{b}} - A\vec{x} = A\vec{e}$$

$$\boxed{\vec{r} = A\vec{e}}$$

Βελτιστοποίηση με Ανίχνευση Κατά Γραμμή (Line Search)

Κάνω $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \eta^{n}\vec{p}^{n}$, με κάποιο $\vec{p}^{n}$

Λογικά, απαιτώ:

$$\frac{\partial F(\vec{x}^{n+1})}{\partial \eta^{n}} = \emptyset \Rightarrow \underbrace{\nabla F(\vec{x}^{n+1})}_{-\vec{r}^{n+1}} \underbrace{\frac{\partial \vec{x}^{n+1}}{\partial \eta^{n}}}_{\vec{p}^{n}} = \emptyset \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -\vec{r}^{n+1^T} \cdot \vec{p}^{n} = \emptyset$$

Άλλα: $\vec{r}^{n+1} = A\vec{e}^{n+1}$

$$\Rightarrow \vec{p}^{\,n^T} A \vec{e}^{\,n+1} = 0 \Rightarrow \vec{p}^{\,n^T} A \underbrace{(\vec{e}^{\,n} + \eta^n \vec{p}^{\,n})}_{} = 0$$

$$\vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \eta^n \vec{p}^{\,n}$$

$$\text{ή} \quad \vec{e}^{\,n+1} = \vec{e}^{\,n} + \eta^n \vec{p}^{\,n}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\vec{p}^{\,n^T} A \vec{e}^{\,n}}_{\vec{r}^{\,n}} + \eta^n \vec{p}^{\,n^T} A \vec{p}^{\,n} = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\eta^n = \frac{\vec{p}^{\,n^T} \vec{r}^{\,n}}{\vec{p}^{\,n^T} A \vec{p}^{\,n}}} \quad (1) \quad \overbrace{=\frac{\vec{r}^{\,n^T} \vec{r}^{\,n}}{\vec{r}^{\,n^T} A \vec{r}^{\,n}}}^{\text{αν steepest descent}}$$

χωρίς να εξασφαλίζει ότι δεν θα ξαναψάξω κατά το ίδιο $\vec{p}^{\,n}$!

Απότομη Κάθοδος για Γραμμικά Προβλήματα

Αλγόριθμος:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης $\overrightarrow{x}^0$. Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Υπολογισμός υπολοίπου $\overrightarrow{r}^n = \overrightarrow{b} - A\overrightarrow{x}^n$.

Βήμα 2: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\overrightarrow{r}^{nT}\overrightarrow{r}^n}{\overrightarrow{r}^{nT}A\overrightarrow{r}^n}$,

Βήμα 3: Ανανέωση λύσης $\overrightarrow{x}^{n+1} = \overrightarrow{x}^n + \eta^n\overrightarrow{r}^n$.

Βήμα 4: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Σχόλια περί υπολογιστικού κόστους …

“*matrix-vector products*”

Οικονομία:

$$
\begin{aligned}
\overrightarrow{x}^{n+1} &= \overrightarrow{x}^n + \eta^n \overrightarrow{r}^n \\
\overrightarrow{b} - A\overrightarrow{x}^{n+1} &= \overrightarrow{b} - A\overrightarrow{x}^n - \eta^n A\overrightarrow{r}^n \\
\overrightarrow{r}^{n+1} &= \overrightarrow{r}^n - \eta^n A\overrightarrow{r}^n
\end{aligned}
$$

Απότομη Κάθοδος για Γραμμικά Προβλήματα

Νέος Αλγόριθμος:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης $\vec{x}^0$. Δείκτης $n=0$. Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\vec{r}^n = \vec{b} - A\vec{x}^n$.

Βήμα 1: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\vec{r}^{nT}\vec{r}^n}{\vec{r}^{nT}A\vec{r}^n}$, με αποθήκευση του διανύσματος $A\vec{r}^n$ για επόμενη χρήση.

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n\vec{r}^n$.

Βήμα 3: Ανανέωση υπολοίπου $\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n - \eta^n A\vec{r}^n$, χρησιμοποιώντας το ήδη υπολογισμένο διάνυσμα $A\vec{r}^n$. Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$ και επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Τι πρόβλημα/μειονέκτημα έχει αυτός;

Συζυγία - Conjugacy

Στόχος = όταν $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \eta^{n}\vec{p}^{n}$, να έχω εξαντλήσει το ψάξιμο κατά την $\vec{p}^{n}$.

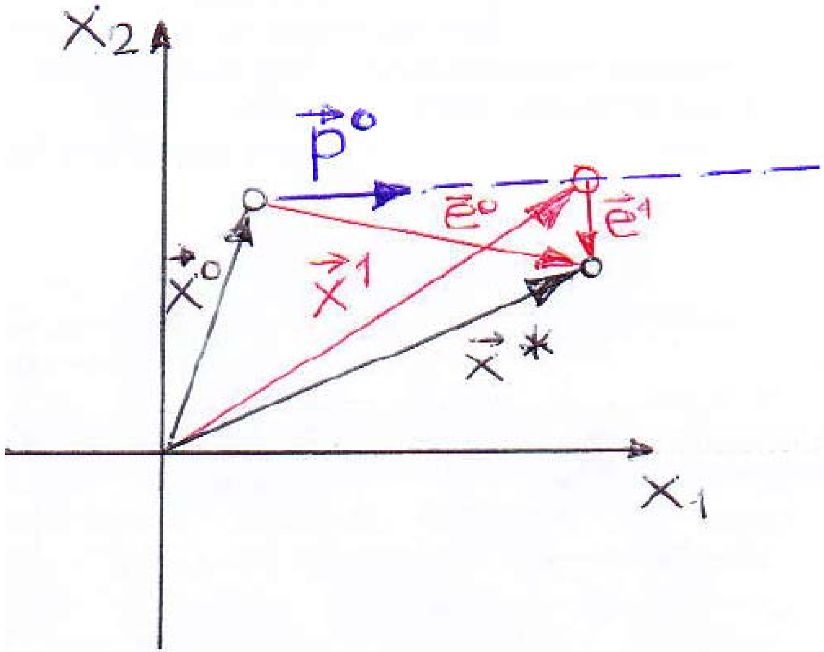
Αλλιώς = αν $\vec{x} \in \mathbb{R}^{N}$, N το πολύ βήματα!

Μια ιδέα:

$$\left.\begin{array}{l} \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \eta^{n}\vec{p}^{n} \\ \text{μέσον } \vec{x}^{*} \end{array}\right\} \quad \vec{e}^{n+1} = \vec{e}^{n} - \eta^{n}\vec{p}^{n}$$

Αν $\vec{e}^{n+1} \perp \vec{p}^{n}$, τελείωσα το ψάξιμο κατά $\vec{p}^{n}$:
(άρα κίνηση με κάθετα $\vec{p}$)

Συζυγία - Conjugacy



ευρεση ελαχιστου
σε δυο (=N) βήματα
(άσχετα με την
επιλογή του $\vec{x}^0$)

Συζυγία - Conjugacy

$$\vec{p}^{\,n^T} \vec{e}^{\,n+1} = 0 \Rightarrow \vec{p}^{\,n^T} (\vec{e}^{\,n} + \eta^n \vec{p}^{\,n}) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{p}^{\,n^T} \vec{e}^{\,n} - \eta^n \vec{p}^{\,n^T} \vec{p}^{\,n} = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\eta^n = \frac{\vec{p}^{\,n^T} \vec{e}^{\,n}}{\vec{p}^{\,n^T} \vec{p}^{\,n}}} \quad (2)$$

"Άχρηστο", γιατί $\vec{e}^{\,n}$ = άγνωστο!

Μια Καλύτερη Ιδέα!

Προς Μέθοδο Συζυγών Διευθύνσεων (Conjugate Direction Method)

Το τρέχον residual (όχι το τρέχον error!) να είναι κάθετο σε κάθε προηγηθείσα κατεύθυνση ανίχνευσης $\vec{p}$:

$$\boxed{\vec{p}^{\,i^T} \vec{r}^{\,j} = \emptyset \;, \quad \forall i<j} \quad (3)$$

Ή, αφού $\vec{r}^{\,j} = A\vec{e}^{\,j}$: $\Rightarrow \vec{p}^{\,i^T} A \vec{e}^{\,j} = \emptyset \;, \forall i<j$

Συγχρόνως, υιοθετώ Gram-Schmidt διατύπωση:

$$\boxed{\vec{p}^{\,n} = \vec{u}^{\,n} + \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{ni} \vec{p}^{\,i}} \quad (4)$$

Μια Καλύτερη Ιδέα! (A-Conjugacy, A-Συζυγία)

Είναι: $\vec{e}^{n+1} = \vec{e}^{n} + \eta^{n} \vec{p}^{n}$, από το οποίο:

$$\left.\begin{array}{ll} \text{γενικά:} & \vec{e}^{n} = \vec{e}^{o} + \sum_{i=0}^{n-1} \eta^{i} \vec{p}^{i} \\ \text{ειδικά:} & \vec{e}^{N} = \vec{e}^{o} + \sum_{i=0}^{N-1} \eta^{i} \vec{p}^{i} \equiv \emptyset \end{array}\right\} \quad \vec{e}^{n} = +\sum_{j=n}^{N-1} \eta^{j} \vec{p}^{j}$$

Άρα: $\vec{p}^{m^T} A \vec{e}^{n} = \emptyset, \ \forall m < n \Rightarrow$

$$\Rightarrow \sum_{j=n}^{N-1} \vec{p}^{m^T} A \vec{p}^{j} = \emptyset \quad , \forall m < n$$

που, πρακτικά, σημαίνει την απαίτηση:

$$\boxed{\vec{p}^{i^T} A \vec{p}^{j} = \emptyset \quad , i \neq j} \quad (5)$$

A-CONJUGACY

Τότε :

$$\left.\begin{aligned} \vec{p}^{i^T} A \vec{p}^{j} &= \emptyset \quad , \text{ έστω } i>j \\ \vec{p}^{i} &= \vec{u}^{i} + \sum_{m=\emptyset}^{i-1} \beta_{im} \vec{p}^{m} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(\vec{u}^{i} + \sum_{m=\emptyset}^{i-1} \beta_{im} \vec{p}^{m} \right)^T A \vec{p}^{j} = \emptyset \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{u}^{i^T} A \vec{p}^{j} + \underbrace{\sum_{m=\emptyset}^{i-1} \beta_{im} \vec{p}^{m^T} A \vec{p}^{j}}_{\substack{\text{λόγω της (5), αφού } i>j \\ \text{μένει μόνο το } \beta_{ij} \vec{p}^{j^T} A \vec{p}^{j}}} = \emptyset \Rightarrow$$

Μέθοδος Συζυγών Διευθύνσεων

$$\Rightarrow \quad \vec{u}^{i^T} A \vec{p}^j + \beta_{ij} \vec{p}^{j^T} A \vec{p}^j = \emptyset \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta_{ij} = - \frac{\vec{u}^{i^T} A \vec{p}^j}{\vec{p}^{j^T} A \vec{p}^j}} \quad (6) \qquad i > j$$

Πινακοποίηση:

$$\begin{bmatrix} - & - & - & - \\ \beta_{10} & - & - & - \\ \beta_{20} & \beta_{21} & - & - \\ \beta_{30} & \beta_{31} & \beta_{32} & - \end{bmatrix}$$

ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑ:

Γιά τον υπολογισμό του $\vec{p}^m$ απαιτούνται όλα τα $\vec{p}^1, \vec{p}^2, \ldots, \vec{p}^{m-1}$.

Σκοπός : Θεραπεία προηγούμενου προβλήματος
Οικονομία μνήμης

Αντί της (4), πάρε την :

$$\boxed{\vec{p}^{\,n} = \vec{r}^{\,n} + \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{ni} \vec{p}^{\,i}} \quad (7)$$

Τότε : (6) $\Rightarrow$

$$\boxed{\beta_{ij} = -\frac{\vec{r}^{\,i^T} A \vec{p}^{\,j}}{\vec{p}^{\,j^T} A \vec{p}^{\,j}}, \; i > j} \quad (6')$$

Όμως : $\vec{e}^{\,n+1} = \vec{e}^{\,n} + \eta^n \vec{p}^{\,n} \Rightarrow \vec{r}^{\,n+1} = \vec{r}^{\,n} + \eta^n A \vec{p}^{\,n}$

ή $\quad \vec{r}^{\,j+1} = \vec{r}^{\,j} + \eta^j A \vec{p}^{\,j}$

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

ή $\vec{r}^{\,j+1} = \vec{r}^{\,j} + \eta^j A \vec{p}^{\,j}$

Επί $\vec{r}^{\,iT}$, με $i>j$:

$$\underbrace{\vec{r}^{\,iT}\vec{r}^{\,j+1} = \vec{r}^{\,iT}\vec{r}^{\,j}}_{\text{Γινόμενα Residuals}} + \eta^j \underbrace{r^{iT} A \vec{p}^{\,j}}_{\text{Αριθμητής του } \beta_{ij} \text{ στην (6)}}$$

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

Περί Γινομένων Residuals:

$$(7) \rightarrow \quad \vec{p}^{\,i} = \vec{r}^{\,i} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} \vec{p}^{\,k}$$

Επί $\vec{r}^{\,j}$ $(i<j)$:

$$\underbrace{\vec{p}^{\,i^T} \vec{r}^{\,j}}_{\substack{\text{Μηδέν} \\ \text{λόγω (3)}}} = \vec{r}^{\,i^T} \vec{r}^{\,j} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} \underbrace{\vec{p}^{\,k^T} \vec{r}^{\,j}}_{\substack{\text{Μηδέν} \\ \text{λόγω (3)}}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{r}^{\,i^T} \vec{r}^{\,j} = 0 \, , \; i<j} \quad (8)$$

Τότε στην:

$$\underbrace{\vec{r}^{\,i^T}\vec{r}^{\,j+1}}_{\substack{\text{μένει μόνο}\\ \text{το } \vec{r}^{\,j+1^T}\vec{r}^{\,j+1}\\ \text{αν } i=j+1}} = \underbrace{\vec{r}^{\,i^T}\vec{r}^{\,j}}_{\substack{\text{πάντα}\\ \text{μηδέν}}} + \eta^j \underbrace{\vec{r}^{\,i^T}A\vec{p}^{\,j}}_{\substack{\text{αριθμητής του } \beta_{ij}\\ \text{στην } (6')}} \;, \quad i>j$$

Συνεπώς:

Η (6'), γιά κάθε τιμή του i, αποκτά μη-μηδενική τιμή μόνο αν $i=j+1$ ή $j=i-1$.

Τότε: $$\vec{r}^{\,i^T}A\vec{p}^{\,i-1} = \frac{1}{\eta^{i-1}}\vec{r}^{\,i^T}\vec{r}^{\,i}$$

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

Τότε: $\vec{r}^{iT} A \vec{p}^{i-1} = \frac{1}{\eta^{i-1}} \vec{r}^{iT} \vec{r}^{i}$

και: $$\boxed{\beta_{i,i-1} = \beta^{i} = \frac{1}{\eta^{i-1}} \cdot \frac{\vec{r}^{i} \cdot \vec{r}^{i}}{\vec{p}^{i-1T} A \vec{p}^{i-1}}}$$ C.G. (9)

Πινακοποίηση:

$$\begin{bmatrix} - & - & - & - \\ \beta^{1} & - & - & - \\ - & \beta^{2} & - & - \\ - & - & \beta^{3} & - \end{bmatrix}$$

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

ΒΕΛΤΙΣΤΟ η ΣΤΗ C.G.

(1)

$$\eta^n = \frac{\vec{p}^{nT}\vec{r}^{n}}{\vec{p}^{nT}A\vec{p}^{n}} \Rightarrow \eta^{i-1} = \frac{\vec{p}^{i-1T}\vec{r}^{i-1}}{\vec{p}^{i-1T}A\vec{p}^{i-1}}$$

(9) $\Rightarrow$

$$\boxed{\beta^i = \frac{\vec{r}^{iT}\vec{r}^{i}}{\vec{p}^{i-1T}\vec{r}^{i-1}}}$$

C.G.

(10)

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

ΕΠΑΝΑΔΙΑΤΥΠΩΣΗ ΜΟΝΟ ΜΕ RESIDUALS

7 → $$\vec{p}^{\,i} = \vec{r}^{\,i} + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} \vec{p}^{\,k}$$

Επί $\vec{r}^{\,i}$:

$$\vec{p}^{\,iT}\vec{r}^{\,i} = \vec{r}^{\,iT}\vec{r}^{\,i} + \sum_{k=0}^{i-1} \underbrace{\beta_{ik}\vec{p}^{\,kT}\vec{r}^{\,i}}_{\text{μηδέν, λόγω (3) αφού } k<i} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{p}^{\,iT}\vec{r}^{\,i} = \vec{r}^{\,iT}\vec{r}^{\,i} \quad \text{ή} \quad \vec{p}^{\,i-1T}\vec{r}^{\,i-1} = \vec{r}^{\,i-1T}\vec{r}^{\,i-1}$$

Άρα:

$$\boxed{\beta^{i} = \frac{\vec{r}^{\,iT}\vec{r}^{\,i}}{\vec{r}^{\,i-1T}\vec{r}^{\,i-1}}}$$

C.G.

11

Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (Conjugate Gradient, CG)

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης $\vec{x}^0$. Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\vec{r}^0 = \vec{b} - A\vec{x}^0$. Ορισμός αρχικής κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^0 = \vec{r}^0$. Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\vec{r}^{nT}\vec{r}^n}{\vec{p}^{nT}A\vec{p}^n}$, (σχέση 3.47, σε συνδυασμό με τη σχέση 3.69).

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n\vec{p}^n$.

Βήμα 3: Ανανέωση υπολοίπου $\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n - \eta^n A\vec{p}^n$, (σχέση 3.61).

Βήμα 4: Υπολογισμός συντελεστή $\beta^{n+1} = \frac{\vec{r}^{n+1T}\vec{r}^{n+1}}{\vec{r}^{nT}\vec{r}^n}$, (σχέση 3.70).

Βήμα 5: Ανανέωση διανύσματος κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^{n+1} = \vec{r}^{n+1} + \beta^{n+1}\vec{p}^n$,(προκύπτει από τη σχέση 3.54, για δείκτη $n+1$ αντί του n, με το $\vec{r}^{n+1}$ αντί του $\vec{u}^{n+1}$ λόγω της γνωστής παραδοχής και κρατώντας τη μοναδική μη-μηδενική τιμή του συντελεστή β από όλους τους όρους της άθροισης).

Βήμα 6: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Με:

$$\overrightarrow{r}^n = -\nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης $\overrightarrow{x}^0$. Υπολογισμός $F(\overrightarrow{x}^0)$. Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\overrightarrow{r}^0 = -\nabla F(\overrightarrow{x}^0)$, (σχέση 3.71). Ορισμός αρχικής κατεύθυνσης ανίχνευσης $\overrightarrow{p}^0 = \overrightarrow{r}^0$. Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Αν $\overrightarrow{r}^n \neq 0$, υπολογισμός μεγέθους βήματος η^n με (ακριβή ή έστω προσεγγιστική) ανίχνευση κατά γραμμή, στην κατεύθυνση $\overrightarrow{p}^n$, της σχέσης $\min_{\eta^n>0} F(\overrightarrow{x}^n + \eta^n \overrightarrow{p}^n)$.

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\overrightarrow{x}^{n+1} = \overrightarrow{x}^n + \eta^n \overrightarrow{p}^n$.

Βήμα 3: Υπολογισμός $\nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1})$.

Βήμα 4: Υπολογισμός συντελεστή β^{n+1} από τη σχέση

$$\beta_{FR}^{n+1} = \frac{\nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1})^T \nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1})}{\nabla F(\overrightarrow{x}^{n})^T \nabla F(\overrightarrow{x}^{n})} \qquad (3.72)$$

Βήμα 5: Ανανέωση διανύσματος κατεύθυνσης ανίχνευσης $\overrightarrow{p}^{n+1} = -\nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1}) + \beta_{FR}^{n+1} \overrightarrow{p}^n$.

Βήμα 6: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.