



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ

Η Διακριτή και η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος
για τον Υπολογισμό Πρώτων και Δεύτερων
Παραγώγων Ευαισθησίας. Εφαρμογές στον
Αντίστροφο Σχεδιασμό Αγωγού.

Διπλωματική Εργασία
της

Ιακωβίνας Χριστίνας Μυραλίδη

Επιβλέπων: Κ.Χ. Γιαννάκογλου
Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

Οκτώβριος 2008

Η Διακριτή και η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για τον Υπολογισμό
Πρώτων και Δεύτερων Παραγώγων Ευαισθησίας. Εφαρμογές στον
Αντίστροφο Σχεδιασμό Αγωγού.

Διπλωματική εργασία
της

Ιακωβίνας Χριστίνας Μυραλίδη

Επιβλέπων: Κ.Χ. Γιαννάκογλου
Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

Οκτώβριος 2008

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία, επικεντρώνεται στο πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού $1-D$ αγωγού με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης. Οι εξισώσεις κατάστασης είναι οι $1-D$ εξισώσεις Euler. Παρουσιάζονται τρόποι υπολογισμού τόσο των πρώτων όσο και των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, με χρήση συζυγών τεχνικών. Το πλεονέκτημα χρήσης των συζυγών τεχνικών, έναντι κλασικών μεθόδων υπολογισμού παραγώγων ευαισθησίας, είναι ο μικρότερος υπολογιστικός χρόνος των μεθόδων αυτών.

Η συζυγής τεχνική διαχωρίζεται στη διακριτή και συνεχή παραλλαγή της. Το αντικείμενο της παρούσας εργασίας εστιάζεται και στις δυο παραλλαγές. Πιο συγκεκριμένα, για τη διακριτή συζυγή τεχνική προγραμματίστηκε και πιστοποιήθηκε, σε σειρά εφαρμογών, το λογισμικό υπολογισμού του Hessian μητρώου, χρησιμοποιώντας ως βάση το ήδη υπάρχον λογισμικό υπολογισμού των πρώτων παραγώγων. Σε ό,τι αφορά τη συνεχή συζυγή τεχνική, προγραμματίστηκε και πιστοποιήθηκε το λογισμικό εύρεσης πρώτων και δεύτερων παραγώγων - Hessian μητρώο.

Για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου, αναπτύσσονται τέσσερις πιθανοί τρόποι υπολογισμού, οι οποίοι συνδυάζουν, με όλους τους δυνατούς τρόπους, την ευθεία διαφύση και τη συζυγή τεχνική. Επιλέγεται και αναλύεται διεξοδικά σε εφαρμογές ο οικονομικότερος εξ αυτών τρόπος, ο οποίος είναι ο συνδυασμός ευθείας διαφύσης για τον υπολογισμό των πρώτων και συζυγής μεθόδου για τις δεύτερες παραγώγους. Τέλος, διερευνάται η σημασία βολικών παραδοχών-προσεγγίσεων, όπως για παράδειγμα η θεώρηση ως μηδενική της διακύμανσης της Ιακωβιανής ορίζουσας των όρων μεταφοράς. Η παραδοχή αυτή δεν επηρεάζει τον αντίστροφο σχεδιασμό του αγωγού.

National Technical University of Athens
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
LAB. OF THERMAL TURBOMACHINES

**The Continuous and Discrete Adjoint Method for the Calculation of
First- and Second- Order Sensitivity Derivatives. Application in the
Inverse Design of Ducts.**

Diploma Thesis
by

Iakovina Christine Myralidi

Supervisor: K.C. Giannakoglou
Associate Professor NTUA

October 2008

Abstract

This diploma thesis focuses on solving inverse design problems of $1 - D$ ducts reproducing a given target pressure distribution. The Euler state equations were solved. Adjoint methods for producing the first- and second-order sensitivities of the objective function with respect to the design variables are presented. The benefit of using adjoint methods to compute objective function gradients, when compared with other classic methods, is the reduction of CPU cost.

In this diploma, both the discrete and the continuous adjoint method were tested. In particular, problems based on Hessian matrix were programmed and tested with the discrete adjoint method, using existent software developed for computing first derivatives. As regards the continuous adjoint method, a software for calculating both first- and second-order derivatives (Hessian matrix) was developed and validated.

Direct differentiation, adjoint and mixed approaches for the computation of the Hessian matrix are presented. The best in terms of efficiency, namely the direct-adjoint method, was chosen and developed. Finally, the assumption that the jacobian is independent on the flow, is investigated. This assumption does not affect the result of inverse design.

Ευχαριστίες

Από την θέση αυτή θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της εργασίας Κ. Γιαννάκογλου, Αναπλ. Καθηγητή Ε.Μ.Π. για τον χρόνο που αφιέρωσε σε εμένα και την πολύτιμη καθοδήγηση που μου προσέφερε όποτε και αν την χρειάστηκα.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Αλέξανδρο Ζυμάρη και Θωμά Ζερβογιάννη για την μεγάλη βοήθεια που μου προσέφεραν όλο αυτόν τον καιρό και για την πληθώρα των γνώσεων που αποκόμισα από τη συνεργασία μαζί τους.

Στο σημείο αυτό δεν θα μπορούσα να παραλείψω τις ευχαριστίες μου προς τον Δρ. Δημήτρη Παπαδημητρίου για τις εύστοχες παρατηρήσεις που μου προσέφερε κατά τη διάρκεια της εκπόνησης αυτής της εργασίας.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1-1
1.1	Εισαγωγικά σχόλια.	1-1
1.2	Συμβολή της παρούσας εργασίας.	1-3
1.3	Η δομή της εργασίας.	1-4
2	Αριθμητική Επίλυση 1D Ροής σε Αγωγό.	2-1
2.1	Ευθύ 1D πρόβλημα.	2-1
2.2	Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής.	2-2
2.3	Επίλυση δ-διατύπωσης με ακρίβεια πρώτης τάξης.	2-4
2.4	Οριακές συνθήκες.	2-9
2.5	Διακριτοποίηση εξισώσεων ροής στο εσωτερικό.	2-11
2.6	Επιλύτης ευθέος προβλήματος.	2-19
3	Εύρεση Πρώτης Παραγώγου με Διακριτή Συζυγή Μέθοδο.	3-1
3.1	Εισαγωγικά σχόλια.	3-1
3.2	Υπολογισμός 1ης παραγώγου με ευθεία διαφόριση.	3-1
3.3	Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη συζυγή μέθοδο.	3-6
3.4	Σύγκριση ευθείας διαφόρισης και συζυγούς μεθόδου	3-7
3.5	Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών για εύρεση 1ης παραγώγου	3-8
3.6	Αντίστροφος σχεδιασμός με μέθοδο απότομης καθόδου	3-9
3.7	Αλγόριθμος αντίστροφου σχεδιασμού	3-9
4	Εύρεση Δεύτερων Παραγώγων με Διακριτή Συζυγή Μέθοδο.	4-1
4.1	Εισαγωγικά σχόλια.	4-1
4.2	Υπολογισμός 2ων παραγώγων με ευθεία διαφόριση.	4-2
4.3	Υπολογισμός 2ων παραγώγων με συζυγή τεχνική.	4-4
4.4	Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών για εύρεση του Hessian μητρώου.	4-10
4.5	Αντίστροφος σχεδιασμός 1 – D αγωγού με τη μέθοδο Newton	4-10
4.6	Αλγόριθμος αντίστροφου σχεδιασμού	4-11
5	Αντίστροφος Σχεδιασμός με τη Διακριτή μέθοδο.	5-1
5.1	Εισαγωγικά σχόλια	5-1
5.2	Πρώτος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.	5-2
5.3	Δεύτερος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.	5-13

5.4	Τρίτος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.	5-22
6	Εύρεση Παραγώγων με τη Συνεχή Συζυγή Μέθοδο.	6-1
6.1	Εισαγωγικά σχόλια	6-1
6.2	Υπολογισμός πρώτης παραγώγου με συνεχή συζυγή μέθοδο.	6-2
6.3	Υπολογισμός δεύτερης παραγώγου με συνεχή συζυγή μέθοδο.	6-5
6.4	Σχήμα επίλυσης συζυγών εξισώσεων 1ης τάξης ακρίβειας.	6-9
6.5	Οριακές συνθήκες στο συζυγές πρόβλημα.	6-12
6.6	Εναλλακτικός τρόπος διατύπωσης οριακών συνθηκών.	6-17
6.7	Σχήμα επίλυσης συζυγών εξισώσεων 2ης τάξης ακρίβειας.	6-20
6.8	Επιλύτης συζυγούς προβλήματος.	6-26
7	Πιστοποίηση Αντίστροφου Σχεδιασμού με Συνεχή Μέθοδο.	7-1
7.1	Εισαγωγικά σχόλια	7-1
7.2	Υπολογισμός απότομης καθόδου με συνεχή συζυγή μέθοδο.	7-2
7.3	Υπολογισμός μεθόδου Newton με συνεχή συζυγή μέθοδο.	7-5
8	Συμπεράσματα	8-1

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Εισαγωγικά σχόλια.

Τα τελευταία χρόνια, παρατηρείται στο μηχανολογικό χώρο έντονο ενδιαφέρον στο σχεδιασμό αεροδυναμικών μορφών με βάση προκαθορισμένα κριτήρια. Επομένως, κρίνονται απαραίτητα υπολογιστικά εργαλεία που να καθιστούν εφικτό τον αντίστροφο σχεδιασμό και τη βελτιστοποίηση τέτοιων μορφών. Πιο αναλυτικά, κρίνεται σκόπιμη η χρήση υπολογιστικών μεθόδων και λογισμικού που όχι μόνο θα υπολογίζουν τη ροή γύρω από μια αεροδυναμική μορφή, αλλά ταυτόχρονα και το σχήμα που θα έπρεπε να έχει η αεροδυναμική μορφή, ώστε να προκαλεί επιθυμητή συμπεριφορά του πεδίου ροής.

Η βελτιστοποίηση μορφής, για παράδειγμα ενός αγωγού, απαιτεί ως στόχο το σχεδιασμό της βέλτιστης μορφής αυτού, σύμφωνα με κάποιο κριτήριο. Το κριτήριο αυτό λαμβάνει τη μορφή μιας συνάρτησης - στόχου, η οποία πρέπει να ελαχιστοποιηθεί. Για παράδειγμα, η συνάρτηση - στόχος θα μπορούσε να είναι η διαφορά μεταξύ δύο κατανομών πίεσης, ή ο συντελεστής απωλειών ή ο λόγος $\frac{C_D}{C_L}$ αν πρόκειται για το σχεδιασμό αεροτομής. Ωστόσο, το πρόβλημα βελτιστοποίησης της μορφής μπορεί να διατυπωθεί και εναλλακτικά ως πρόβλημα μεγιστοποίησης της συνάρτησης - στόχου χωρίς καμία διαφοροποίηση στα όσα θα αναφερθούν παρακάτω.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, αναπτύσσονται μέθοδοι αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης μορφής μονοδιάστατου αγωγού με χρήση της συνεχούς και της διακριτής συζυγούς μεθόδου έχοντας ως στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης διαμέσου του αγωγού αυτού.

Με άλλα λόγια, ως συνάρτηση - στόχος επιλέγεται η

$$F(\vec{U}, \vec{b}) = \frac{1}{2} \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x))^2 dx \quad (1.1)$$

όπου η ολοκλήρωση γίνεται σε όλο το μήκος του $1 - D$ αγωγού και όπου, σε συγκεκριμένες συνθήκες ροής, προκύπτει κατανομή πίεσης $p(x)$ αντί της επιθυμητής $p_{tar}(x)$.

Η παραπάνω διατύπωση της συνάρτησης - στόχου οδηγεί, προφανώς, σε πρόβλημα ελαχιστοποίησης.

Διακριτοποιώντας την συνάρτηση - στόχου (1.1) λαμβάνεται ότι:

$$F(\vec{U}_i, \vec{b}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z (p(x)_i - p_{tar(x),i})^2 \Delta x_i \quad (1.2)$$

όπου z ο αριθμός των κόμβων, $\Delta x_i = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}$ για τους εσωτερικούς κόμβους, ενώ για τους οριακούς ισχύει $\Delta x_1 = \frac{x_2 - x_1}{2}$ και $\Delta x_z = \frac{x_z - x_{z-1}}{2}$. Τα σημεία διακριτοποίησης του $1 - D$ αγωγού θεωρούνται ισαπέχοντα.

Η συνάρτηση - στόχος, όπως φαίνεται και από την εξίσωση 1.1, εξαρτάται αφενός μεν από τη γεωμετρία του αγωγού και αφετέρου από το διαμορφούμενο σε αυτόν πεδίο ροής. Η διατομή του αγωγού, στην παρούσα διπλωματική εργασία, έχει παραμετροποιηθεί με πολυώνυμα (Bezier-Bernstein) και θα περιγράφεται πλήρως από τα σημεία ελέγχου της παραμετροποίησης αυτής. Οι μεταβλητές οι οποίες περιγράφουν την γεωμετρία του αγωγού ονομάζονται ελεύθερες μεταβλητές ή μεταβλητές σχεδιασμού (διάνυσμα \vec{b}) και συνδέονται με τα μεγέθη ροής (διάνυσμα \vec{U}) μέσω των εξισώσεων της ροής.

Σε επόμενα κεφάλαια, αρχικά παρουσιάζεται συνοπτικά ο τρόπος επίλυσης των εξισώσεων της ροής μέσα σε μια δεδομένη γεωμετρική μορφή ενός αγωγού, δηλαδή το ευθύ πρόβλημα και στη συνέχεια βελτιστοποιείται η μορφή αυτού αρχικά με χρήση της απότομης καθόδου και στη συνέχεια με εφαρμογή της μεθόδου Newton. Η χρήση των παραπάνω μεθόδων προϋποθέτει τη διαθεσιμότητα μεθόδων υπολογισμού της κλίσης της συνάρτησης στόχου, καθώς και του Hessian μητρώου [1,2,4]. Δηλαδή, απαιτείται υποστήριξη από μία μέθοδο ικανή να υπολογίζει πρώτες και δεύτερες παραγώγους ως προς τις μεταβλητές σχεδίασης, σε κάθε κύκλο της μεθόδου. Με τον τρόπο αυτό, θα προσδιοριστεί μία κατεύθυνση ανίχνευσης που να οδηγεί σε ταχεία βελτίωση της μορφής και ταυτόχρονη μείωση της τιμής της συνάρτησης στόχου.

Υπάρχουν πολλοί τρόποι υπολογισμού των παραγώγων, είτε για παράδειγμα με πεπερασμένες διαφορές είτε με τη θεωρία των μιγαδικών συναρτήσεων [14, 15]. Ωστόσο η ανάπτυξη νέων τεχνικών οι οποίες στηρίζονται στη θεωρία ελέγχου επιτρέπουν τον υπολογισμό των απαραίτητων παραγώγων με σημαντικά λιγότερο κόστος CPU, γιατί το κόστος υπολογισμού όλων των μερικών παραγώγων ως προς κάθε σημείο ελέγχου είναι πρακτικά ανεξάρτητο του αριθμού των σημείων ελέγχου. Οι τεχνικές αυτές είναι γνωστές με το όνομα συζυγείς (adjoint) ή δυαδικές (dyadic) μέθοδοι ως προς τις εξισώσεις της ροής (εξισώσεις του ευθέος προβλήματος).

Οι συζυγείς τεχνικές είναι δύο ειδών, η συνεχής συζυγής τεχνική (continuous adjoint method) και η διακριτή συζυγής τεχνική (discrete adjoint method) [3, 6, 7, 8]. Κατά τη χρήση της συνεχούς συζυγούς τεχνικής, οι συζυγείς εξισώσεις διαμορφώνονται από τις αντίστοιχες εξισώσεις της ροής σε διαφορική μορφή και έπειτα διακριτοποιούνται

προκειμένου να επιλυθούν αριθμητικά, ενώ ουσιαστικό είναι ότι η χωρο-χρονική διακριτοποίησή τους είναι ανεξάρτητη από αυτήν του ευθέος προβλήματος [9-13]. Από την άλλη πλευρά, χρησιμοποιείται η διακριτή συζυγής διατύπωση, με βάση την οποία διακριτοποιούνται οι εξισώσεις ροής και στη συνέχεια διαμορφώνεται απευθείας το συζυγές πρόβλημα σε διακριτοποιημένη μορφή. Με αυτόν τον τρόπο γίνεται ξεκάθαρο ότι στη διακριτή συζυγή τεχνική η βάση της όλης ανάπτυξης είναι οι διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής [3, 6, 7].

Ωστόσο, σκοπός είναι στην παρούσα εργασία, να γίνει και σύγκρισή των δύο μεθόδων ως προς την ακρίβεια αυτών στη τιμή των παραγώγων της συνάρτησης - στόχου. Χρήσιμο είναι παρόλα αυτά να αναφερθούν κάποιες βασικές διαφορές μεταξύ των μεθόδων.

Βασική διαφορά είναι ότι η διακριτή μέθοδος έχει πολλές αλγεβρικές πράξεις στο “ χέρι ” ενώ η συνεχής απαιτεί πολλές διαφορικές τελεστικές πράξεις. Επιπλέον στη συνεχή μέθοδο απαιτείται νέα μεθηματική διατύπωση και επαναπρογραμματισμός της μεθόδου κάθε φορά που αλλάζει η συνάρτηση στόχος. Επιπροσθέτως, το συνεχές συζυγές πρόβλημα δεν εξαρτάται από τη διακριτοποίηση του ευθέος προβλήματος. Από την άλλη πλευρά, το διακριτό συζυγές πρόβλημα αποτελεί ακριβές αποτέλεσμα της διακριτοποιημένης ροής, ενώ απαιτεί την αποθήκευση και διαχείριση πινάκων απαιτητικών σε μνήμη υπολογιστή.

1.2 Συμβολή της παρούσας εργασίας.

Για τις ανάγκες της διπλωματικής εργασίας προσαρμόστηκαν και επεκτάθηκαν κώδικες επίλυσης του ευθέος και του συζυγούς προβλήματος για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου σε μονοδιάστατο αγωγό, χρησιμοποιώντας προϋπάρχον λογισμικό για την παραμετροποίηση των γεωμετρικών μορφών και την επίλυση του ευθέος προβλήματος.

Πιο αναλυτικά, προυπήρχε [3]:

- Λογισμικό για παραμετροποίηση γεωμετρικών μορφών με χρήση πολυωνύμων Bezier-Bernstein.
- Επιλύτης για τις εξισώσεις ροής σε $1 - D$ αγωγό.
- Διακριτή συζυγή τεχνική για τον υπολογισμό της 1ης παραγώγου σε $1 - D$ αγωγό.

Στηριζόμενοι στο προϋπάρχον λογισμικό, επεκτείναμε τη διακριτή συζυγή μέθοδο ως εξής:

- Θεμελίωση και προγραμματισμός ευθείας διαφόρισης για τον υπολογισμό του $\frac{d\vec{U}}{db}$ (direct differentiation), με τη διακριτή μέθοδο, ως εναλλακτικού τρόπου εύρεσης της 1ης παραγώγου. Χρησιμοποιείται για λόγους σύγκρισης με τη συζυγή τεχνική καθώς και για υποστήριξη του υπολογισμού του Hessian μητρώου.
- Υπολογισμός του Hessian μητρώου. Διατύπωση σχετικής θεωρίας [1, 2, 4] και προγραμματισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου για τον υπολογισμό των δευτέρων παραγώγων για τον αντίστροφο σχεδιασμό $1 - D$ αγωγού.

Αντίστοιχα με τη διακριτή μέθοδο, παρουσιάστηκαν στη συνεχή συζυγή μέθοδο τα εξής:

- Διατύπωση σχετικής θεωρίας και προγραμματισμός της συνεχούς συζυγούς μεθόδου για τον υπολογισμό της 1ης και 2ης παραγώγου της ίδιας συνάρτησης στόχου.
- Διερεύνηση, σύγκριση και πιστοποίηση των προτεινόμενων μεθόδων και του λογισμικού που προγραμματίστηκε.

1.3 Η δομή της εργασίας.

Η παρούσα διπλωματική εργασία επικεντρώνεται στον υπολογισμό του μητρώου Hessian μιας συνάρτησης στόχου με χρήση διακριτής, αλλά και συνεχούς συζυγούς μεθόδου σε $1D$ αγωγό.

Η διάταξη της εργασίας αρχίζει με λεπτομερή ανάλυση της διακριτής συζυγούς μεθόδου (κεφάλαια 2, 3, 4, 5) και στη συνέχεια ολοκληρώνεται με αντίστοιχα κεφάλαια για τη συνεχή (6, 7):

- Στο Κεφάλαιο 2:
Παρουσιάζεται αναλυτικά η επίλυση του ευθέως προβλήματος σε μονοδιάστατο αγωγό, καθώς και η διακριτοποίηση που ακολουθήσαμε για πρώτη και δεύτερης τάξης ακρίβεια. Επιπλέον, περιγράφεται ο τρόπος επιβολής των οριακών συνθηκών που χρησιμοποιήθηκαν κατά την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής.
- Στο Κεφάλαιο 3:
Αφού υπολογίστηκε το ευθύ πρόβλημα, περιγράφεται αναλυτικά ο τρόπος εύρεσης της πρώτης παραγώγου με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης, καθώς και με τη χρήση της συζυγούς μεθόδου.
- Στο Κεφάλαιο 4:
Στη συνέχεια, έχοντας γνώση της πρώτης παραγώγου, ακολουθεί η περιγραφή του τρόπου υπολογισμού του Hessian μητρώου για την ίδια συνάρτηση στόχου.

- Στο Κεφάλαιο 5:
Παρουσιάζεται ο αντίστροφος σχεδιασμός με τη μέθοδο της απότομης καθόδου (steepest descent) και της μεθόδου Newton. Ακολουθούν εφαρμογές και πιστοποίηση της βελτιστοποίησης αποκλειστικά με τη διακριτή μέθοδο.
- Στο Κεφάλαιο 6:
Παρουσιάζεται αναλυτικά ο τρόπος υπολογισμού πρώτων και δεύτερων παραγώγων για συνεχή συζυγή μέθοδο.
- Στο Κεφάλαιο 7:
Ακολουθούν εφαρμογές και πιστοποίηση της βελτιστοποίησης με τη συνεχή συζυγή μέθοδο, καθώς και σύγκριση των αποτελεσμάτων με αυτά της διακριτής.
- Στο Κεφάλαιο 8:
Παρατίθενται τα συμπεράσματα που προέκυψαν από την παρούσα διπλωματική εργασία.

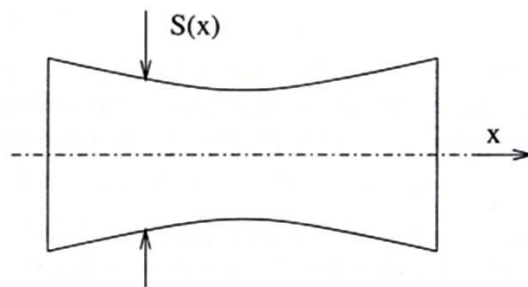
Στις εφαρμογές δίνεται ιδιαίτερη έμφαση στην ακρίβεια υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας, αφού αυτό είναι το ζητούμενο από τη συζυγή τεχνική. Συγχρόνως όμως, στις εφαρμογές αυτές συμπεριλαμβάνεται και βελτιστοποίηση μορφής (steepest descent, Newton) αφού εκεί αποσκοπεί η ανάπτυξη της μεθόδου και εκεί βρίσκει το μεγαλύτερο πεδίο εφαρμογής της.

Κεφάλαιο 2

Αριθμητική Επίλυση 1D Ροής σε Αγωγό.

2.1 Ευθύ 1D πρόβλημα.

Η ενότητα αυτή ασχολείται με τον υπολογισμό της 1D ροής μέσα σε αγωγό, όπου δηλαδή γίνεται η θεώρηση ότι η ροή μεταβάλλεται μόνο κατά την αξονική κατεύθυνση του αγωγού. Η ροή θεωρείται συμπιεστή, ενώ η όλη διατύπωση ως προς τον επιλύτη της ροής βασίζεται στη θεωρία των υπερβολικών συστημάτων, εισάγοντας τον ψευδοχρόνο για χρονικά μόνιμες ροές.



Σχήμα 2.1: Μονοδιάστατη ροή σε αγωγό.

Η παραμετροποίηση της κατανομής $S(x)$ εισάγει τις ελεύθερες μεταβλητές, οι οποίες εμπεριέχονται στο διάνυσμα \vec{b} , διάστασης N . Παρά τη φαινομενική απλότητα του, το 1D πρόβλημα που θα επιλυθεί έχει μια πολύ σημαντική διαφορά από τα 2D ή 3D προβλήματα. Η διαφορά είναι ότι σε ένα 1D πρόβλημα, οι εξισώσεις ροής και ο στόχος ορίζονται στον ίδιο χώρο (κατά το μήκος x του αγωγού). Δεν συμβαίνει το ίδιο κατά το σχεδιασμό μιας αεροτομής (2D πρόβλημα), όπου οι μεν εξισώσεις ροής ισχύουν στο χώρο που περιβάλλει την αεροτομή (2D χωρίο) ενώ ο δε στόχος - κατανομής πίεσης ορίζεται κατά μήκος του περιγράμματος της μόνο.

2.2 Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής.

Για το 1D πρόβλημα διατυπώνονται οι εξισώσεις ροής (Euler) σε συντηρητική διανυσματική μορφή, ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = \vec{q} \quad (2.1)$$

όπου $\vec{U} = [\rho, \rho u, \rho E]^T$ είναι το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών ροής, ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, u η ταχύτητα και E είναι η ολική ενέργεια του ρευστού ανά μονάδα μάζας. Η διανυσματική γραφή διευκολύνει τη διατύπωση των εξισώσεων διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας με ενιαία γραφή.

Το διάνυσμα της ατρίβους ροής \vec{f} και ο μη-ομογενής όρος \vec{q} των εξισώσεων, που οφείλεται στη μεταβολή της διατομής κατά την αξονική κατεύθυνση, δίνονται από τις σχέσεις

$$\vec{f} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \vec{q} = -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Τέλος, χρήσιμες βοηθητικές σχέσεις από τη θερμοδυναμική των τελείων αερίων, για χρήση κατά την περαιτέρω επεξεργασία της σχέσης (2.1) είναι οι

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (2.3)$$

$$E = h_t - \frac{p}{\rho} \quad (2.4)$$

$$\rho E = \frac{\rho c^2}{\gamma(\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (2.5)$$

$$p = (\gamma - 1)\rho e = (\gamma - 1) \left(\rho E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right) \quad (2.6)$$

και $e = c_v T$ είναι η εσωτερική ενέργεια ανά μονάδα μάζας του ρευστού, γ ο εκθέτης ισεντροπικής μεταβολής για το τέλειο αέριο, c_v είναι ο συντελεστής θερμοχωρητικότητας υπό σταθερό όγκο, θεωρούμενος σταθερός για τέλεια αέρια, T είναι η στατική θερμοκρασία, $c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$ είναι η ταχύτητα του ήχου και h_t η ολική ενθαλπία.

Οι εξισώσεις ροής (2.1) ξαναγράφονται ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} = \vec{q} \quad (2.7)$$

όπου A το Ιακωβιανό μητρώο των συντηρητικών μεταβλητών

$$A = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}u^2 & (3-\gamma)u & \gamma-1 \\ -\gamma u E + (\gamma-1)u^3 & \gamma E - \frac{\gamma-1}{2}3u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

με τρεις πραγματικές ιδιοτιμές τις $\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u + c$, $\lambda_3 = u - c$.

Ωστόσο, μας ενδιαφέρει η χρονικά μόνιμη ροή, επομένως απαλείφοντας από την εξίσωση (2.7) το χρονικό όρο και προχωρώντας, στη συνέχεια, σε χωρική διακριτοποίηση θα έχουμε:

$$\vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) = \left[A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right]_i \Delta x_i - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \quad , \forall i = 2, \dots, z-1 \quad (2.9)$$

όπου με z συμβολίζουμε τον αριθμό των κόμβων του πλέγματος, ενώ το σύμβολο \vec{R} παριστάνει το υπόλοιπο (residual) της εξίσωσης ροής. Οι διακριτές γραφές των οριακών συνθηκών στην είσοδο και την έξοδο θα γράφονται αντίστοιχα στη συμβολική γραφή:

$$\vec{R}_1 = 0 \quad , \vec{R}_z = 0 \quad (2.10)$$

Όπως είναι προφανές, για να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, πρέπει ο τελεστής ροής \vec{R} σε κάθε κόμβο να είναι ίσος με 0. Επομένως πρέπει να υπολογιστεί το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών \vec{U} για το οποίο μηδενίζεται το υπόλοιπο.

Η επίλυση του προβλήματος της ροής γίνεται μέσω δέλτα-διατύπωσης. Δηλαδή:

$$\left[I \frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right] \delta \vec{U} = -\vec{R} \quad (2.11)$$

όπου, ο χρονικός όρος - ψευδοχρόνος εισάγεται (παρόλο που η ροή θεωρείται χρονικά μόνιμη) ώστε να εκμεταλλευτούμε τις ιδιότητες των υπερβολικών συστημάτων και να εφαρμοστούν οι τεχνικές χρονοπροέλασης (time-marching) για την επίλυση του πεδίου ροής. Επιπλέον, στην εξίσωση (2.11) τα εμπλεκόμενα διανύσματα είναι:

$$\vec{R}^T = \left[\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{z-1}, \vec{R}_z \right]^T \quad (2.12)$$

$$\delta \vec{U}^T = \left[\delta \vec{U}_1, \delta \vec{U}_2, \dots, \delta \vec{U}_{z-1}, \delta \vec{U}_z \right]^T \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_z} \\ \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_z} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \vec{R}_{z-1}}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{z-1}}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{z-1}}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_{z-1}}{\partial \vec{U}_z} \\ \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_z} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

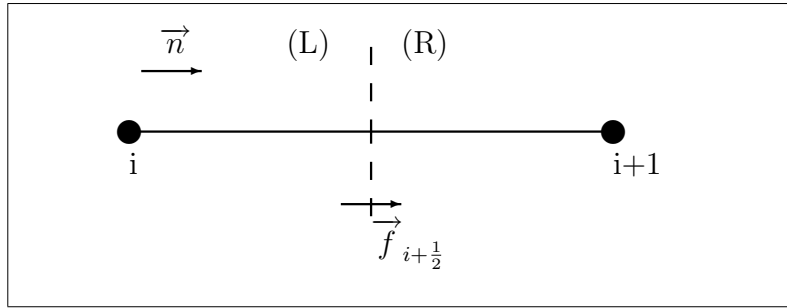
Κατά την επίλυση της διακριτοποιημένης εξίσωσης σε δ-διατύπωση το δεξί μέλος είναι αυτό που καθορίζει την ακρίβεια. Οπότε μας ενδιαφέρει η διακριτοποίηση του \vec{R} να γίνει με ακρίβεια 2ης τάξης, ώστε τα αποτελέσματά μας να είναι αποδεκτής ακρίβειας. Ωστόσο, το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ δεν είναι απαραίτητο να είναι το ακριβές αποτέλεσμα της παραγωγίσισης του δεξιού μέλους της δέλτα-διατύπωσης. Δηλαδή, θα μπορούσαν να επιλυθούν οι εξισώσεις ροής με ακρίβεια 2ης τάξης, ενώ το αριστερό μέλος να υπολογιζόταν με ακρίβεια πρώτης τάξης. Με τον τρόπο αυτό, η επίλυση πενταδιαγώνιου συστήματος ($\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ δεύτερης τάξης) μετασχηματίζεται σε επίλυση τριδιαγώνιου ($\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ πρώτης τάξης) εξοικονομώντας υπολογιστικό κόστος και μνήμη υπολογιστή, χωρίς βλάβη στην ακρίβεια του αποτελέσματος αφού αυτή κατά τα γνωστά καθορίζεται από το δεξιό μέλος της εξίσωσης. Μπορεί στο $1 - D$ πρόβλημα να μην φαίνεται η ουσιαστική αξία αυτού του τεχνάσματος (συνδυασμού τάξεων), ωστόσο είναι εμφανής στα $2 - D$ και $3 - D$ προβλήματα.

Στις παρακάτω ενότητες παρουσιάζεται η επίλυση της δ-διατύπωσης με ακρίβεια 1ης και 2ης τάξης.

2.3 Επίλυση δ-διατύπωσης με ακρίβεια πρώτης τάξης.

Στη περίπτωση που η διακριτοποίηση του τελεστή ροής γίνει με την μέθοδο διαχωρισμού των διανυσμάτων ροής (flux vector splitting, FVS) ακρίβειας πρώτης τάξης, για το διάνυσμα της ροής στους εσωτερικούς μεσόκομβους, θα έχουμε ότι

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^- \vec{U}_{i+1} + A_{i+\frac{1}{2}}^+ \vec{U}_i \quad (2.15)$$



Δηλαδή, θα έχουμε ότι :

$$\begin{aligned}\vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) &= (\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{i-\frac{1}{2}}) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \implies \\ \vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) &= (A_{i+\frac{1}{2}}^- \vec{U}_{i+1} + A_{i+\frac{1}{2}}^+ \vec{U}_i - A_{i-\frac{1}{2}}^- \vec{U}_i - A_{i-\frac{1}{2}}^+ \vec{U}_{i-1}) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \implies \\ \vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) &= A_{i+\frac{1}{2}}^- \vec{U}_{i+1} + (A_{i+\frac{1}{2}}^+ - A_{i-\frac{1}{2}}^-) \vec{U}_i - A_{i-\frac{1}{2}}^+ \vec{U}_{i-1} - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \quad (2.16)\end{aligned}$$

Αφού διακριτοποιήθηκε ο τελεστής ροής (\vec{R}) και λαμβάνοντας υπόψη την **υπόθεση** ότι ισχύει:

$$\frac{\partial A^+}{\partial \vec{U}} = 0, \quad \frac{\partial A^-}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (2.17)$$

έχουμε από την παραγωγή της έκφρασης (2.16):

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-1}} = -A_{i-\frac{1}{2}}^+, \quad \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_i} = (A_{i+\frac{1}{2}}^+ - A_{i-\frac{1}{2}}^-) - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i, \quad \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+1}} = A_{i+\frac{1}{2}}^- \quad (2.18)$$

και $\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0$, για $j < i - 1$ και $j > i + 1$.

Εδώ ο όρος $\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i}$, υπολογίζεται από παραγωγή της εξίσωσης (2.2). Με αυτόν τον τρόπο θα έχουμε:

$$\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} = -\frac{1}{S_i} \left[\frac{dS}{dx} \right]_i \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_i \quad (2.19)$$

ενώ για $i \neq j$ είναι $\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0$

Τέλος, αν οι οριακές συνθήκες $\vec{R}_1 = 0$ και $\vec{R}_z = 0$ είναι γραμμένες με πρώτης τάξης ακρίβεια και παραγωγιστούν, όπως θα αποδειχθεί και αναλυτικά στη συνέχεια, θα έχουμε:

$$\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_j} = 0, \forall j = 3, \dots, z \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_j} = 0, \forall j = 1, \dots, z-2 \quad (2.21)$$

Επομένως, με βάση τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω το συνολικό μητρώο (2.14) για ακρίβεια πρώτης τάξης είναι ένα τριδιαγώνιο μπλόκ μητρώο με μορφή:

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_4} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_{z-1}} & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_z} \end{bmatrix}$$

Ωστόσο, κρίνεται απαραίτητο για θέμα πληρότητας να παρουσιαστεί και ο τρόπος εύρεσης των πινάκων A^+ και A^- . Πιο αναλυτικά, για τον πίνακα A ισχύει ότι:

$$A = P\Lambda P^{-1} \quad (2.22)$$

όπου Λ είναι διαγώνιο μητρώο με στοιχεία τις ιδιοτιμές του Ιακωβιανού μητρώου A . Δηλαδή:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

ενώ ταυτόχρονα το $P=ML$ και το $P^{-1}=L^{-1}M^{-1}$, όπου M και L γνωστοί πίνακες οι οποίοι παρουσιάζονται παρακάτω:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 \\ \frac{1}{2}u^2 & \rho u & \frac{1}{\gamma-1} \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & \frac{\rho}{2c} & -\frac{\rho}{2c} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \rho \frac{c}{2} & -\rho \frac{c}{2} \end{bmatrix}$$

Σε υποηχητική ροή, δηλαδή ροή όπου ισχύει για τον αριθμό *Mach* $M = \frac{u}{c} < 1$, κατευθυνόμενη κατά τα θετικά του άξονα x και σε κάθε θέση x του αγωγού, οι τρεις ιδιοτιμές έχουν γνωστό πρόσημο. Οι δύο από αυτές είναι θετικές ($\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u + c$) και η τρίτη ($\lambda_3 = u - c$) αρνητική αφού $u < c$. Αντίστοιχα, σε περίπτωση όπου η ροή είναι υπερηχητική υπάρχουν τρεις θετικές ιδιοτιμές. Ωστόσο, η παρούσα διπλωματική εργασία, αναφέρεται αποκλειστικά σε υποηχητικές ροές, χωρίς αυτό να βλάπτει την γενικότητα της μεθόδου.

Επομένως, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν, η σχέση 2.22, θα γίνει:

$$A^+ = P\Lambda^+P^{-1} \quad (2.24)$$

$$A^- = P\Lambda^-P^{-1} \quad (2.25)$$

όπου Λ^+ και Λ^- μητρώα με τις θετικές και αρνητικές ιδιοτιμές αντίστοιχα. Πιο αναλυτικά, τα μητρώα Λ^+ και Λ^- είναι:

$$\Lambda^+ = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Lambda^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{bmatrix}$$

Ωστόσο, απαιτείται, όπως έγινε σαφές από την παραπάνω παρουσίαση σχέσεων, η γνώση των αντίστροφων του M και του L . Έτσι, παρουσιάζεται με συντομία ο τρόπος εύρεσης των αντίστροφων αυτών. Για τον πίνακα M , ο αντίστροφός του θα υπολογίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$M^{-1} = \frac{adjM}{detM} \quad (2.26)$$

όπου $adjM$ ο συμπληρωματικός του M και $detM$ η ορίζουσά του. Με τον ίδιο τρόπο θα υπολογιστεί ο αντίστροφος του L . Επομένως, θα είναι γνωστά όλα τα δεδομένα που χρειάζονται για τον υπολογισμό του P και του P^{-1} .

Με βάση τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, μετά από πράξεις, έχουμε τους εξής πίνακες για τους P και P^{-1} .

$$P = \begin{bmatrix} 1 & \frac{\rho}{2c} & -\frac{\rho}{2c} \\ u & \frac{\rho}{2} \left[\frac{u+c}{c} \right] & -\frac{\rho}{2} \left[\frac{u-c}{c} \right] \\ \frac{1}{2}u^2 & \frac{\rho}{2c} \left[\frac{u^2}{2} + uc + \frac{c^2}{\gamma-1} \right] & -\frac{\rho}{2c} \left[\frac{u^2}{2} - uc + \frac{c^2}{\gamma-1} \right] \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \left[1 - \frac{u^2(\gamma-1)}{2c^2} \right] & \frac{u(\gamma-1)}{c^2} & -\frac{\gamma-1}{c^2} \\ \left[\frac{\frac{1}{2}u^2(\gamma-1)}{\rho c} - \frac{uc}{\rho c} \right] & \left[\frac{c}{\rho c} - \frac{u(\gamma-1)}{\rho c} \right] & \frac{\gamma-1}{\rho c} \\ -\left[\frac{\frac{1}{2}u^2(\gamma-1)}{\rho c} + \frac{uc}{\rho c} \right] & \left[\frac{c}{\rho c} + \frac{u(\gamma-1)}{\rho c} \right] & -\frac{\gamma-1}{\rho c} \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

Έχοντας πια γνωστούς τους παραπάνω πίνακες P και P^{-1} , μπορούν να υπολογιστούν οι πίνακες A^+ και A^- με βάση τις σχέσεις 2.24 και 2.25 για οποιοδήποτε κόμβο ή μεσόκομβο του $1-D$ πλέγματος.

2.4 Οριακές συνθήκες.

Σκοπός της παρούσας ενότητας, είναι η περιγραφή του τρόπου επιβολής των οριακών συνθηκών στο πρόβλημα της ροής. Επομένως στην περίπτωση της υποηχητικής ροής, οι οριακές συνθήκες έχουν αρχικά για την είσοδο:

$$p_{t1} = \text{const}_1 \quad (2.29)$$

$$T_{t1} = \text{const}_2 \quad (2.30)$$

$$p_1 = p_2 \quad (2.31)$$

ενώ για την έξοδο:

$$p_z = \text{const}_3 \quad (2.32)$$

$$\rho_z = \rho_{z-1} \quad (2.33)$$

$$(\rho u)_z = (\rho u)_{z-1} \quad (2.34)$$

Όπως είναι εμφανές από τις παραπάνω εξισώσεις, στην είσοδο καθορίζονται από τον χρήστη σταθερές τιμές στα ολικά θερμοδυναμικά μεγέθη της ροής (p_t, T_t), ενώ στην έξοδο επιβάλλεται σταθερή τιμή της στατικής πίεσης. Επιπλέον, επειδή η μορφολογία του αγωγού που αντιμετωπίζεται, στο πλαίσιο της διπλωματικής αυτής, διαθέτει σταθερής διατομής S τμήματα στην είσοδο και την έξοδο και επειδή επιβάλλονται οριακές συνθήκες πρώτης τάξης ακρίβεια, η στατική πίεση του πρώτου κόμβου ισούται με αυτήν του επόμενου, ενώ στην έξοδο η πυκνότητα και η ταχύτητα εξισώνονται μεταξύ του προτελευταίου και του τελευταίου κόμβου (συνθήκες τύπου Neumann). Πιο αναλυτικά, για την είσοδο ισχύει $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$, ενώ για την έξοδο $\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0$. Το ότι χρησιμοποιούνται οριακές συνθήκες πρώτης τάξης δεν βλάπτει την ακρίβεια όσο υπάρχουν τμήματα σταθερής διατομής στην είσοδο και την έξοδο.

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν συνοπτικά να γραφούν μέσω του τελεστή ροής. Πιο συγκεκριμένα για τον πρώτο κόμβο θα έχουμε $\vec{R}_1 = [p_{t1} - \text{const}_1, T_{t1} - \text{const}_2, p_1 - p_2]$ ενώ για τον τελευταίο κόμβο θα έχουμε $\vec{R}_z = [p_z - \text{const}_3, \rho_z - \rho_{z-1}, (\rho u)_z - (\rho u)_{z-1}]$.

Στη συνέχεια, διαφορίζονται οι παραπάνω εξισώσεις, έτσι ώστε να υπολογιστούν οι όροι, $\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \bar{U}_j}$ και $\frac{\partial \vec{R}_k}{\partial \bar{U}_j}$ $j = 1, \dots, z$.

Πιο αναλυτικά, χρησιμοποιώντας την μεταβολή (variation) της δέλτα-διατύπωσης, έχουμε για τον πρώτο και τον τελευταίο κόμβο τις εξής εξισώσεις, που προκύπτουν ύστερα από πράξεις πινάκων:

$$\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_{z-1}} \delta \vec{U}_{z-1} + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_z} \delta \vec{U}_z = -\vec{R}_1 \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_{z-1}} \delta \vec{U}_{z-1} + \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_z} \delta \vec{U}_z = -\vec{R}_z \quad (2.36)$$

Ωστόσο, κατά τον υπολογισμό των μερικών παραγώγων ισχύει η (2.20) εξίσωση. Δηλαδή, μας ενδιαφέρει να υπολογιστούν μόνο οι όροι $\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_j}$ για $j = 1, 2$ και $\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_j}$ για $j = z - 1, z$ ενώ οι μερικές παράγωγοι ως προς τα υπόλοιπα διανύσματα της ροής είναι μηδενικές.

Κατά τον υπολογισμό των παραπάνω μερικών παραγώγων, χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς, η σχέση $p = (\gamma - 1) [\rho E - \frac{1}{2} \rho u^2]$. Πιο αναλυτικά, υπενθυμίζεται ότι για την είσοδο το υπόλοιπο γράφεται $\vec{R}_1 = [p_{t1} - const_1, T_{t1} - const_2, p_1 - p_2] = [R_1^1, R_1^2, R_1^3]$, επομένως κατά τη διαφορίση θα έχουμε τις παρακάτω οριακές συνθήκες:

$$\frac{\partial R_1^1}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 = -R_1^1 \longrightarrow \left[-\frac{1}{2} u_1^2 + \frac{c_1^2}{\gamma - 1}, u_1, -1 \right] \delta \vec{U}_1 = 0 \quad (2.37)$$

προφανώς ισχύει ότι : $\frac{\partial R_1^1}{\partial \vec{U}_2} = [0, 0, 0]_2$

$$\frac{\partial R_1^2}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 = -R_1^2 \longrightarrow \left[\frac{u_1^2 - c_1^2}{u_1}, -1, 0 \right] \delta \vec{U}_1 = 0 \quad (2.38)$$

όπου προφανώς ισχύει ότι : $\frac{\partial R_1^2}{\partial \vec{U}_2} = [0, 0, 0]_2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_1^3}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial R_1^3}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 = -R_1^3 \longrightarrow \\ \left[\frac{1}{2} u_1^2, -u_1, 1 \right] \delta \vec{U}_1 - \left[\frac{1}{2} u_2^2, -u_2, 1 \right] \delta \vec{U}_2 = p_2 - p_1 \end{aligned} \quad (2.39)$$

Ανάλογη είναι και η διαδικασία που ακολουθείται για τις οριακές συνθήκες στην έξοδο του αγωγού. Υπενθυμίζεται ότι όσον αφορά τον τελεστή ροής του τελευταίου κόμβου έχουμε $\vec{R}_z = [p_z - const_3, \rho_z - \rho_{z-1}, (\rho u)_z - (\rho u)_{z-1}] = [R_z^1, R_z^2, R_z^3]$. Επομένως:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_z^1}{\partial \vec{U}_{z-1}} \delta \vec{U}_{z-1} + \frac{\partial R_z^1}{\partial \vec{U}_z} \delta \vec{U}_z &= -R_z^1 \longrightarrow \\ [0, 0, 0]_{z-1} \delta \vec{U}_{z-1} + [\frac{1}{2}u^2, -u, 1]_z \delta \vec{U}_z &= 0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_z^2}{\partial \vec{U}_{z-1}} \delta \vec{U}_{z-1} + \frac{\partial R_z^2}{\partial \vec{U}_z} \delta \vec{U}_z &= -R_z^2 \longrightarrow \\ [-1, 0, 0]_{z-1} \delta \vec{U}_{z-1} + [1, 0, 0]_z \delta \vec{U}_z &= -\rho_z + \rho_{z-1} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_z^3}{\partial \vec{U}_{z-1}} \delta \vec{U}_{z-1} + \frac{\partial R_z^3}{\partial \vec{U}_z} \delta \vec{U}_z &= -R_z^3 \longrightarrow \\ [0, -1, 0]_{z-1} \delta \vec{U}_{z-1} + [0, 1, 0]_z \delta \vec{U}_z &= -\rho u_z + \rho u_{z-1} \end{aligned} \quad (2.42)$$

2.5 Διακριτοποίηση εξισώσεων ροής στο εσωτερικό.

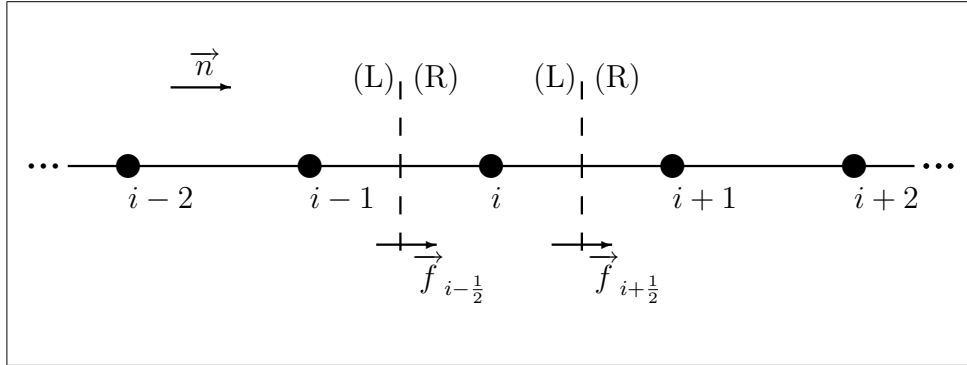
Προηγουμένως παρουσιάστηκε ο τρόπος εύρεσης του μητρώου $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ για ακρίβεια πρώτης τάξης στους οριακούς κόμβους. Στην παρούσα ενότητα, θα παρουσιαστεί αναλυτικά η διακριτοποίηση του ευθέως προβλήματος για δεύτερης τάξης ακρίβεια στους εσωτερικούς κόμβους. Αρχικά χρησιμοποιείται FVS με σχήμα προεκβολής MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws) για τη διακριτοποίηση του τελεστή ροής \vec{R} , χωρίς όμως να εφαρμοστεί συνάρτηση περιορισμού [5]. Στη συνέχεια, επιτυγχάνεται το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ για ακρίβεια δεύτερης τάξης ως αποτέλεσμα της παραγωγίσιμης του δεξιού μέλους της εξίσωσης (2.11).

Για ακρίβεια δεύτερης τάξης σε οποιοδήποτε εσωτερικό κόμβο i , ισχύει η σχέση:

$$\vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) = \left(\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0$$

Δηλαδή, ισχύει ακριβώς ο ίδιος τύπος με αυτόν για πρώτης τάξης ακρίβεια. Το μόνο που αλλάζει είναι το πώς υπολογίζονται τα $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}$, $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$ για ακρίβεια δεύτερης τάξης.

Πιο αναλυτικά, σύμφωνα με το παρακάτω σχήμα, ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:



οι οποίες είναι :

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = \vec{f}^- \left(\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R \right) + \vec{f}^+ \left(\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L \right) \quad (2.43)$$

$$\vec{f}_{i-\frac{1}{2}} = \vec{f}^- \left(\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R \right) + \vec{f}^+ \left(\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L \right) \quad (2.44)$$

όπου τα $\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R$ και $\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L$, αντιστοιχούν στις αριστερά (L=Left) και δεξιά (R=Right) καταστάσεις της διαχωριστικής γραμμής στο μεσόκομβο του σχήματος, και υπολογίζονται με ανάπτυγμα Taylor, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L = \vec{U}_i + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i (x_{i+1} - x_i) \quad (2.45)$$

όπου εφαρμόζοντας 2ης τάξης κεντρικές διαφορές και για ισαπέχοντα Δx είναι:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i = \frac{\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (2.46)$$

Με την ίδια λογική το $\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R$ υπολογίζεται ως εξής:

$$\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R = \vec{U}_{i+1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i+1} (x_{i+1} - x_i) \quad (2.47)$$

όπου εφαρμόζοντας 2ης τάξης κεντρικές διαφορές θα έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i+1} = \frac{\vec{U}_{i+2} - \vec{U}_i}{x_{i+2} - x_i} \quad (2.48)$$

Αντίστοιχα για τα $\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R$ και $\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L$ ισχύουν τα εξής:

$$\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R = \vec{U}_i - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i (x_i - x_{i-1}) \quad (2.49)$$

όπου το $\frac{\partial \vec{U}}{\partial x}$ υπολογίζεται από τη σχέση (2.46), ενώ

$$\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L = \vec{U}_{i-1} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i-1} (x_i - x_{i-1}) \quad (2.50)$$

όπου εφαρμόζοντας 2ης τάξης κεντρικές διαφορές θα έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i-1} = \frac{\vec{U}_i - \vec{U}_{i-2}}{x_i - x_{i-2}} \quad (2.51)$$

Σύμφωνα με τα όσα αναφέραμε παραπάνω η σχέση (2.43) τροποποιείται ως εξής:

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = \vec{f}^- \left[\vec{U}_{i+1} - \frac{1}{2} \frac{\vec{U}_{i+2} - \vec{U}_i}{x_{i+2} - x_i} (x_{i+1} - x_i) \right] + \vec{f}^+ \left[\vec{U}_i + \frac{1}{2} \frac{\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} (x_{i+1} - x_i) \right]$$

και καταλήγει ύστερα από πράξεις στην παρακάτω εξίσωση:

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i+\frac{1}{2}} &= \left(-\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \vec{U}_{i-1} + \left(\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} + A_{i+\frac{1}{2}}^+ \right) \vec{U}_i \\ &+ \left(\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i+\frac{1}{2}}^- \right) \vec{U}_{i+1} + \left(-\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} \right) \vec{U}_{i+2} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Με τον ίδιο τρόπο, η εξίσωση (2.44) τροποποιείται στην $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i-\frac{1}{2}} &= \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \right) \vec{U}_{i-2} + \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) \vec{U}_{i-1} \\ &+ \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} + A_{i-\frac{1}{2}}^- \right) \vec{U}_i + \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \vec{U}_{i+1} \end{aligned} \quad (2.53)$$

Στη παρούσα διπλωματική έχουν επιλεγεί τα Δx να είναι ισαπέχοντα. Ωστόσο, οι τύποι γράφτηκαν στη παραπάνω μορφή για χάρη της γενικότητας (2.52, 2.53).

Επομένως, αν στη σχέση $\vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) = (\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{i-\frac{1}{2}}) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0$ αντικατασταθούν τα $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}$ και $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$ με τις σχέσεις (2.52) και (2.53) αντίστοιχα, προκύπτει μια σχέση της παρακάτω μορφής που θα ισχύει για $i = 3, \dots, z - 2$:

$$\vec{R}_i(\vec{U}_i, \vec{b}) = \left[b b e f_i \vec{U}_{i-2} + b e f_i \vec{U}_{i-1} + \text{diag}_i \vec{U}_i + a f t_i \vec{U}_{i+1} + a a f t_i \vec{U}_{i+2} \right] - \vec{q}_i \Delta x_i = 0$$

όπου οι συντελεστές κωδικοποιούνται με τα ευκολομνημόνευτα ονόματα *diag* (διαγώνιος), *aft*, *aaft* (επόμενοι δύο) και *bef*, *bbe f* (προηγούμενοι δύο κόμβοι).

Ωστόσο, όπως αναφέραμε και στην πρώτης τάξης ακρίβεια, σκοπός είναι ο υπολογισμός του μητρώου $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$, έκφραση (2.14). Άρα, σύμφωνα με τη παραπάνω σχέση, δίνεται η τιμή των παραγώγων για εσωτερικούς κόμβους $i = 3, \dots, z - 2$:

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-2}} = b b e f_i = \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-1}} = b e f_i = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} - A_{i-\frac{1}{2}}^+ \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_i} = \text{diag}_i - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \longrightarrow$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_i} = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} + A_{i+\frac{1}{2}}^+ - \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} - A_{i-\frac{1}{2}}^- - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+1}} = \text{aft}_i = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i+\frac{1}{2}}^- + \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+2}} = \text{aaf}_i = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} \quad (2.58)$$

ενώ ισχύει:

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j \neq i-2, i-1, i, i+1, i+2 \quad (2.59)$$

Όπου εδώ, με $A_{i+\frac{1}{2}}^{+/-}$ συμβολίζεται το μητρώο $A^{+/-}$ το οποίο υπολογίζεται με βάση το μέσο διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών στη θέση $i + \frac{1}{2}$, δηλαδή το:

$$\vec{U}_{mid} = \frac{\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R + \vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L}{2} \quad (2.60)$$

ενώ αντίστοιχα, με $A_{i-\frac{1}{2}}^{+/-}$ συμβολίζεται το μητρώο $A^{+/-}$ το οποίο υπολογίζεται με βάση το μέσο διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών στη θέση $i - \frac{1}{2}$, δηλαδή το:

$$\vec{U}_{mid} = \frac{\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R + \vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L}{2} \quad (2.61)$$

Οι σχέσεις που αναγράφτηκαν παραπάνω, αναφέρονται στους εσωτερικούς κόμβους $i = 3, \dots, z-2$. Για τους κόμβους $i = 1$ και $i = z$ ισχύουν οι σχέσεις που αναγράφονται στην ενότητα επιβολής οριακών συνθηκών για πρώτης τάξης ακρίβεια. Επομένως,

απομένει η καταγραφή των σχέσεων για τους εσωτερικούς κόμβους $i = 2$ και $i = z - 1$.

Για τον κόμβο $i = 2$ δεν είναι δυνατόν να υπάρχει παρουσία προ-προηγούμενου κόμβου, για αυτό θα έχουμε τελεστή ροής της μορφής:

$$\vec{R}_2(\vec{U}_2, \vec{b}) = \left[bef_2 \vec{U}_1 + diag_2 \vec{U}_2 + a ft_2 \vec{U}_3 + aa ft_2 \vec{U}_4 \right] - \vec{q}_2 \Delta x_2 = 0 \quad (2.62)$$

Ουσιαστικά, η παραπάνω αλλαγή στο τελεστή ροής, προέρχεται από αλλαγή στο διάνυσμα της ατρισούς ροής $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$. Πιο αναλυτικά, όπως έχει ήδη αναφερθεί για την εύρεση του τελεστή ροής κρίνεται απαραίτητη η χρήση των σχέσεων $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}$ και $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$. Ωστόσο, για τον κόμβο $i = 2$ είναι αδύνατη η ύπαρξη του όρου \vec{U}_{i-2} , οπότε για να αποφευχθεί η παρουσία του παραπάνω όρου, θα χρησιμοποιήσουμε αντί για κεντρικές διαφορές 2ης τάξης, το σχήμα πρόσω διαφορίσης πρώτης τάξης, όσον αφορά τον υπολογισμό της κλίσης $(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x})_{i-1}$. Υπενθυμίζεται ότι ο αγωγός έχει σταθερή διατομή, άρα η υπόθεση είναι ουσιαστικά αβλαβής. Επομένως, αντί της σχέσης (2.51) θα έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_1 = \frac{\vec{U}_2 - \vec{U}_1}{x_2 - x_1} \quad (2.63)$$

Ακριβώς με την ίδια λογική, όσον αφορά τον κόμβο $i = z - 1$, λόγω απουσίας μεθεπόμενου κόμβου, χρησιμοποιείται αντί της σχέσης (2.48), σχήμα πίσω διαφορίσης πρώτης τάξης, για τον υπολογισμό της κλίσης $(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x})_{i+1}$. Δηλαδή, εφαρμόζεται η εξής σχέση:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_z = \frac{\vec{U}_z - \vec{U}_{z-1}}{x_z - x_{z-1}} \quad (2.64)$$

ενώ ο τελεστής ροής θα είναι της μορφής:

$$\vec{R}_{z-1} = \left[bbef_{z-1} \vec{U}_{z-3} + bef_{z-1} \vec{U}_{z-2} + diag_{z-1} \vec{U}_{z-1} + a ft_{z-1} \vec{U}_z \right] - \vec{q}_{z-1} \Delta x_{z-1} = 0 \quad (2.65)$$

Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, γίνεται σαφές πως προκύπτουν οι τελεστές ροής (2.62) και (2.65) για τον κόμβο $i = 2$ και $i = z - 1$ αντίστοιχα. Επομένως, παρουσιάζονται στη συνέχεια οι παράγωγοι των εξισώσεων ροής για τους προαναφερμένους κόμβους:

Κόμβος $i = 2$:

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} = -\frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} - \left[\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^- \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} + \frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right] \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} = \frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^- \frac{x_3 - x_2}{x_4 - x_2} + A_{2+\frac{1}{2}}^+ - \left[\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^+ + A_{2-\frac{1}{2}}^- \right] - \frac{\partial \vec{q}_2}{\partial \vec{U}_2} \Delta x_2 \quad (2.67)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} = \frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} + A_{2+\frac{1}{2}}^- - \left[-\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^- \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} \right] \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_4} = -\frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^- \frac{x_3 - x_2}{x_4 - x_2} \quad (2.69)$$

και :

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j > 4 \quad (2.70)$$

Κόμβο $i = z - 1$:

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-2}} = \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-1}} = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \left[\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_i} = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- + A_{i+\frac{1}{2}}^+ - \left[\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^+ \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} + A_{i-\frac{1}{2}}^- \right] - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+1}} = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^+ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^- \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \quad (2.74)$$

και :

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j < z - 3 \quad (2.75)$$

Συμπερασματικά, το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι μλοκ πενταδιαγώνιο, με μηδενικό τον τρίτο υποπίνακα της πρώτης γραμμής και το $z - 2$ υπομητρώο της z γραμμής (λόγω επιβολής οριακών συνθηκών πρώτης τάξης ακριβείας). Το μητρώο με τα μη μηδενικά και τα μηδενικά του στοιχεία έχει ως εξής :

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_4} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_4} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_5} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_4} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_5} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_6} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_{z-1}} & \frac{\partial \vec{R}_z}{\partial \vec{U}_z} \end{bmatrix}$$

2.6 Επιλύτης ευθέος προβλήματος.

Όπως ήδη τονίστηκε παραπάνω, σκοπός του ευθέος προβλήματος είναι η επίλυση της εξίσωσης (2.11) με την τεχνική της χρονοπροέλασης. Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν, ο τελεστής ροής \vec{R} διακριτοποιείται, ουσιαστικά, με 2ης τάξης ακρίβεια, ενώ το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ που χρησιμοποιείται στο αριστερό μέλος της εξίσωσης, μπορεί να είναι υπολογισμένο με πρώτης ή δεύτερης τάξης ακρίβεια.

Σε περίπτωση που υπολογιστεί με 1ης τάξης ακρίβεια, το μητρώο είναι τριδιαγώνιας μορφής, επομένως στόχος είναι η επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων τριδιαγώνιας μορφής (3-διαγώνιος αλγόριθμος Thomas με μπρος και πίσω αντικατάσταση). Ωστόσο, κάθε στοιχείο του μητρώου αντιστοιχεί σε ένα 3×3 υπομητρώο (μπλοκ). Επομένως, η επίλυση του μπλοκ-τριδιαγώνιου συστήματος γίνεται χρησιμοποιώντας τον τροποποιημένο αλγόριθμο Thomas, ο οποίος μπορεί να διαχειρίζεται αντί για βαθμωτά μεγέθη υποπίνακες 3×3 . Αυτό επιτυγχάνεται με διάσπαση σε πάνω και κάτω τριδιαγώνια μητρώα (παραγοντοποίηση LU).

Από την άλλη πλευρά, σε περίπτωση που το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας τότε είναι πενταδιαγώνιας μορφής, επομένως στόχος είναι η επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων πενταδιαγώνιας μορφής με μπρος και πίσω αντικατάσταση. Ωστόσο, κάθε στοιχείο του μητρώου αντιστοιχεί σε ένα 3×3 υπομητρώο (μπλοκ). Επομένως, για την επίλυση των διακριτοποιημένων ροϊκών εξισώσεων, σε κάθε χρονικό βήμα, χρησιμοποιούμε επιλύτη μπλοκ-πενταδιαγώνιων συστημάτων.

Άρα δημιουργείται ένας επαναληπτικός αλγόριθμος με επαναλήψεις ή ορθότερα ψευδο-χρονικά βήματα, όπου για κάθε ψευδοχρονική στιγμή οι διακριτοποιημένες εξισώσεις επιλύονται επακριβώς (με μέθοδο παραγοντοποίησης ή με Thomas). Η exact επίλυση αποτελεί πλεονέκτημα του $1 - D$ προβλήματος.

Κεφάλαιο 3

Εύρεση Πρώτης Παραγώγου με Διακριτή Συζυγή Μέθοδο.

3.1 Εισαγωγικά σχόλια.

Στη παρούσα διπλωματική εργασία, παρουσιάζονται αποκλειστικά προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού μονοδιάστατου αγωγού, στηριζόμενοι σε αιτιοκρατικές μεθόδους. Μια αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης χρησιμοποιεί τη γενικευμένη έννοια της παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, τιμές της οποίας καλείται να υπολογίσει ακριβώς ή να προσεγγίσει. Μια από τις σημαντικότερες μεθόδους υπολογισμού της πρώτης παραγώγου αποτελεί η διακριτή συζυγής μέθοδος. Ωστόσο, στο συγκεκριμένο κεφάλαιο, θα αναπτυχθούν αναλυτικά και άλλες μέθοδοι υπολογισμού της πρώτης παραγώγου με σκοπό την μετέπειτα σύγκριση αυτών με τη διακριτή συζυγή μέθοδο. Πιο αναλυτικά, θα παρουσιαστεί πέρα από τη διακριτή συζυγή μέθοδο, η μέθοδος εύρεσης πρώτης παραγώγου με ευθεία διαφόριση, καθώς και με πεπερασμένες διαφορές. Τέλος, θα αναπτύχθει μία από χαρακτηριστικότερες μεθόδους βελτιστοποίησης που στηρίζονται στην χρήση της πρώτης παραγώγου, την μέθοδο της απότομης καθόδου (steepest descent).

3.2 Υπολογισμός 1ης παραγώγου με ευθεία διαφόριση.

Όπως είναι γνωστό από το πρώτο κεφάλαιο, η F εξαρτάται από δύο διανύσματα μεταβλητών, αφενός μεν από αυτό που καθορίζει τη μορφή της αεροτομής (\vec{b}), αφετέρου δε από το διαμορφούμενο πεδίο ροής (\vec{U}). Άρα η μεταβολή αυτής (σχέση 1.1) θα υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} d\vec{b} + \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} d\vec{U}$$

3-2ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΥΡΕΣΗ ΠΡΩΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Άρα η πρώτη παράγωγος προκύπτει από τη σχέση:

$$\frac{dF}{d\vec{b}} = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \quad (3.1)$$

όπου η μερική παράγωγος της F ως προς \vec{U} και \vec{b} υπολογίζονται σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις :

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = \frac{1}{2} \int (p(x) - ptar(x))^2 \frac{\partial(dx)}{\partial \vec{b}} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} = \int (p(x) - ptar(x)) \frac{\partial p}{\partial \vec{U}} dx \longrightarrow$$

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}_i} = [p(x) - ptar(x)]_i \frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \quad (3.3)$$

όπου το $\frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i}$ σύμφωνα με τη σχέση (2.5) θα ισούται με:

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i} = (\gamma - 1) \left[\frac{1}{2} u_i^2 \quad -u_i \quad 1 \right] \quad (3.4)$$

Ωστόσο, εδώ $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = 0$ (σχέση 3.2), διότι στο $1 - D$ πρόβλημα με σταθερούς κόμβους ισχύει ότι $\delta(dx) = 0$.

Επομένως, για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης (direct differentiation), απαιτείται ο υπολογισμός της παραγώγου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, που είναι ένα μητρώο $z \times N$.

Ωστόσο, όπως είναι γνωστό, ο τελεστής ροής \vec{R} εξαρτάται από τα δύο ίδια διανύσματα μεταβλητών, οπότε θα ισχύει σύμφωνα με τη θεωρία των συναρτήσεων πολλών μεταβλητών ότι:

$$\frac{d\vec{R}}{d\vec{b}} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = 0 \quad (3.5)$$

Η σχέση (3.5) προκύπτει σύμφωνα με το συλλογισμό ότι προφανώς ισχύουν οι εξισώσεις ροής για το αρχικό σχήμα του αγωγού, άρα $\vec{R} = 0$. Ωστόσο, μετά τη μεταβολή της γεωμετρίας κατά $d\vec{b}$ η ικανοποίηση των εξισώσεων ροής δίνει: $\vec{R} + \frac{d\vec{R}}{d\vec{b}}d\vec{b} = 0$. Όμως αφού $\vec{R} = 0$ πρέπει και $\frac{d\vec{R}}{d\vec{b}} = 0$.

Επομένως, για τον υπολογισμό του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, χρησιμοποιείται η σχέση:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

όπου ο όρος $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι υπολογισμένος από το κεφάλαιο 2. Επομένως αρκεί να υπολογιστεί ο όρος $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί για τον τελεστή ροής \vec{R} ισχύει η σχέση (2.9). Επιπλέον, είναι γνωστό ότι η τιμή του διανύσματος του τελεστή ροής σε κάθε κόμβο του πλέγματος που χρησιμοποιείται για τη χωρική διακριτοποίηση εξαρτάται από την εκάστοτε θέση του κόμβου για το συγκεκριμένο σύνολο τιμών \vec{b} . Δηλαδή, ισχύει η σχέση:

$$\vec{R}(\vec{U}, \vec{b}) = \vec{R}(\vec{U}(x, S), \vec{b}) = \vec{R}(\vec{U}[x(\vec{b}), S(\vec{b})], \vec{b}) \quad (3.7)$$

Άρα, σύμφωνα με τα παραπάνω, εφαρμόζοντας τη σύμβασή του Einstein θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \end{bmatrix} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_i} \frac{dx_i}{d\vec{b}} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x} \frac{dx}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial S} \frac{dS}{d\vec{b}} \quad (3.8)$$

όπου $x_1 = x$ και $x_2 = S$.

Ωστόσο, όπως ήδη έχει αναφερθεί, στο 1-D πρόβλημα η στοιχειώδης μεταβολή στα σημεία ελέγχου \vec{b} μεταβάλλει την $S(x)$, άλλα όχι τη διακριτοποίηση του προβλήματος. Επομένως, θα ισχύει: $\frac{dx}{d\vec{b}} = 0$. Άρα:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial S} \end{bmatrix}_i \frac{dS_i}{d\vec{b}} \quad (3.9)$$

3-4ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΥΡΕΣΗ ΠΡΩΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Όμως, όσον αφορά τον τελεστή ροής, από τη σχέση (2.9) γίνεται ξεκάθαρο ότι ο μόνος όρος που εξαρτάται από τη διατομή του αγωγού είναι ο όρος της πηγής \vec{q} . Επομένως, θα έχουμε:

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]_i = - \left[\frac{\partial \vec{q}}{\partial S} \right]_i \frac{dS_i}{d\vec{b}} \Delta x_i \quad (3.10)$$

Ωστόσο, λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (2.2) έχουμε:

$$\left[\frac{\partial \vec{q}}{\partial S} \right]_i = \left[\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} - \frac{1}{S} \frac{d}{dS} \frac{dS}{dx} \right]_i \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_i \quad (3.11)$$

Οπότε, η σχέση (3.10) μεταβάλλεται ως εξής:

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]_i = - \left[\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{d\vec{b}} - \frac{1}{S} \frac{d}{d\vec{b}} \left(\frac{dS}{dx} \right) \right]_i \Delta x_i \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_i, \forall i = 1, \dots, z \quad (3.12)$$

όπου $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]$ είναι ένα μητρώο $z \times N$ το οποίο παρουσιάζεται παρακάτω:

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial b_N} \right] \\ \left[\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial b_N} \right] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \vec{R}_z}{\partial b_N} \right] \end{bmatrix}$$

Ωστόσο, από τη σχέση (3.12) κρίνεται απαραίτητο να αναφερθούν κάποιες γενικές σχέσεις που προκύπτουν από τη παραμετροποίηση της γεωμετρίας του αγωγού. Στην παρούσα εργασία, η παραμετροποίηση έγινε με πολυώνυμα Bezier, αν και μπορεί εύκολα να γενικευτεί σε άλλους τρόπους παραμετροποίησης [6]. Γνωρίζουμε ότι:

$$S(t) = \sum_{i=1}^N B_i(t) b_i \quad (3.13)$$

όπου t παράμετρος, $t \in [0, 1]$ και $i \in [1, N]$. Επιπλέον, υπενθυμίζεται ότι το διάνυσμα των παραμέτρων σχεδιασμού είναι $\vec{b} = [b_1, b_2, \dots, b_N]$ και ότι $B_i(t)$ υπολογίζεται από την εξής σχέση:

$$B_i(t) = [m_{i,0}, m_{i,1}, \dots, m_{i,N}] \begin{bmatrix} t^0 \\ t^1 \\ \vdots \\ t^N \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

όπου $N = (\text{αριθμός των σημείων ελέγχου}) - 1$ και

$$m_{i,j} = (-1)^{j-1} \binom{N}{j} \binom{j}{i} \quad (3.15)$$

ενώ όταν $i > j \rightarrow m_{i,j} = 0$.

Άρα από την έκφραση (3.13) προκύπτει ότι:

$$\frac{dS(t)}{dx} = \sum_{a=1}^N \frac{dB_a(t)}{dx} b_a, \quad \frac{dS(t)}{db_a} = B_a(t), \quad \frac{d}{db_a} \left[\frac{dS(t)}{dx} \right] = \frac{dB_a(t)}{dx} \quad (3.16)$$

Επομένως, γνωρίζοντας το $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ από την επίλυση του ροϊκού προβλήματος (2.11) και χρησιμοποιώντας την σχέση (3.12) υπολογίζεται το $\frac{d\vec{U}}{db}$ με την επίλυση συστήματος (σχέση 3.6) εξισώσεων τριδιαγώνιας (πρώτης τάξης ακρίβεια μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$) ή πενταδιαγώνιας (δεύτερης τάξης ακρίβεια μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$) μορφής. Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3.2 έως 3.4) υπολογίζεται η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου (σχέση 3.1). Σημειώνεται ότι η ευθεία διαφορίση δίνει "ακριβείς παραγώγους" με την έννοια ότι αυτές είναι **απόλυτα συμβατές** με την ακρίβεια διακριτοποίησης των εξισώσεων ροής. Με απλά λόγια, οποιοδήποτε αριθμητικό σφάλμα εμφανίζεται στην επίλυση των εξισώσεων ροής, το ίδιο σφάλμα μεταφέρεται και στις παραγώγους. Επειδή όμως θεωρείται αποδεκτή η επίλυση του πεδίου ροής θεωρούνται "ακριβείς" (ορθότερα συμβατές) και οι παράγωγοι από την ευθεία διαφορίση.

3.3 Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη συζυγή μέθοδο.

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης, θα παρουσιαστεί στην παρούσα ενότητα, ο τρόπος εύρεσης της πρώτης παραγώγου με την συζυγή τεχνική.

Παρόλο που δεν κρίνεται απαραίτητη στη διακριτή συζυγή τεχνική η εισαγωγή επαυξημένης συνάρτησης, στην παρούσα διπλωματική εργασία, χρησιμοποιείται ως εργαλείο για την παραγωγή της συζυγούς εξίσωσης. Επομένως, εισάγοντας φυσικά ουδέτερη επαύξηση στη μεταβολή της συνάρτησης - στόχου, λαμβάνεται η σχέση:

$$\frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} = \frac{dF}{d\vec{b}} + \vec{\psi}^T \frac{d\vec{R}}{d\vec{b}}$$

όπου $\vec{\psi}^T$ είναι η συζυγής μεταβλητή. Επειδή F και \vec{R} εξαρτώνται από δύο διανύσματα μεταβλητών, η παραπάνω σχέση τροποποιείται σε:

$$\begin{aligned} \frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} &= \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{dx}{d\vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial S} \frac{dS}{d\vec{b}} \right] + \vec{\psi}^T \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial x} \frac{dx}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial S} \frac{dS}{d\vec{b}} \right] \longrightarrow \\ \frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} &= \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \left(\frac{\partial F}{\partial S} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial S} \right) \frac{dS}{d\vec{b}} \quad (3.17) \end{aligned}$$

όπου υπενθυμίζεται ότι στα $1 - D$ προβλήματα με ισαπέχοντες κόμβους $\frac{dx}{d\vec{b}} = 0$.

Η κεντρική ιδέα της συζυγούς μεθόδου είναι η επιλογή του $\vec{\psi}$ έτσι ώστε να μηδενιστεί ο πρώτος όρος της εξίσωσης 3.17. Δηλαδή, πρέπει να βρούμε $\vec{\psi}$, τέτοιο ώστε να ισχύει:

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (3.18)$$

Με αυτόν τον τρόπο, η μεταβολή της συνάρτησης - στόχου συναρτάται μόνο της μεταβολής του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού $d\vec{b}$ και όχι των επαγόμενων μεταβολών $d\vec{U}$ του πεδίου ροής. Δηλαδή, θα έχουμε παραγώγους ευαισθησίας:

$$\frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} = \left(\frac{\partial F}{\partial S} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial S} \right) \frac{dS}{d\vec{b}} \quad (3.19)$$

ενώ το πεδίο των $\vec{\psi}$, το οποίο ονομάζεται πλέον των συζυγών μεταβλητών, προκύπτει από τη λύση της συζυγούς εξίσωσης:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \vec{\psi} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \quad (3.20)$$

η οποία είναι γραμμική ως προς $\vec{\psi}$, αφού το μητρώο $\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T$ δεν συναρτάται του $\vec{\psi}$.

3.4 Σύγκριση ευθείας διαφόρισης και συζυγούς μεθόδου

Στις παραπάνω ενότητες, παρουσιάστηκαν για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης, καθώς και αυτή της συζυγούς τεχνικής. Σκοπός της παραγράφου αυτής, είναι να αποδειχθεί η υπεροχή της συζυγούς μεθόδου έναντι αυτής της ευθείας διαφόρισης ως προς το υπολογιστικό κόστος.

Η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης απαιτεί, για z κόμβους, την επίλυση N συστημάτων $z \times z$ για τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}_{(z \times z)} \begin{bmatrix} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \end{bmatrix}_{(z \times N)} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \end{bmatrix}_{(z \times N)} \quad (3.21)$$

στη συνέχεια από το παραπάνω μητρώο και τη σχέση 3.1 υπολογίζεται η ολική παράγωγος.

Αντίστοιχα, στη περίπτωση του συζυγούς προβλήματος επιλύεται την εξίσωση:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}_{(z \times z)}^T \vec{\psi}_{(z \times M)} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}_{(z \times M)} \quad (3.22)$$

όπου με M συμβολίζεται ο αριθμός των στόχων μας. Άρα στη παρούσα εφαρμογή $M = 1$. Από την έκφραση 3.22, βλέπουμε ότι το συζυγές πρόβλημα απαιτεί την λύση M (εδώ $M = 1$) συστημάτων $z \times z$. Δηλαδή, ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα της συζυγούς μεθόδου είναι το κόστος επίλυσης της συζυγούς εξίσωσης είναι περίπου ίσο με το κόστος για την επίλυση των εξισώσεων ροής και είναι ανεξάρτητο του πλήθους N των μεταβλητών ελέγχου. Επομένως συμπεραίνουμε ότι όταν $N > M$ συμφέρει η χρησιμοποίηση της συζυγούς μεθόδου, ενώ αν ισχύει $N < M$ συμφέρει η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης. Ωστόσο, στην αεροδυναμική είναι γνωστό ότι ο αριθμός των κόμβων είναι πάντα πολύ μεγαλύτερος του αριθμού των στόχων οι οποίοι σπάνια ξεπερνούν τους δύο ή τρεις, δηλαδή είναι πάντα $N > M$.

3.5 Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών για εύρεση 1ης παραγώγου

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται μια σύντομη περιγραφή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών, διότι απαιτείται, και όχι μόνο για λόγους πληρότητας, ένας διαφορετικός τρόπος υπολογισμού των πρώτων παραγώγων. Με αυτόν τον τρόπο, θα χρησιμεύσει η μέθοδος αυτή ως μέσο σύγκρισης για τις πρώτες παραγώγους που υπολογίστηκαν είτε με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης είτε της συζυγούς μεθόδου.

Η μερική παράγωγος της συνάρτησης - στόχου F ως προς τον i -οστό βαθμό ελευθερίας μπορεί να προσεγγισθεί με σχήμα κεντρικών πεπερασμένων διαφορών, ακρίβειας δεύτερης τάξης, ως εξής:

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i - \epsilon, \dots, b_N)}{2\epsilon} \quad (3.23)$$

όπου ϵ σταθερά, ιδιαίτερα μικρής τιμής, που καθορίζει ο χρήστης. Η εξίσωση (3.23) πρέπει να εφαρμοστεί N φορές (για τις N τιμές του δείκτη i) στην τρέχουσα λύση. Έτσι, το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη μιας μεθόδου βελτιστοποίησης που βασίζεται στην κλίση της συνάρτησης στόχου, ώστε να βρεθούν με ακρίβεια δεύτερης τάξης, οι συνιστώσες της κλίσης της συνάρτησης - στόχου στην τρέχουσα λύση είναι $2N$ υπολογισμοί της συνάρτησης - στόχου. Πέρα από το μεγάλο υπολογιστικό κόστος της μεθόδου αυτής ένα από τα βασικά μειονεκτήματα της χρήσης της σχέσης (3.23) είναι και η ευαισθησία του υπολογισμού ως προς την τιμή της ποσότητας ϵ .

3.6 Αντίστροφος σχεδιασμός με μέθοδο απότομης καθόδου

Η μέθοδος της απότομης καθόδου (steepest descent) απαιτεί σε κάθε νέα θέση τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης - στόχου, αλλά έχει το πλεονέκτημα ότι δεν απαιτεί πληροφορία για το Hessian μητρώο (δεύτερες παραγώγους). Δηλαδή, η ανανέωση της μορφής του αγωγού θα γίνεται σύμφωνα με τη σχέση:

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

όπου η το βήμα της μεθόδου, ώστε να είναι ελεγχόμενη η μεταβολή της γεωμετρίας από βήμα σε βήμα. Η επιλογή του βήματος απαιτεί ιδιαίτερη προσοχή, καθώς υπάρχει κίνδυνος η λανθασμένη επιλογή του να οδηγήσει είτε σε εγκλωβισμό της λύσης σε κάποιο τοπικό ακρότατο, είτε να καθυστερήσει την εύρεση της λύσης (επομένως μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος), είτε να μην συγκλίνει καθόλου η μέθοδος.

Τέλος, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν στην ενότητα 3.4, σε μεθόδους που απαιτείται η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου, όπως συμβαίνει στην μέθοδο της απότομης καθόδου, η παράγωγος υπολογίζεται με τη συζυγή τεχνική (εισαγωγή της επαυξημένης συνάρτησης) αντί της ευθείας διαφορίσης. Ο λόγος έγκειται στο ότι η ευθεία διαφορίση έχει πολύ μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος από τη συζυγή μέθοδο.

3.7 Αλγόριθμος αντίστροφου σχεδιασμού

Ανάλυση βημάτων αλγόριθμου αντίστροφου σχεδιασμού αγωγού, με βάση θεώρηση ψευδομονοδιάστατης ροής, που βασίζεται σε συζυγή διατύπωση και τη μέθοδο της απότομης καθόδου:

- Βήμα 1:
Δίνεται αρχική τιμή στο μετρητή των κύκλων και επιλέγεται τυχαία η αρχική λύση, δηλαδή ένα αρχικό σύνολο τιμών των N μεταβλητών σχεδιασμού.
- Βήμα 2:
Χρησιμοποιείται ως συνάρτηση παρεμβολής το πολυώνυμο Bezier-Bernstein, ώστε να σχηματιστεί η γεωμετρία του αγωγού (κατανομή $S(x)$ που αντιστοιχεί στις τρέχοντες τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού).

3-10 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3. ΕΥΡΕΣΗ ΠΡΩΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

- Βήμα 3:
Επιλύεται το ευθύ πρόβλημα (εξισώσεις ροής). Εύρεση και κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού.
- Βήμα 4:
Εφαρμόζεται κριτήριο σύγκλισης σχετικό με το πόσο αλλάζει η τιμή της συνάρτησης - στόχου. Αν ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης, ο αλγόριθμος σταματά εδώ.
- Βήμα 5:
Επιλύεται το συζυγές πρόβλημα και υπολογίζονται οι συζυγές μεταβλητές $\vec{\psi}$.
- Βήμα 6:
Υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας.
- Βήμα 7:
Διορθώνονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου.
- Βήμα 8:
Ένας νέος κύκλος ξεκινά από το βήμα 2.

Κεφάλαιο 4

Εύρεση Δεύτερων Παραγώγων με Διακριτή Συζυγή Μέθοδο.

4.1 Εισαγωγικά σχόλια.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, παρουσιάστηκε διεξοδικά ο υπολογισμός της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης στόχου και αναφέρθηκαν τα πλεονεκτήματα της διακριτής συζυγούς μεθόδου έναντι των άλλων από πλευρά υπολογιστικού κόστους. Επιπροσθέτως, περιγράφηκε αναλυτικά η μέθοδος της απότομης καθόδου. Όπως ήδη αναφέρθηκε, χαρακτηριστικό της μεθόδου είναι ότι απαιτεί σε κάθε νέα θέση, τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης στόχου και πλεονέκτημά της ότι δεν απαιτεί πληροφορία για το Hessian μητρώο.

Ωστόσο, η μέθοδος της απότομης καθόδου είναι ιδιαίτερα αργή και αναποτελεσματική σε πολύπλοκα προβλήματα. Μια από τις σημαντικότερες και ταχύτερες αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης είναι η μέθοδος Newton. Ουσιαστική διαφορά μεταξύ της μεθόδου της απότομης καθόδου και της μεθόδου Newton είναι ότι η τελευταία απαιτεί και τον υπολογισμό του Hessian μητρώου της συνάρτησης στόχου. Η ανάγκη αυτή εισάγει μεγαλύτερες υπολογιστικές δυσκολίες, αλλά και αυξημένο υπολογιστικό κόστος κατά την εφαρμογή της. Παρόλα αυτά μπορεί να προκαλέσει αισθητά ταχύτερη σύγκλιση. Επομένως, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, κρίνεται απαδοτική η χρήση της μεθόδου Newton και κατέπекταση αναγκαίως ο υπολογισμός του Hessian μητρώου.

Στο κεφάλαιο αυτό θα αναλυθούν μέθοδοι υπολογισμού των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου (Hessian μητρώο). Ουσιαστικά υπάρχουν 4 τρόποι υπολογισμού των $\frac{dF}{db_i}$ και $\frac{d^2F}{db_i db_j}$. Αρχικά, μπορεί να υπολογιστεί η πρώτη παράγωγος $\frac{dF}{db_i}$ με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης και το Hessian μητρώο είτε με ευθεία διαφόριση είτε με τη συζυγή μέθοδο. Εναλλακτικά, μπορεί να υπολογιστεί με τη συζυγή μέθοδο η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου και η δεύτερη είτε με ευθεία διαφόριση είτε με τη συζυγή τεχνική.

4-2ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΥΡΕΣΗ ΔΕΥΤΕΡΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Ωστόσο, στη παρούσα διπλωματική εργασία, θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στη διακριτή συζυγή μέθοδο υπολογισμού των δεύτερων παραγώγων, έχοντας γνωστή την πρώτη παράγωγο από την μέθοδο της ευθείας διαφόρισης. Η μέθοδος αυτή, χρησιμοποιείται περισσότερο λόγω του μικρότερου υπολογιστικού κόστους που παρουσιάζει έναντι των υπολοίπων.

Για διευκόλυνση του αναγνώστη, παρουσιάζονται οι συντομογραφίες που θα ακολουθούνται μέχρι το πέρας της διπλωματικής:

Συντομογραφίες	Ονομασία
AM-DD	Adjoint Method-Direct Differentiation
DD-AM	Direct Differentiation-Adjoint Method
DD-DD	Direct Differentiation-Direct Differentiation
AM-AM	Adjoint Method-Adjoint Method

Ενώ στη συνέχεια περιγράφεται η κάθε μέθοδος, καθώς και το υπολογιστικό κόστος που απαιτεί η κάθε μία από αυτές:

Συντ/φίες	1η παράγωγος	2η παράγωγος	Κόστος
AM-DD	Συζυγής Τεχνική	Ευθεία Διαφόριση	1+2N
DD-AM	Ευθεία Διαφόριση	Συζυγής Τεχνική	N+1
DD-DD	Ευθεία Διαφόριση	Ευθεία Διαφόριση	$N + \frac{N(N+1)}{2}$
AM-AM	Συζυγής Τεχνική	Συζυγής Τεχνική	1+2N

4.2 Υπολογισμός 2ων παραγώγων με ευθεία διαφόριση.

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου με ευθεία διαφόριση, θα περιγραφεί στην παρούσα ενότητα ο τρόπος εύρεσης των δεύτερων παραγώγων με την ίδια μέθοδο.

Πιο αναλυτικά, η δεύτερη παράγωγος προκύπτει διαφορίζοντας την 3.1:

$$\frac{d^2F}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} \quad (4.1)$$

όπου υπενθυμίζεται ότι $i, j \in [1, N]$ όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού, αλλά και ότι $k, m, n \in [1, z]$, όπου z ο αριθμός των κόμβων.

Ωστόσο, λαμβάνοντας υπόψη τη συνάρτηση στόχο που χρησιμοποιείται στη παρούσα διπλωματική εργασία και επειδή το πρόβλημά μας αναφέρεται σε μονοδιάστατη ροή ισχύει $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$. Επιπλέον, υπενθυμίζεται ότι το μητρώο $\frac{d\vec{U}}{db}$ είναι γνωστό από την ενότητα 3.2. Επομένως, θα έχουμε:

$$\frac{d^2 F}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} \quad (4.2)$$

με μόνο άγνωστο όρο το $\frac{d^2 U_k}{db_i db_j}$. Ωστόσο, διαφορίζοντας τη γνωστή, από την ενότητα 3.2, σχέση 3.5 προκύπτει η σχέση:

$$\frac{d^2 R_n}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \frac{\partial R_n}{\partial U_k} \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} = 0 \quad (4.3)$$

Άρα, μπορεί να υπολογιστεί ο όρος $\frac{d^2 U_k}{db_i db_j}$ από τη εξίσωση 4.3 και στη συνέχεια να αντικατασταθεί στην σχέση 4.2. Με τον τρόπο, αυτό θα υπολογιστεί το Hessian μητρώο με ευθεία διαφορίση. Ωστόσο, θα πρέπει να διευκρινιστεί ότι σε $2 - D$ και $3 - D$ προβλήματα δεν υφίστανται οι απλοποιήσεις αυτές, επομένως υπάρχει μεγαλύτερη υπολογιστική δυσκολία.

Από την άλλη πλευρά, η εφαρμογή της ευθείας διαφορίσης για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου, μπορεί να γίνει και στην περίπτωση υπολογισμού της πρώτης παραγώγου με τη συζυγή μέθοδο, όπως περιγράφηκε στην ενότητα 3.3. Επομένως, για τις δεύτερες παραγώγους θα έχουμε διαφορίζοντας την σχέση 3.19:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial b_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{d\psi_m^T}{db_j} \frac{\partial R_m}{\partial b_i} \quad (4.4)$$

Ωστόσο, επειδή το πρόβλημά μας είναι $1 - D$ αντίστροφου σχεδιασμού (άρα $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$) θα έχουμε:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} = \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial b_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{d\psi_m^T}{db_j} \frac{\partial R_m}{\partial b_i} \quad (4.5)$$

η οποία σχέση απαιτεί τον υπολογισμό του όρου $\frac{d\psi_m^T}{db_j}$. Ωστόσο, διαφορίζοντας τη σχέση 3.18, θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_n \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_n \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial b_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{d\psi_m^T}{db_j} \frac{\partial R_m}{\partial U_n} = 0 \quad (4.6)$$

4-4ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΥΡΕΣΗ ΔΕΥΤΕΡΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Με την ίδια λογική, επειδή όπως ήδη αναφέρθηκε, το πρόβλημά είναι $1-D$ αντίστροφο σχεδιασμού (άρα $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$) θα έχουμε:

$$\frac{dR_n^\psi}{db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_n \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial b_j} + \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{d\psi_m^T}{db_j} \frac{\partial R_m}{\partial U_n} = 0 \quad (4.7)$$

Επομένως, λύνοντας την 4.7 ως προς το $\frac{d\psi_m^T}{db_j}$ και αντικαθιστώντας το στην 4.5 υπολογίζεται το Hess μητρώο.

4.3 Υπολογισμός 2ων παραγώγων με συζυγή τεχνική.

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου με τη συζυγή τεχνική, θα παρουσιαστεί στην παρούσα ενότητα, ο τρόπος εύρεσης των δεύτερων παραγώγων με την ίδια μέθοδο.

Πιο αναλυτικά, θα παρατηρηθεί διπλή επαύξηση της συνάρτησης - στόχου. Δηλαδή θα εισάχθούν δύο πεδία συζυγών μεταβλητών, το ψ_{im} και το ψ_{in} :

$$\frac{d^2 F_{aug2}}{db_i db_j} = \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} + \psi_{im}^T \frac{dR_m}{db_j} + \psi_{in}^T \frac{dR_n^\psi}{db_j} \quad (4.8)$$

όπου για $1-D$ πρόβλημα το $\frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j}$ γνωστό από τη σχέση 4.5, το $\frac{dR_m}{db_j}$ γνωστό από τη σχέση 3.5 και τέλος $\frac{dR_n^\psi}{db_j}$ γνωστό από τη σχέση 4.7. Επομένως, με αντικατάσταση και μετά από πράξεις θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug2}}{db_i db_j} &= \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial b_j} + \psi_{im}^T \frac{\partial R_m}{\partial b_j} + \psi_{in}^T \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial b_j} + \\ &\left(\psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial U_k} + \psi_{im}^T \frac{\partial R_m}{\partial U_k} + \psi_{in}^T \frac{\partial^2 F}{\partial U_n \partial U_k} + \psi_{in}^T \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial U_k} \right) \frac{dU_k}{db_j} + \\ &\frac{d\psi_m^T}{db_j} \left(\frac{\partial R_m}{\partial b_i} + \psi_{in}^T \frac{\partial R_m}{\partial U_n} \right) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Όπως είναι λογικό, αφού εισάχθηκαν δύο συζυγείς μεταβλητές, θα προκύψουν και δύο συζυγείς εξισώσεις. Η πρώτη θα μηδενίζει την πρώτη παρένθεση και η δεύτερη τη δεύτερη παρένθεση. Δηλαδή θα ισχύουν οι εξής εξισώσεις:

$$\psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial U_k} + \psi_{im}^T \frac{\partial R_m}{\partial U_k} + \psi_{in}^T \frac{\partial^2 F}{\partial U_n \partial U_k} + \psi_{in}^T \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial U_k} = 0 \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial R_m}{\partial b_i} + \psi_{in}^T \frac{\partial R_m}{\partial U_n} = 0 \quad (4.11)$$

με βάση τις οποίες θα υπολογιστεί το ψ_{im} και το ψ_{in} και, στη συνέχεια, η παράγωγος ευαισθησίας από τη σχέση:

$$\frac{d^2 F_{aug2}}{db_i db_j} = \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial b_i \partial b_j} + \psi_{im}^T \frac{\partial R_m}{\partial b_j} + \psi_{in}^T \psi_m^T \frac{\partial^2 R_m}{\partial U_n \partial b_j}$$

Ωστόσο, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην εισαγωγή η πιο συμφέρουσα μέθοδος αποτελεί η εύρεση του μητρώου Hess με τη συζυγή τεχνική, έχοντας γνωστή τη πρώτη παράγωγο από ευθεία διαφόριση. Υπενθυμίζεται ότι η μέθοδος αυτή απαιτεί μόνο $N + 1$ συστήματα επίλυσης και για αυτό υπερέχει έναντι όλων των άλλων μεθόδων υπολογισμού του Hessian μητρώου. Για τον λόγο αυτό, η ανάλυση της μεθόδου αυτή θα είναι λεπτομερής, καθώς χρησιμοποιείται επισταμένως.

Επομένως, έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου με ευθεία διαφόριση, θα παρουσιαστεί ο τρόπος εύρεσης των δεύτερων παραγώγων με τη συζυγή τεχνική.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η συνάρτηση - στόχος εξαρτάται από δύο διανύσματα μεταβλητών, επομένως η δεύτερη παράγωγος αυτής, αναλύεται ως εξής:

$$\frac{d^2 F}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} \quad (4.12)$$

Η διακριτή συζυγή μέθοδος, στηρίζεται για τον υπολογισμό των 2ων παραγώγων, στον ορισμό της επαυξημένης συνάρτησης - στόχου ως εξής:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} = \frac{d^2 F}{db_i db_j} + \Psi_n^T \frac{d^2 R_n}{db_i db_j} \quad (4.13)$$

όπου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ δίδεται από την (4.12), ενώ για το $\frac{d^2 R_n}{db_i db_j}$ με την ίδια συλλογιστική προκύπτει:

$$\frac{d^2 R_n}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \frac{\partial R_n}{\partial U_k} \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} = 0$$

οπότε με αντικατάσταση αυτών στη σχέση (4.13) λαμβάνεται η σχέση:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \\ &\quad \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \\ &\quad \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} + \left(\frac{\partial F}{\partial U_k} + \Psi_n^T \frac{\partial R_n}{\partial U_k} \right) \frac{d^2 U_k}{db_i db_j} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Ωστόσο, η κεντρική ιδέα της συζυγούς μεθόδου είναι να επιλεγεί το διάνυσμα $\vec{\Psi}$ έτσι ώστε να μηδενιστεί ο όρος $\frac{d^2 U_k}{db_i db_j}$. Άρα θα ισχύει η σχέση:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial U_k} + \Psi_n^T \frac{\partial R_n}{\partial U_k} \right) = 0 \longrightarrow \left[\frac{\partial R_n}{\partial U_k} \right]^T \Psi_n = - \left[\frac{\partial F}{\partial U_k} \right]^T \quad (4.15)$$

όπου Ψ_n^T είναι ένα διάνυσμα με 3 συνιστώσες ανά κόμβο. Δηλαδή, $\Psi_n^T = [\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3]_n$. Επιπλέον, υπενθυμίζεται ότι $i, j \in [1, N]$ όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδίασμού, αλλά και ότι $k, m, n \in [1, z]$, όπου z ο αριθμός των κόμβων.

Επομένως, για να υπολογιστεί το Ψ_n πρέπει απλά να επιλυθεί η εξίσωση (4.15) η οποία είναι σύστημα τριδιαγώνιας ή πενταδιαγώνιας μορφής (πρώτης ή δεύτερης τάξης μητρώο αντίστοιχα).

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, έχοντας υπολογίσει το ψ_n , το μητρώο $\frac{d\vec{U}}{db}$ (επίλυση σχέσης 3.6) και λαμβάνοντας υπόψη ταυτόχρονα ότι το προβλημά μας είναι $1 - D$ αντίστροφου σχεδιασμού, (άρα $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$), η σχέση (4.14) απλοποιείται στην :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} &= \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \\ &\quad \left[\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \right] \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} \end{aligned} \quad (4.16)$$

όπου ο κάθε ένας όρος της παραπάνω εξίσωσης εκφράζεται παρακάτω με τον ακόλουθο τρόπο. Αρχικά, όσον αφορά τον όρο $\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$, υπολογίζεται αναλυτικά, λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (3.12). Με τον τρόπο αυτό θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} = Q \Delta x_n \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_n \quad (4.17)$$

όπου Q ισούται με:

$$Q = \left[-\frac{1}{S_n^2} \frac{d}{db_j} \left(\frac{dS}{dx} \right)_n \frac{dS_n}{db_i} - \frac{1}{S_n^2} \frac{d}{db_i} \left(\frac{dS}{dx} \right)_n \frac{dS_n}{db_j} + \frac{2}{S_n^3} \frac{dS_n}{db_j} \left(\frac{dS}{dx} \right)_n \frac{dS_n}{db_i} \right] \quad (4.18)$$

Στη συνέχεια, όσον αφορά τον όρο $\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k}$, με βάση τη σχέση (2.18) για $n \neq k$ το $\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} = 0$ ενώ για $n = k$ θα έχω: .

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_n} = \frac{\partial}{\partial b_i} \left(\frac{\partial R_n}{\partial U_n} \right) = -\frac{\partial}{\partial b_i} \left(\frac{\partial q_n}{\partial U_n} \right) \Delta x_n \quad (4.19)$$

Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη την έκφραση (2.19), η παραπάνω σχέση θα γίνει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_n} &= - \left[\frac{\partial}{\partial b_i} \left(-\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right)_n \right] W = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right) \frac{dx}{db_i} + \frac{\partial}{\partial S} \left(-\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right) \frac{dS}{db_i} \right]_n W \\ &= \left[-\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{db_i} + \frac{1}{S} \frac{d}{db_i} \frac{dS}{dx} \right]_n W \end{aligned} \quad (4.20)$$

υπενθυμίζοντας ότι $\frac{dx}{db_i} = 0$ ενώ με W εκφράζονται οι όροι:

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_n \Delta x_n \quad (4.21)$$

Αντίστοιχα με την ίδια λογική, ο όρος $\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j}$ για $n \neq k$ ισούται με 0 ενώ για $n = k$ θα έχω:

4-8ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΥΡΕΣΗ ΔΕΥΤΕΡΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_n \partial b_j} = \left[-\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{db_j} + \frac{1}{S} \frac{d}{db_j} \frac{dS}{dx} \right]_n W \quad (4.22)$$

όπου W γνωστό από τη σχέση (4.21).

Επομένως, αρκεί να υπολογιστούν οι όροι $\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m}$ και $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m}$.

Όσον αφορά τον όρο $\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m}$ παρατηρείται ότι λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (2.18) καθώς και την θεώρηση (2.17) προκύπτει ότι για $n \neq k, m$ ισούται με 0 ενώ για $n = k = m$ θα έχω:

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_n^2} = -\frac{\partial^2 q_n}{\partial U_n^2} \Delta x_n \quad (4.23)$$

Επομένως, σύμφωνα με τη σχέση (2.19) θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_n^2} = \left[\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right]_n \frac{\partial}{\partial U_n} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_n \Delta x_n \quad (4.24)$$

όπου

$$\frac{\partial}{\partial U_n} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{2u^2}{\rho} & -\frac{2u}{\rho} & 0 \\ -\frac{2u}{\rho} & \frac{\rho}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{(2\gamma Eu) - 3u^3(\gamma - 1)}{\rho} & \frac{3u^2(\gamma - 1) - \gamma E}{\rho} & -\frac{\gamma u}{\rho} \\ \frac{3u^2(\gamma - 1) - \gamma E}{\rho} & -\frac{3u(\gamma - 1)}{\rho} & \frac{\gamma}{\rho} \\ -\frac{\gamma u}{\rho} & \frac{\gamma}{\rho} & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}_n \quad (4.25)$$

Τέλος, όσον αφορά τον τελευταίο όρο $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m}$ ισχύουν τα ακόλουθα. Αρχικά, λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (3.3) θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} = \frac{\partial p_m}{\partial U_k} \frac{\partial p_m}{\partial U_m} \Delta x_m + [p(x) - p_{tar}(x)]_m \frac{\partial^2 p_m}{\partial U_k \partial U_m} \Delta x_m \quad (4.26)$$

όπου, p_{tar} η επιθυμητή κατανομή πίεσης. Ωστόσο, στην περίπτωση όπου $k \neq m$ τότε το $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} = 0$, ενώ για $k = m$ θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_k^2} = \left[\left(\frac{\partial p}{\partial U} \right)^2 + [p(x) - p_{tar}(x)] \frac{\partial^2 p}{\partial U^2} \right]_k \Delta x_k \quad (4.27)$$

Επομένως, αρκεί να υπολογιστούν οι όροι $\left(\frac{\partial^2 p}{\partial U^2} \right)_k$ και $\left(\frac{\partial p}{\partial U} \right)_k^2$.

Όσον αφορά τον όρο $\left(\frac{\partial^2 p}{\partial U^2} \right)_k$, λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (3.4) θα έχουμε ότι:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial U_k^2} = (\gamma - 1) \begin{bmatrix} \frac{-u^2}{\rho} & \frac{u}{\rho} & 0 \\ \frac{u}{\rho} & -\frac{1}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_k \quad (4.28)$$

ενώ με την ίδια λογική, ο όρος $\left(\frac{\partial p}{\partial U} \right)_k^2$, θα είναι:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial U} \right)_k^2 = (\gamma - 1)^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{2}u^2 \\ -u \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2}u^2 & -u & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{u^4}{4} & -\frac{u^3}{2} & \frac{u^2}{2} \\ -\frac{u^3}{2} & u & -u \\ \frac{u^2}{2} & -u & 1 \end{bmatrix}_k \quad (4.29)$$

Επομένως, σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, γνωρίζοντας το $\frac{d\vec{U}}{db}$, το ψ (επίλυση σχέσης 3.6 και 4.15 αντίστοιχα) και τους όρους $\frac{\partial R_n}{\partial b_i \partial b_j}$, $\frac{\partial R_n}{\partial b_i \partial U_k}$, $\frac{\partial R_n}{\partial U_k \partial b_j}$, $\frac{\partial R_n}{\partial U_k \partial U_m}$ και $\frac{\partial F}{\partial U_k \partial U_m}$ (από τις σχέσεις 4.17 έως 4.29) υπολογίζεται η δεύτερη παράγωγος της επαυξημένης F_{aug} σύμφωνα με τη σχέση 4.16. Τέλος, τονίζεται, όπως φαίνεται από την εξίσωση (4.13) ότι η επαύξηση της συνάρτησης - στόχου είναι φυσικά ουδέτερη, αφού πρέπει οι εξισώσεις ροής να ικανοποιούνται και στη βέλτιστη γεωμετρία. Εξάλλου το ζητούμενο από τη συζυγή τεχνική είναι ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας (σχέση 4.16).

4.4 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών για εύρεση του Hessian μητρώου.

Ήδη στο προηγούμενο κεφάλαιο, αναφέρθηκε ο τρόπος υπολογισμού της παραγώγου πρώτης τάξης με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Στην ενότητα αυτή, περιγράφεται η ίδια μέθοδος για τον τρόπο εύρεσης παραγώγων δεύτερης τάξης.

Οι σχέσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται είναι οι εξής:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} = \frac{F(b_i + \epsilon, b_j + \epsilon) + F(b_i - \epsilon, b_j - \epsilon) - F(b_i + \epsilon, b_j - \epsilon) - F(b_i - \epsilon, b_j + \epsilon)}{4\epsilon^2} \quad (4.30)$$

ενώ για $i = j$ ισχύει:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial^2 b_i} = \frac{F(b_i + \epsilon) - 2F(b_i) + F(b_i - \epsilon)}{\epsilon^2} \quad (4.31)$$

Με τον τρόπο αυτό, εφαρμόζοντας τις παραπάνω εξισώσεις (4.30) και (4.31) παράγεται ένα συμμετρικό μητρώο που θα αποτελείται από N^2 τιμές δεύτερης τάξης παραγώγου (συνδυασμός των N τιμών του δείκτη i και N τιμών του δείκτη j) στην τρέχουσα λύση. Επομένως, είναι προφανές το πόσο απαγορευτικά ακριβός είναι αυτός ο τρόπος υπολογισμού.

Στο πλαίσιο της διπλωματικής αυτής, η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών χρησιμεύει ως μέσο σύγκρισης για τις τιμές των παραγώγων δεύτερης τάξης, που υπολογίστηκαν με τη μέθοδο της συζυγούς μεθόδου, έχοντας γνωστή την τιμή της πρώτης παραγώγου από ευθεία διαφόριση.

Τέλος διευκρινίζεται ότι πρώτου χρησιμοποιηθούν οι πεπερασμένες διαφορές είχε προηγηθεί διερεύνηση ως προς τη τιμή του ϵ , έτσι ώστε οι υπολογισμένες παράγωγοι να είναι ανεξάρτητες του ϵ .

4.5 Αντίστροφος σχεδιασμός 1 – D αγωγού με τη μέθοδο Newton

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη και τη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου, σχέση (1.1), για συγκεκριμένο σχήμα αγωγού, δηλαδή για δεδομένα σημεία Bezier, είναι δυνατό να βελτιστοποιηθεί το σχήμα του αγωγού μας, με σκοπό να επιτευχθεί η επιθυμητή p_{tar} . Για την εφαρμογή του αντίστροφου σχεδιασμού, θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Newton.

Η μέθοδος αυτή αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους αντιπροσώπους της κατηγορίας των μεθόδων ανίχνευσης κατά γραμμή και απαιτεί τον υπολογισμό-προσέγγιση του Hessian μητρώου της συνάρτησης - στόχου. Πιο αναλυτικά, όπως έχει ήδη αναφερθεί στο 1ο κεφάλαιο, το σχήμα του αγωγού περιγράφεται πλήρως από τις μεταβλητές σχεδιασμού, επομένως με τη μέθοδο Newton υπολογίζεται η μεταβολή που απαιτείται να γίνει ως προς βελτιστοποίηση του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} ως εξής:

$$b_j^{n+1} = b_j^n + db_j^n \quad (4.32)$$

όπου n ο κύκλος της βελτιστοποίησης και db_j^n να υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\frac{d^2 F^n}{db_i db_j} db_j^n = -\frac{dF^n}{db_i} \quad (4.33)$$

με $i, j \in [1, N]$, όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού.

Με άλλα λόγια, θα χρησιμοποιηθεί η σχέση (4.33) με σκοπό να βρεθεί η μεταβολή που πρέπει να υποστεί το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού, ώστε να προσεγγιστεί η συγκεκριμένη συνάρτηση στόχος που επιθυμείται. Έχοντας γνωστή τη μεταβολή, χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.32), ανανεώνονται οι τιμές των σημείων Bezier και επαναλαμβάνεται επί n φορές η διαδικασία ωσότου να επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα.

4.6 Αλγόριθμος αντίστροφου σχεδιασμού

Αναλύονται τα βήματα του αλγόριθμου αντίστροφου σχεδιασμού αγωγού με τη μέθοδο Newton, με βάση θεώρηση ψευδομονοδιάστατης ροής, που βασίζεται σε συζυγή διατύπωση δεύτερης παραγωγού, έχοντας ήδη υπολογισμένες τις πρώτες παραγωγούς με ευθεία διαφόριση:

- Βήμα 1:
Δίνεται αρχική τιμή στο μετρητή των κύκλων και επιλέγεται τυχαία η αρχική λύση, δηλαδή ένα αρχικό σύνολο τιμών των N μεταβλητών σχεδιασμού.
- Βήμα 2:
Χρησιμοποιείται ως συνάρτηση παρεμβολής το πολυώνυμο Bezier-Bernstein, ώστε να σχηματιστεί η γεωμετρία του αγωγού (κατανομή $S(x)$ που αντιστοιχεί στις τρέχοντες τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού).

4-12 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4. ΕΥΡΕΣΗ ΔΕΥΤΕΡΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

- Βήμα 3:
Επιλύεται το ευθύ πρόβλημα (εξισώσεις ροής). Εύρεση και κατανομή πίεσης κατά μήκος του αγωγού.
- Βήμα 4:
Εφαρμόζεται κριτήριο σύγκλισης σχετικό με τη τιμή της συνάρτησης - στόχου. Αν ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης, ο αλγόριθμος σταματά εδώ.
- Βήμα 5:
Εύρεση πρώτων παραγώγων με ευθεία διαφόριση. Κόστος: N επιλύσεις συστημάτων μπλοκ γραμμικών εξισώσεων.
- Βήμα 6:
Επιλύεται το συζυγές πρόβλημα και υπολογίζονται οι συζυγείς μεταβλητές $\vec{\psi}$.
- Βήμα 7:
Υπολογισμός του Hessian μητρώου.
- Βήμα 8:
Διορθώνονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού με τη μέθοδο Newton.
- Βήμα 9:
Ένας νέος κύκλος ξεκινά από το βήμα 2.

Κεφάλαιο 5

Αντίστροφος Σχεδιασμός με τη Διακριτή μέθοδο.

5.1 Εισαγωγικά σχόλια

Στα κεφάλαια που προηγήθηκαν, παρουσιάστηκαν οφέλη της διακριτής συζυγούς μεθόδου για πρώτης και δεύτερης τάξης παραγώγους. Επίσης παρουσιάστηκαν χαρακτηριστικές μέθοδοι βελτιστοποίησης που στηρίζονται στην κλίση της συνάρτησης στόχου. Πιο αναλυτικά, αναπτύχθηκε η μέθοδος της απότομης καθόδου που στηρίζεται στην εύρεση των πρώτων παραγώγων, καθώς και η μέθοδος Newton που απαιτεί τον υπολογισμό του Hessian μητρώου.

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι, μέσα από τις εφαρμογές που θα ακολουθήσουν, να αποδειχθεί η ταχύτητα της μεθόδου Newton έναντι αυτής της απότομης καθόδου και, προφανώς να επιδειχθεί η ακρίβεια με την οποία η συζυγής μέθοδος υπολογίζει τις παραγώγους. Πιο αναλυτικά, θα διαπιστωθεί ότι, αφού συγκριθούν μεταξύ τους οι τρόποι υπολογισμού των πρώτων παραγώγων παρατηρείται πλήρης ταύτιση μεταξύ εκείνων που υπολογίστηκαν είτε με τη συζυγή τεχνική είτε με ευθεία διαφόριση, σε σύγκριση πάντα με αυτές των πεπερασμένων διαφορών. Αντίστοιχα, με την ίδια λογική πραγματοποιείται η σύγκριση των τιμών των δευτέρων παραγώγων υπολογισμένων με τη διακριτή συζυγή τεχνική (DD-AM), με αυτών των πεπερασμένων διαφορών. Εν κατακλείδι, θα παρουσιαστούν διαγράμματα που εξετάζουν τη σημασία των όρων που εμπλέκονται στον υπολογισμό του Hessian μητρώου.

Στήν ενότητα αυτή, θα παρουσιαστούν τρεις υπολογισμοί αντίστροφου σχεδιασμού, όπως ακριβώς παρουσιάζονται στο παρακάτω πίνακα:

Υπολογισμοί	Πεδίο \vec{R}	Μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$
1ος	Ακρίβεια πρώτης τάξης	Ακρίβεια πρώτης τάξης
2ος	Ακρίβεια δεύτερης τάξης	Ακρίβεια δεύτερης τάξης
3ος	Ακρίβεια δεύτερης τάξης	Ακρίβεια πρώτης τάξης

5.2 Πρώτος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.

Στην ενότητα αυτή, θα παρουσιαστεί η διακριτή συζυγής μέθοδος για το σχεδιασμό ενός υποηχητικού αγωγού, για τον οποίο επιδιώκεται να ικανοποιεί καθορισμένη κατανομή πίεσης $p(x) = p_{tar}(x)$ καθόλο το μήκος αυτού. Η παραμετροποίηση της διατομής $S(x)$ έγινε με χρήση πολυωνύμων Bezier. Ο αριθμός των σημείων ελέγχου είναι 7, εκ των οποίων τα 5 αποτελούν τις ελεύθερες μεταβλητές σχεδιασμού ενώ το πρώτο και το τελευταίο σημείο παραμένουν σταθερά.

Για την εύρεση του αγωγού-στόχου, σκοπός είναι η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης στόχου:

$$F(\vec{U}_i, \vec{b}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k [p(x) - p_{tar}(x)]_i^2 \Delta x_i$$

Πιο αναλυτικά, η επαναληπτική διαδικασία ξεκινά από μια τυχαία μορφή αγωγού (αρχικά σημεία Bezier) και στη συνέχεια υπολογίζεται η πρώτη παράγωγος και το Hessian μητρώο με χρήση ευθείας διαφορίσης και συζυγούς μεθόδου αντίστοιχα (DD-AM). Στη συνέχεια, ανανεώνεται η μορφή του αγωγού εφαρμόζοντας την μέθοδο Newton.

$$\vec{b}^{n+1} = \vec{b}^n - (\nabla^2 F^n)^{-1} (\nabla F^n)$$

όπου με n συμβολίζεται το τρέχον βήμα της μεθόδου Newton. Με τον ίδιο τρόπο, υπολογίζονται οι παράγωγοι του νέου κύκλου και ξανα-ανανεώνεται η μορφή του αγωγού μέχρι σημείο σύγκλισης, δηλαδή μέχρι να σταθεροποιηθεί σε κάποια τιμή η συνάρτηση στόχος.

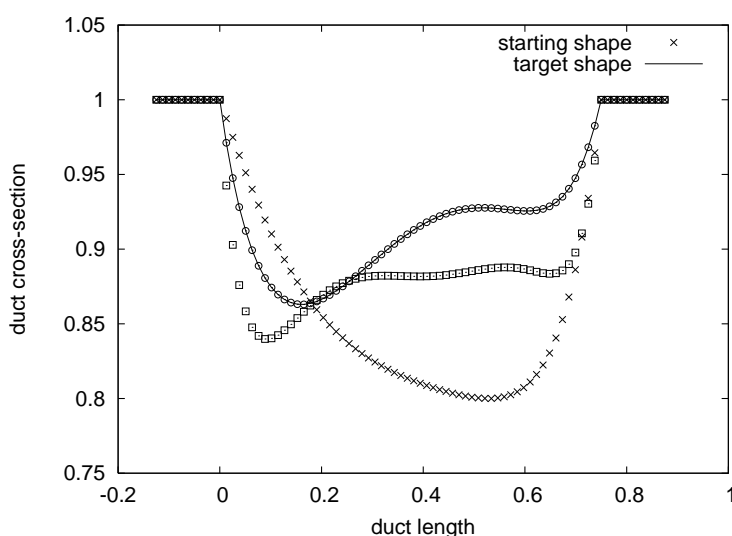
Ωστόσο, σκοπός της εφαρμογής αυτής, όπως ήδη αναφέρθηκε, είναι να συγκριθεί η μέθοδος Newton με τη μέθοδο της απότομης καθόδου. Πιο αναλυτικά, θα διαπιστωθεί η ταχύτητα της Newton μεθόδου σε σχέση με αυτήν της απότομης καθόδου, καθώς και η ακρίβεια του αποτελέσματος, παρόλη την πολυπλοκότητα που απαιτείται στις πράξεις για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου. Υπενθυμίζεται ότι για την μέθοδο της απότομης καθόδου, η πρώτη παράγωγος έχει υπολογιστεί με βάση τη συζυγή μέθοδο και ότι η ανανέωση της μορφής του αγωγού γίνεται σύμφωνα με τη σχέση:

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

όπου η το βήμα της μεθόδου, ώστε να είναι ελεγχόμενη η μεταβολή της γεωμετρίας από βήμα σε βήμα.

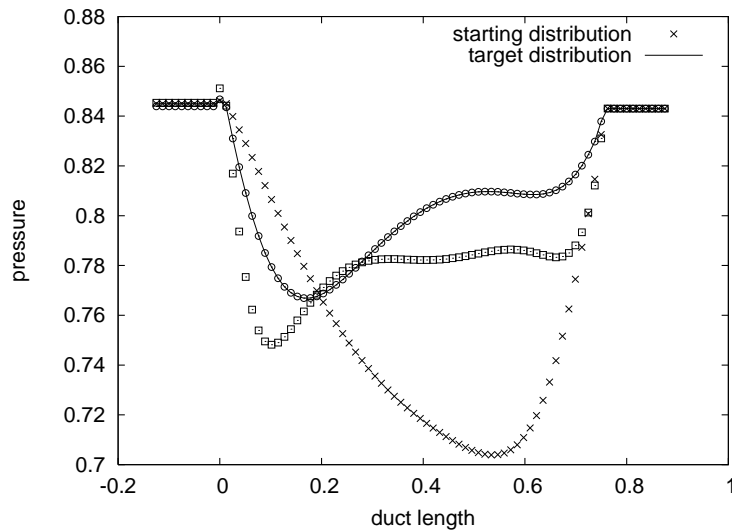
Στην παρούσα εφαρμογή θα μελετηθεί ο αντίστροφος σχεδιασμός ενός υποηχητικού αγωγού, με ισεντροπικό αριθμό Mach εισόδου $M_{2, is} = 0.5$. Η πίεση στόχος προήρθε από επίλυση του ευθέως προβλήματος με πρώτης τάξης ακρίβεια για συγκεκριμένη γεωμετρία (μοντελοποίηση του S με πολυώνυμο *Bezier* ίδιας τάξης). Στην συνέχεια για επαλήθευση της μεθόδου, ξεκινάει ο αντίστροφος σχεδιασμός δίνοντας στα σημεία *Bezier* τιμές πολύ διαφορετικές από αυτές του στόχου. Τέλος, υπενθυμίζεται ότι τα σημεία *Bezier* εδώ μοντελοποιούν το $S(x)$ και όχι την καμπύλη γραμμή που εκ περιστροφής δημιουργεί το σχήμα του τοιχώματος του αγωγού.

Στο σχήμα 5.1 παρουσιάζεται η μορφολογία του αγωγού, δηλαδή η διατομή του σε κάθε θέση στην αρχή της διαδικασίας βελτιστοποίησης, σε ένα ενδιάμεσο βήμα και μετά το πέρας της διαδικασίας με τη μέθοδο *Newton*. Επιπλέον, με συνεχή γραμμή απεικονίζεται ο αγωγός στόχος ενώ με μαύρα τετραγωνισμένα σημεία ο αγωγός που προέκυψε μετά την ελαχιστοποίηση. Εύκολα παρατηρείται η πλήρης ταύτιση των δύο γεωμετριών. Στο σχήμα 5.2 παρουσιάζεται η κατανομή πίεσης για τις μορφολογίες του σχήματος 5.1, όπου φαίνεται ξεκάθαρα ότι η βέλτιστη κατανομή πίεσης ταυτίζεται πλήρως με την κατανομή-στόχο του προβλήματος.



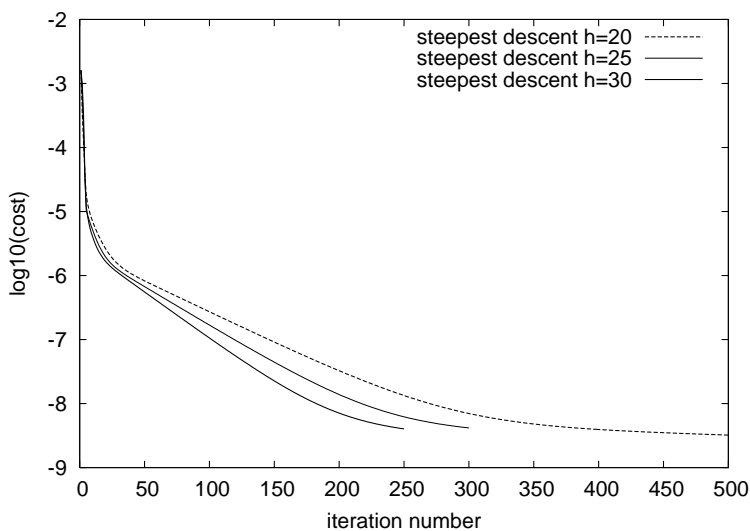
Σχήμα 5.1: Οριζόντιος άξονας: μήκος του αγωγού. Κατακόρυφος άξονας: διατομή S του αγωγού. Η μορφολογία του αγωγού κατά το πρώτο βήμα (*starting shape*), σε ένα ενδιάμεσο στάδιο και μετά το πέρας της διαδικασίας (ελαχιστοποίηση συνάρτησης στόχου), μαζί με την μορφολογία του αγωγού-στόχου (*target shape*).

5-4ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.



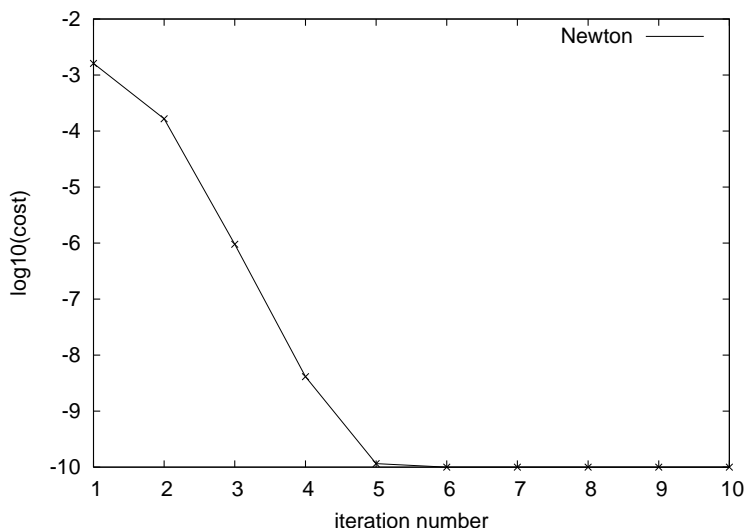
Σχήμα 5.2: Οριζόντιος άξονας: μήκος του αγωγού. Κατακόρυφος άξονας: στατική πίεση. Η κατανομή πίεσης κατά το πρώτο βήμα (starting distribution), σε ένα ενδιάμεσο στάδιο και μετά το πέρας της διαδικασίας (ελαχιστοποίηση συνάρτησης στόχου), μαζί με την κατανομή πίεσης - στόχου (target distribution).

Στο σχήμα 5.3 απεικονίζεται η πορεία της σύγκλισης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου για διαφορετικό βήμα. Στην παρούσα διπλωματική εργασία, ύστερα από διερεύνηση που έγινε όπως αποδεικνύει και το παρακάτω σχήμα, επιλέχτηκε για τη σύγκριση με τη μέθοδο Newton η χρήση της απότομης καθόδου με βήμα 30. Σε περίπτωση που επιλεγεί βήμα μεγαλύτερο του 30, η μέθοδος οδηγεί σε απόκλιση.



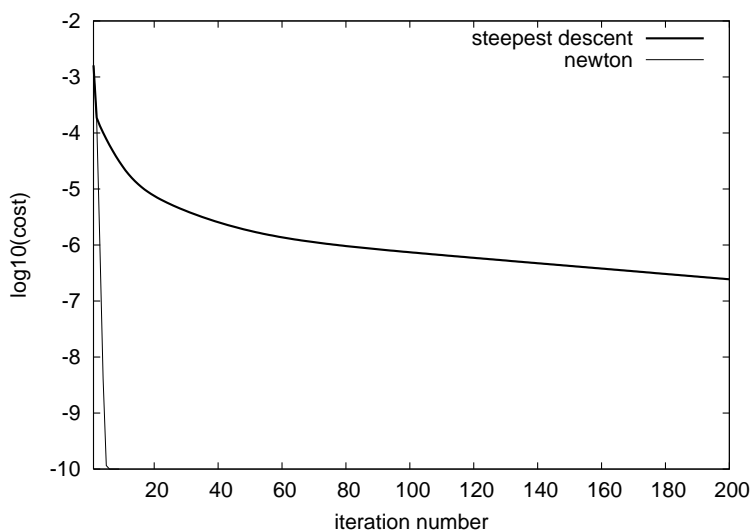
Σχήμα 5.3: Η πορεία της σύγκλισης με τη μέθοδο απότομης καθόδου για διάφορα βήματα. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου.

Στη συνέχεια παρουσιάζεται στο σχήμα 5.4 η πορεία σύγκλισης με τη μέθοδο Newton, η οποία οδηγεί σε μείωση της τιμής της συνάρτησης στόχου κατά 7 τάξεις μεγέθους μέσα σε μόλις 6 επαναλήψεις!



Σχήμα 5.4: Η πορεία της σύγκλισης με τη μέθοδο Newton. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου.

Στη συνέχεια, στο σχήμα 5.5 παρουσιάζεται μαζί η πορεία σύγκλισης των δύο μεθόδων.

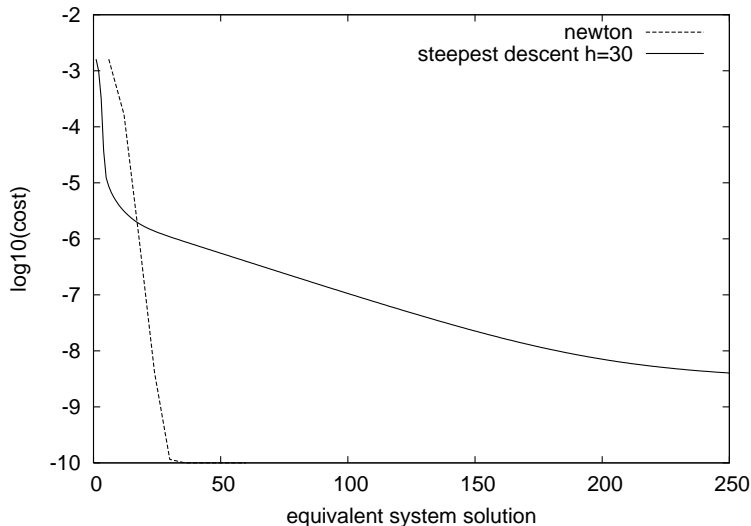


Σχήμα 5.5: Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου. Γίνεται η σύγκριση της πορείας της σύγκλισης για τη μέθοδο Newton και αυτής της απότομης καθόδου .

Με τον τρόπο αυτό γίνεται εμφανές ότι ο αριθμός των επαναλήψεων με τη μέθοδο Newton είναι αισθητά μικρότερος από αυτών της απότομης καθόδου. Ωστόσο πρέπει

5-6 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

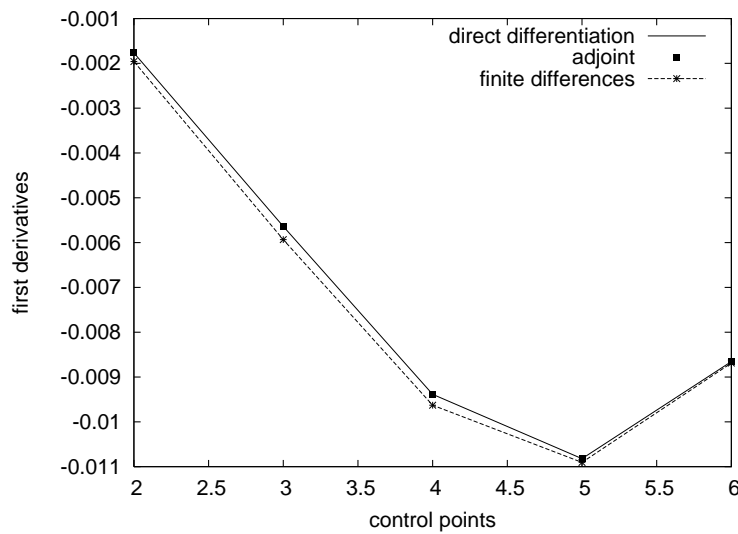
να ληφθεί υπόψη και το υπολογιστικό κόστος που απαιτεί η κάθε μέθοδος για τη κάθε επανάληψη, αφού μία επανάληψη της μεθόδου Newton κάνει $N + 1$ φορές περισσότερο. Επομένως, στο σχήμα 5.6 παρατίθεται μία πιο ρεαλιστική σύγκριση της αποδοτικότητας των δύο μεθόδων.



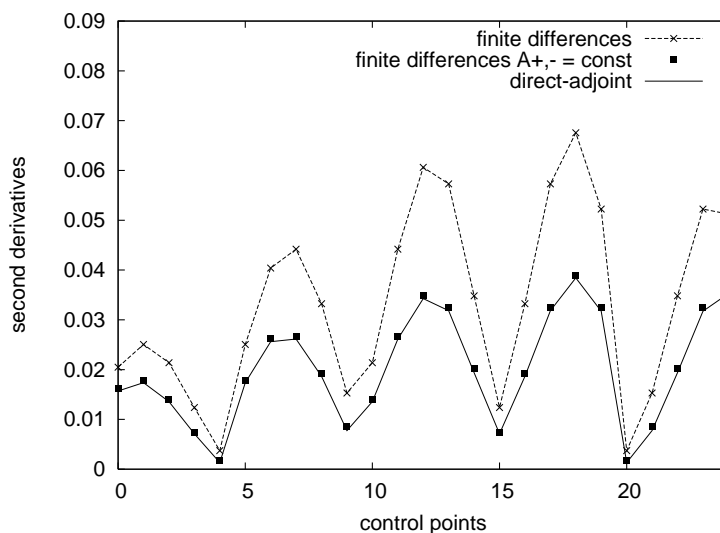
Σχήμα 5.6: Σύγκριση μεθόδου Newton και απότομης καθόδου, λαμβάνοντας υπόψη και το υπολογιστικό κόστος. Οριζόντιος άξονας: ισοδύναμες επιλύσεις ροής. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου.

Από το παραπάνω σχήμα γίνεται εμφανές ότι συμφέρει μεν η μέθοδος Newton, αρκεί να έχουμε μικρό αριθμό μεταβλητών σχεδιασμού. Διότι, όσο αυξάνονται τα σημεία ελέγχου N τόσο υπολογιστικά ακριβότερη γίνεται η μέθοδος Newton.

Για επαλήθευση των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης, που προέκυψαν με ευθεία διαφόριση και χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής αντίστοιχα, πραγματοποιήθηκε δεύτερος υπολογισμός αυτών, με χρήση σχήματος κεντρικής διαφόρισης δεύτερης τάξης ακρίβειας, όπως αναφέρθηκε διεξοδικά σε προηγούμενα κεφάλαια. Επομένως, στο σχήμα 5.7 και 5.8 παρουσιάζονται οι τιμές των πρώτων παραγώγων και του Hessian μητρώου, όπως αυτές προέκυψαν με ευθεία διαφόριση και τη διακριτή συζυγή μέθοδο αντίστοιχα (DD-AM), συγκρινόμενες πάντα με τις τιμές των παραγώγων που προέκυψαν με χρήση πεπερασμένων διαφορών για τον αρχικό αγωγό (σχήμα 5.1).



Σχήμα 5.7: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφόριση (συνεχής γραμμή), με τη διακριτή συζυγή τεχνική (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών (διακεκομμένη γραμμή). Οι παράγωγοι που παρουσιάζονται αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1 και η οποία είναι μακριά από το στόχο.



Σχήμα 5.8: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία του 5×5 συμμετρικού Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι δεύτερες παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής, (συνεχής γραμμή), πεπερασμένες διαφορές με A^+ , A^- σταθερό συναρτήσεως της ροής (μαύρα τετραγωνάκια) και πεπερασμένες διαφορές με μεταβαλλόμενο A^+ , A^- (διακεκομμένη γραμμή). Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

5-8ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Ωστόσο θα πρέπει να δοθούν κάποιες διευκρινίσεις. Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν στο κεφάλαιο 2 για τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$, υπετέθει ότι ισχύει η ακόλουθη σχέση:

$$\frac{\partial A^+}{\partial \vec{U}} = 0 \quad \frac{\partial A^-}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (5.1)$$

δηλαδή, θεωρήθει ότι το μητρώο A^+ και A^- , δεν μεταβάλλεται συναρτήσει του \vec{U} .

Η υπόθεση αυτή δεν προκαλεί ουσιαστικές επιπτώσεις στον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου. Αντιθέτως διευκολύνει στον υπολογισμό του μητρώου $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$. Η πολύ μικρή επίδραση που έχει η υπόθεση αυτή φαίνεται και στο σχήμα 5.7 όπου συγκρίνεται η πρώτη παράγωγος υπολογισμένη με ευθεία διαφόριση, με αυτή των πεπερασμένων διαφορών, όπου το A μεταβάλλεται συναρτήσει της ροής. Για λόγους πληρότητας, παρουσιάζεται στο σχήμα 5.7 και η πρώτη παράγωγος υπολογισμένη με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, όπως ακριβώς χρησιμοποιείται στη μέθοδο της απότομης καθόδου.

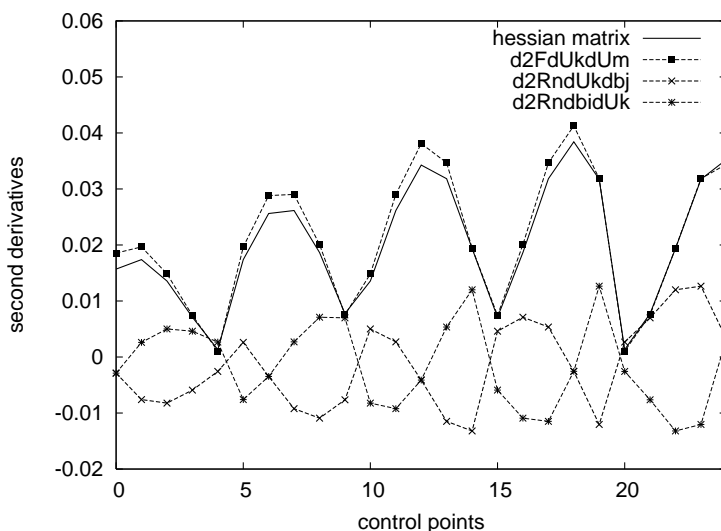
Ωστόσο, η υπόθεση αυτή δεν έχει την ίδια αμελητέα σημασία κατά τον υπολογισμό των παραγώγων δεύτερης τάξης. Το συμπέρασμα αυτό, παρουσιάζεται με σαφήνεια στο σχήμα 5.8, όπου γίνεται η σύγκριση παραγώγων δεύτερης τάξης υπολογισμένων με τη διακριτή συζυγή τεχνική (DD-AM) έναντι αυτών που προέκυψαν με χρήση πεπερασμένων διαφορών με μεταβαλλόμενο A (A^+ , A^-). Ωστόσο, επειδή είναι πολύ δύσκολο να ακυρωθεί η παραδοχή (5.1) λόγω πολυπλοκότητας των πράξεων, τροποποιούνται με τέτοιο τρόπο οι πεπερασμένες διαφορές ώστε να είναι εφικτό να παγώνεται ή να αφήνεται ελεύθερος ο όρος αυτός. Με τον τρόπο αυτό διαπιστώνεται ότι υπάρχει πλήρη ταύτιση των παραγώγων της διακριτής συζυγούς μεθόδου με εκείνων που προέκυψαν από τροποποιημένες πεπερασμένες διαφορές, έχοντας λάβει υπόψη την θεώρηση ότι το A^+ και A^- παραμένει σταθερό (σχήμα 5.8).

Επομένως, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, είναι εμφανής η ορθότητα του υπολογισμού του Hessian μητρώου. Υπενθυμίζεται ότι η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης στόχου, υπολογισμένη με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, έχοντας γνωστή την τιμή της πρώτης παραγώγου με ευθεία διαφόριση, υπολογίζεται από τη σχέση:

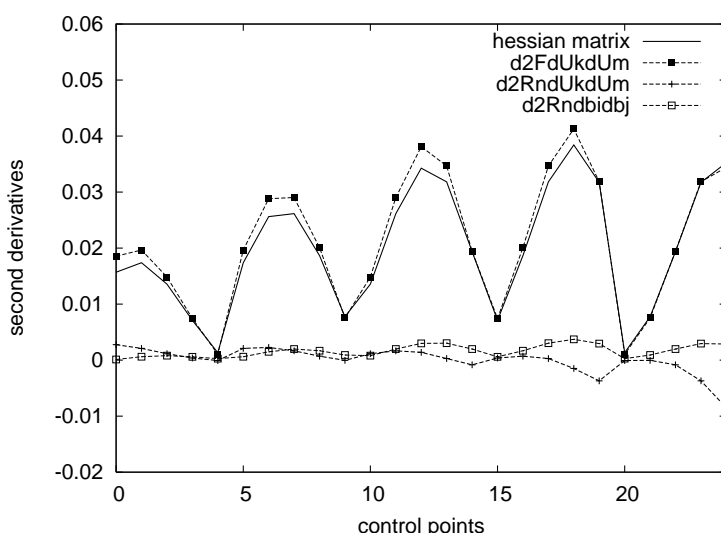
$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} = & \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} + \\ & \left[\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} + \Psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \right] \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j} \end{aligned}$$

Πιο αναλυτικά, το Hessian μητρώο προκύπτει ως το άθροισμα των παραπάνω όρων. Κρίνεται απαραίτητο να σχολιαστεί η επιρροή του κάθε ένα από τους παραπάνω όρους στη τελική τιμή του Hessian μητρώου.

Στο σχήμα 5.9 και 5.10 φαίνεται για την αρχική γεωμετρία του αγωγού, η καθοριστική επιρροή του όρου $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$.



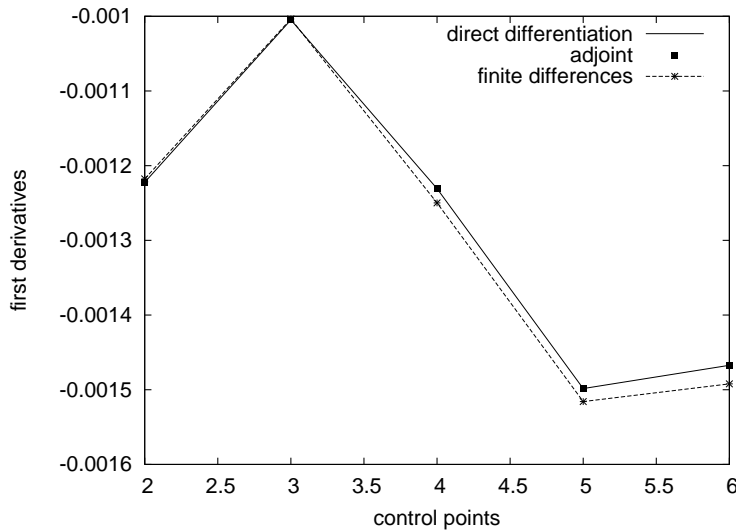
Σχήμα 5.9: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Όροι οι οποίοι συγκρίνονται στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.



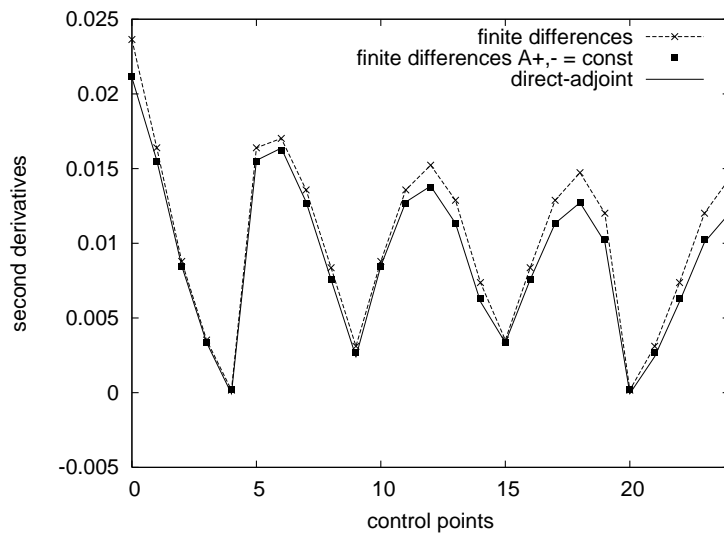
Σχήμα 5.10: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι όροι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

5-10 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

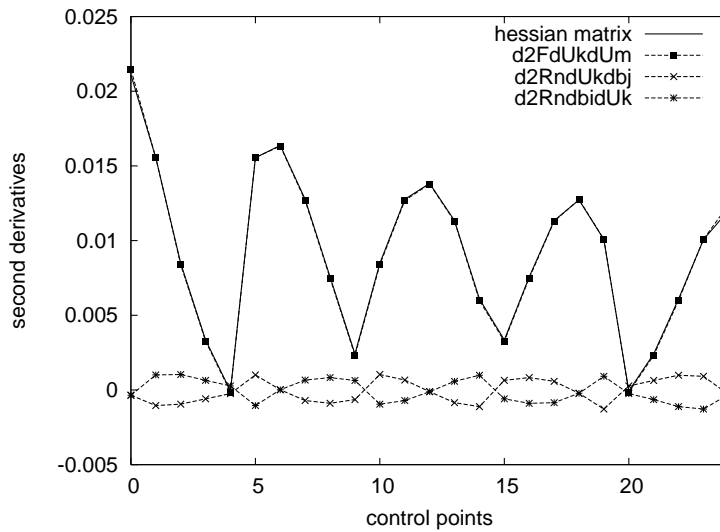
Αντίστοιχα στα σχήματα 5.11-5.14 παρουσιάζονται όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, αλλά για την ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού, σχήμα 5.1.



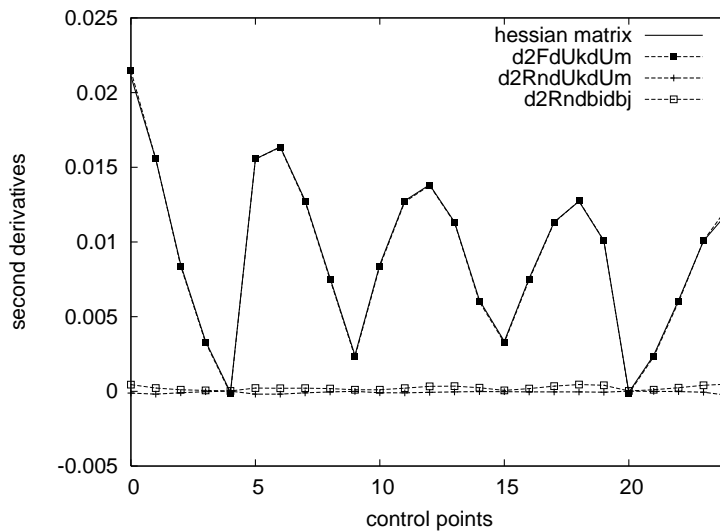
Σχήμα 5.11: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφύριση (συνεχής γραμμή), με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών (διακεκομμένη γραμμή). Οι παράγωγοι που παρουσιάζονται, αναφέρονται στην ενδιάμεση γεωμετρία.



Σχήμα 5.12: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία 5×5 συμμετρικού Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι δεύτερες παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής (συνεχής γραμμή), με χρήση πεπερασμένων διαφορών με σταθερό A^+, A^- (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών με μεταβαλλόμενο A^+, A^- συναρτήσει της ροής. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία.



Σχήμα 5.13: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Όροι οι οποίοι συγκρίνονται στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

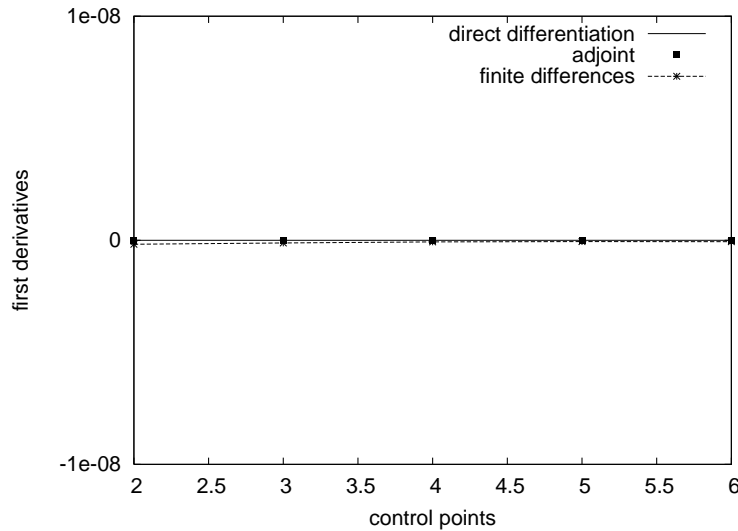


Σχήμα 5.14: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι όροι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

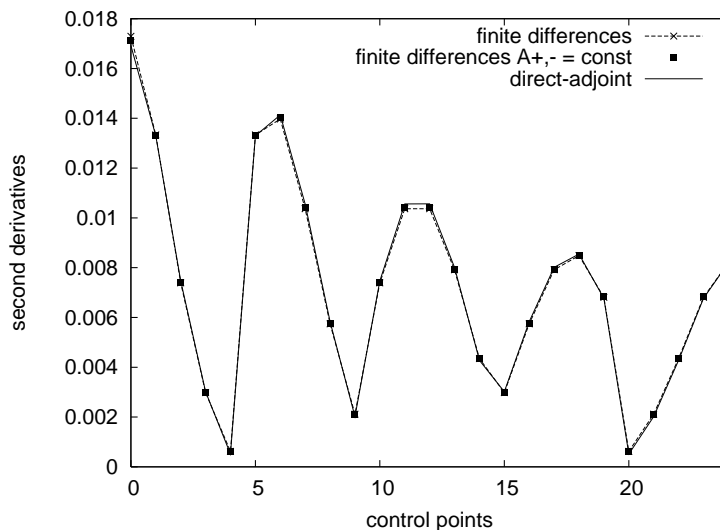
Στα σχήματα 5.13 και 5.14 παρουσιάζεται η επιρροή των όρων στη τελική τιμή του Hessian μητρώου. Είναι εμφανές ότι όσο πλησιάζουμε στη βέλτιστη λύση οι όροι $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$, αρχίζουν να γίνονται αμελητέοι.

5-12 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Αντίστοιχα στα σχήματα 5.15-5.17 παρουσιάζονται όσα αναφέρθηκαν παραπάνω για την βέλτιστη γεωμετρία του αγωγού, σχήμα 5.1.

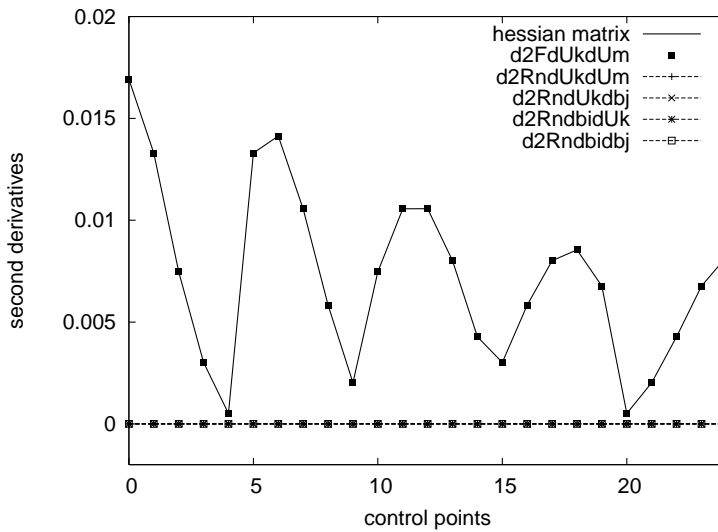


Σχήμα 5.15: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφοράριση (συνεχής γραμμή), με χρήση συζυγούς μεθόδου (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών (διακεκομμένη γραμμή). Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.



Σχήμα 5.16: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι δεύτερες παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής (συνεχής γραμμή), με χρήση πεπερασμένων διαφορών με σταθερό A^+ , A^- (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών με μεταβαλλόμενο A^+ , A^- συναρτήσει της ροής. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

5.3. ΔΕΥΤΕΡΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΚΡΙΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΜΕΘΟΔΟΥ. 5-13



Σχήμα 5.17: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δευτέρων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Σχεδιάζονται και συγκρίνονται οι όροι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην βέλτιστη γεωμετρία, όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 5.1.

Τέλος, στο σχήμα 5.17, το οποίο αναφέρεται στη βέλτιστη γεωμετρία του αγωγού όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 5.1, είναι εμφανές ότι στη τελική τιμή του Hessian μητρώου έχει επίδραση μόνο ο όρος $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$. Συμπέρασμα λογικό, αφού το $\vec{\psi}$ έχει μηδενική τιμή όταν τελικά το πρόβλημά μας συγκλίνει.

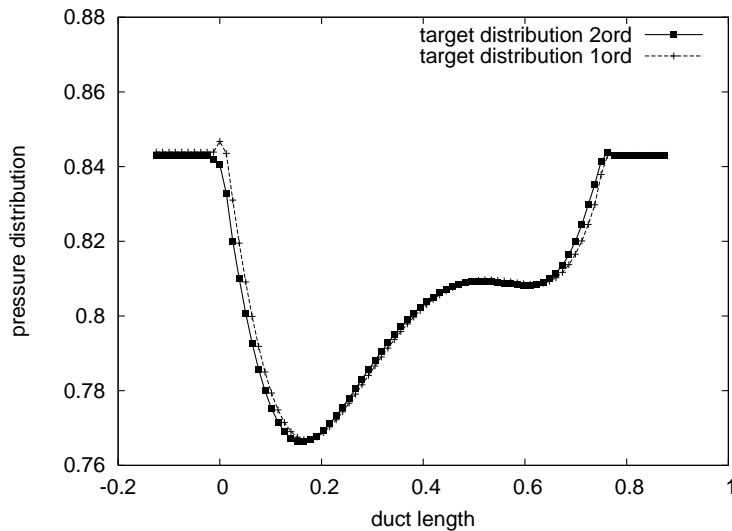
5.3 Δεύτερος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.

Στην παρούσα ενότητα, χρησιμοποιήθηκε ακρίβεια 2ης τάξης για να επιλυθεί η εφαρμογή της προηγούμενης παραγράφου με τη μέθοδο Newton. Δηλαδή, επιλύεται το ευθύ πρόβλημα με 2ης τάξης ακρίβεια (εύρεση πεδίου ροής \vec{U}) και χρησιμοποιείται το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ ως ακριβή παραγωγή του \vec{R} .

Σκοπός της εφαρμογής αυτής, είναι να επιτευχθεί η εύρεση αγωγού που να ικανοποιεί συγκεκριμένη κατανομή πίεσης. Η πίεση-στόχος προήρθε από επίλυση του ευθέως προβλήματος με 2ης τάξης ακρίβεια για γεωμετρία-στόχου (σημεία Bezier) ίδια με αυτήν της πρώτης τάξης ακρίβεια. Ωστόσο, είναι προφανές ότι για το ίδιο σχήμα αγωγού-στόχου η πίεση-στόχος είναι διαφορετική για την εφαρμογή με 1ης και 2ης τάξης ακρίβεια (σχήμα 5.18). Δηλαδή, φαίνεται η αδυναμία της πρώτης τάξης να προσεγγίσει για την ίδια πίεση-στόχο, τον ίδιο αγωγό (ίδια σημεία Bezier). Επομένως, επειδή με 2η τάξη επιτυγχάνονται αποτελέσματα πιο κοντά στην πραγματικότητα λόγω καλύτερης

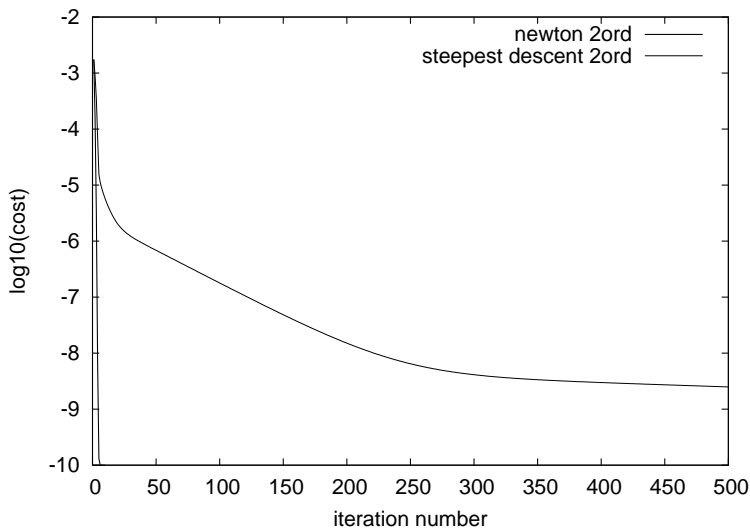
5-14 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

ακρίβειας, είναι εμφανές γιατί δεν χρησιμοποιείται στην πράξη επίλυση του ευθέως προβλήματος με πρώτης τάξης ακρίβεια.



Σχήμα 5.18: Σύγκριση πίεσης - στόχου για ίδια γεωμετρία - στόχου αγωγού για 1ης και 2ης τάξης ακρίβεια. Οριζόντιος άξονας: μήκος του αγωγού. Κατακόρυφος άξονας: στατική πίεση αγωγού. Η κλίμακα είναι τέτοια που αποκρύπτει τις με άλλη κλίμακα " ορατές " διαφορές.

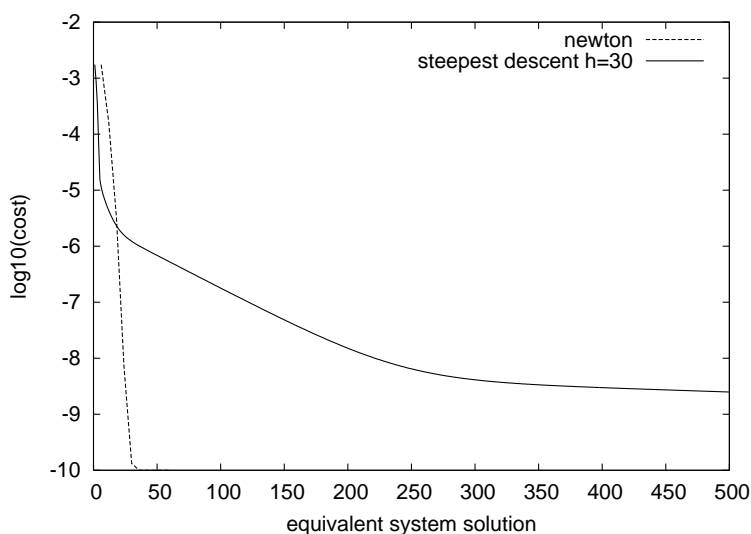
Στη συνέχεια, παρουσιάζεται στο σχήμα 5.19 η πορεία σύγκλισης της Newton μεθόδου με 2ης τάξης ακρίβεια και συγκρίνεται με αυτήν της απότομης καθόδου ίδιας τάξης. Στην συγκεκριμένη εφαρμογή χρησιμοποιήθηκε βήμα=30.



Σχήμα 5.19: Σύγκριση της πορείας σύγκλισης της Newton μεθόδου για 2η τάξη ακρίβεια και της απότομης καθόδου για ίδια τάξη με βήμα $\eta=30$. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης στόχου.

5.3. ΔΕΥΤΕΡΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΚΡΙΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΜΕΘΟΔΟΥ.5-15

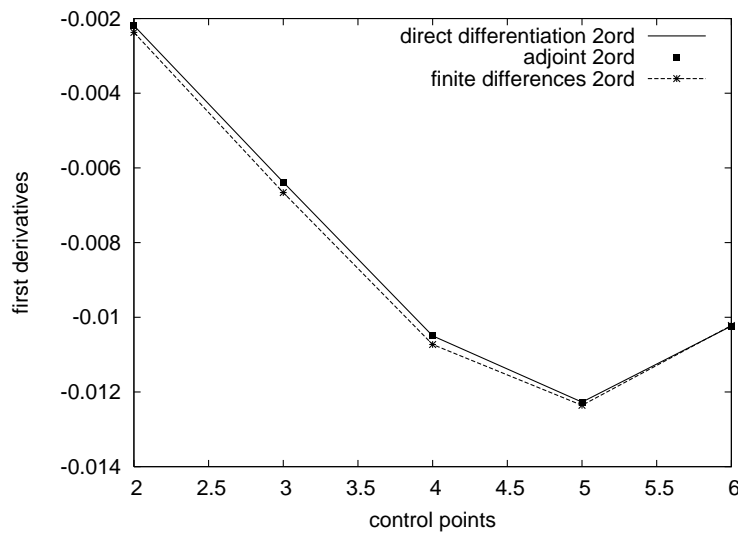
Στο παραπάνω σχήμα, φαίνεται ξεκάθαρα ότι με τη μέθοδο Newton ο αριθμός επαναλήψεων είναι αρκετά μικρότερος από τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται για τη σύγκλιση με τη μέθοδο της απότομης καθόδου. Ωστόσο, υπενθυμίζεται ότι δεν είναι ίδιο το υπολογιστικό κόστος με τη μία και την άλλη μέθοδο. Επομένως, κρίνεται απαραίτητη η ύπαρξη ενός πιο ρεαλιστικού διαγράμματος (σχήμα 5.20) που να συγκρίνει στο παρόν πρόβλημα τις δύο μεθόδους, λαμβάνοντας υπόψη και το υπολογιστικό (CPU) κόστος.



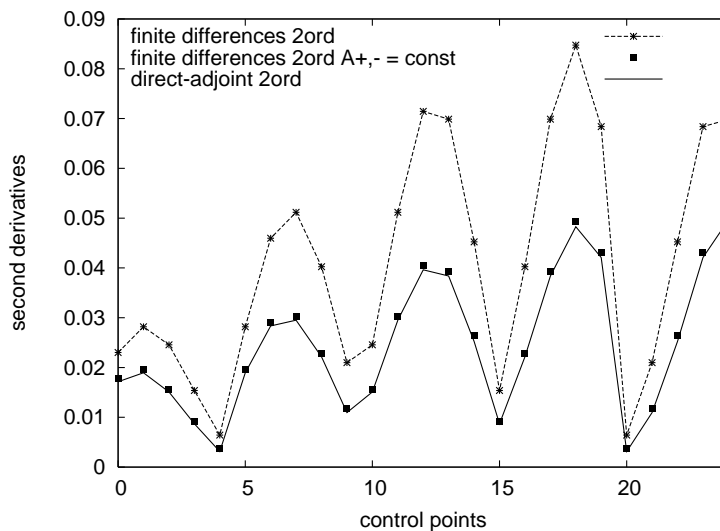
Σχήμα 5.20: Σύγκριση μεθόδου Newton για 2η τάξη ακρίβεια και απότομης καθόδου για ίδια τάξη με βήμα $h=30$, λαμβάνοντας υπόψη το υπολογιστικό κόστος. Οριζόντιος άξονας: ισοδύναμες επιλύσεις ροής. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης στόχου.

Στην παρούσα εφαρμογή είναι προφανής η υπεροχή της μεθόδου Newton έναντι της μεθόδου της απότομης καθόδου, δεδομένου του μικρού αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού. Ωστόσο, όσο σε ένα πρόβλημα, οι μεταβλητές ελέγχου N αυξάνονται, τόσο αυξάνεται και το υπολογιστικό κόστος για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου, επομένως και της μεθόδου Newton.

Στη συνέχεια, παρουσιάζονται για την αρχική γεωμετρία του αγωγού, τα διαγράμματα πρώτης και δεύτερης παράγωγου, σε 2ης τάξης ακρίβεια. Πιο αναλυτικά, στο σχήμα 5.21 απεικονίζονται οι τιμές των πρώτων παραγώγων υπολογισμένες με ευθεία διαφοράση συγκρινόμενες με αυτές της διακριτής συζυγούς τεχνικής και των πεπερασμένων διαφορών, ενώ παρουσιάζονται στο σχήμα 5.22 οι τιμές των δεύτερων παραγώγων υπολογισμένες με την διακριτή συζυγή μέθοδο (DD-AM) με αυτές των πεπερασμένων διαφορών με μεταβαλλόμενο και μη A (A^+ , A^-).



Σχήμα 5.21: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφόριση (συνεχής γραμμή), με τη διακριτή συζυγή μέθοδο (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια δεύτερης τάξης. Οι παράγοντες που παρουσιάζονται αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία, η οποία είναι μακριά από το στόχο.

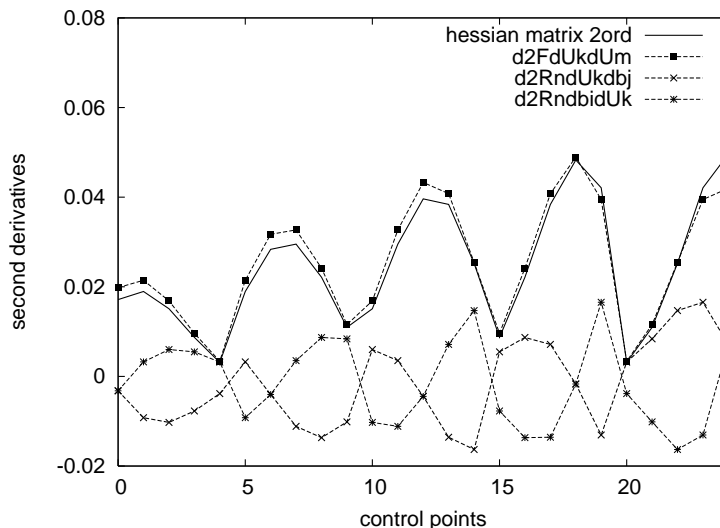


Σχήμα 5.22: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία 5×5 συμμετρικού Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής (συνεχής γραμμή), πεπερασμένες διαφορές με A^+, A^- σταθερό συναρτήσε της ροής (μαύρα τετραγωνάκια) και πεπερασμένες διαφορές με μεταβαλλόμενο A^+, A^- (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

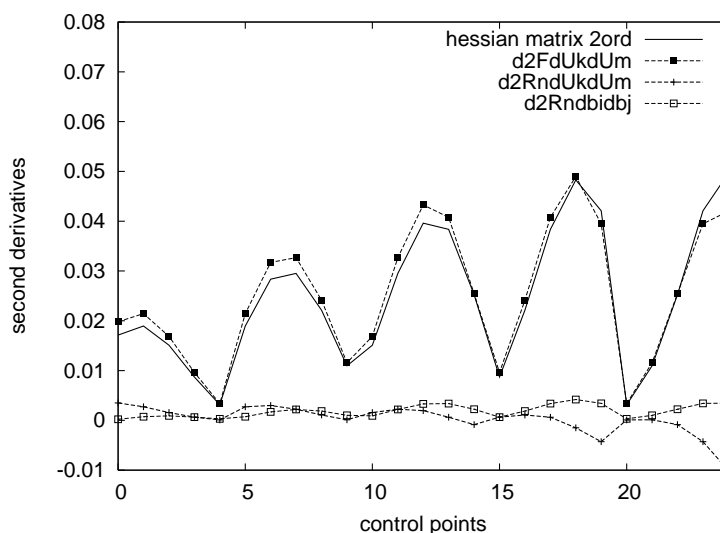
Όπως τονίστηκε και στην πρώτη τάξη ακρίβεια εφαρμογή, το συνολικό μητρώο Hess προκύπτει ως άθροισμα πέντε όρων. Επομένως, στο σχήμα 5.23 και 5.24 περιγράφεται

5.3. ΔΕΥΤΕΡΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΚΡΙΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΜΕΘΟΔΟΥ.5-17

η επιρροή του κάθε ένα όρου απο αυτούς στη τελική τιμή του Hessian μητρώου για την αρχική γεωμετρία του αγωγού.



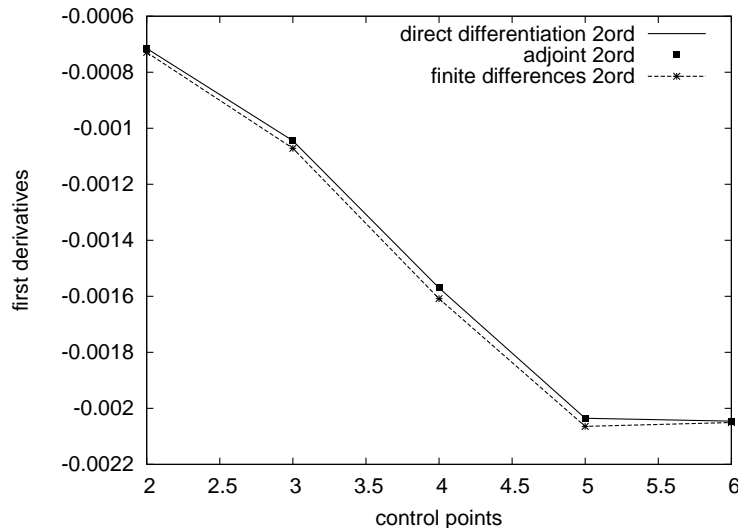
Σχήμα 5.23: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δευτέρων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου για 2ης τάξης ακρίβεια. Όροι οι οποίοι συγκρίνονται στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$.



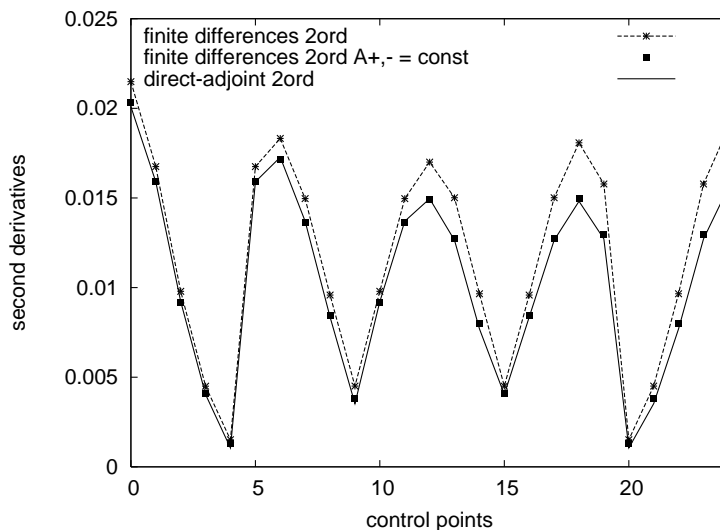
Σχήμα 5.24: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δευτέρων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου για 2ης τάξης ακρίβεια. Παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι όροι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

5-18ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Αντίστοιχα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, παρουσιάζονται τα σχήματα 5.25-5.28 για την ενδιάμεση θέση:

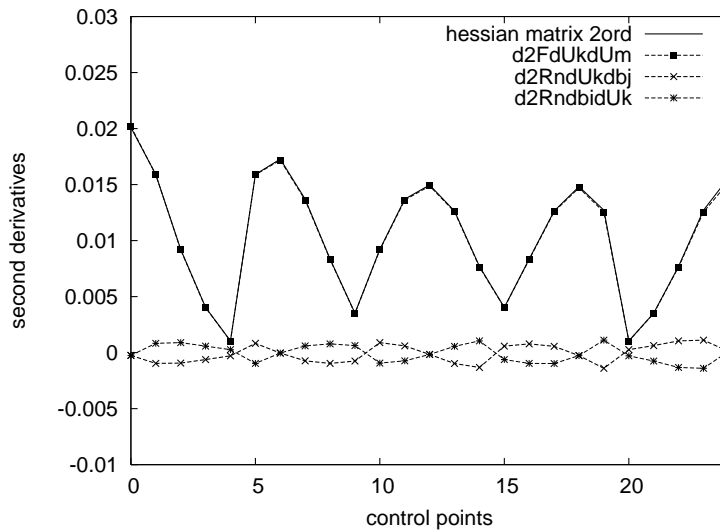


Σχήμα 5.25: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφύριση (συνεχής γραμμή), με χρήση συζυγούς τεχνικής (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφορών (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια δεύτερης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού

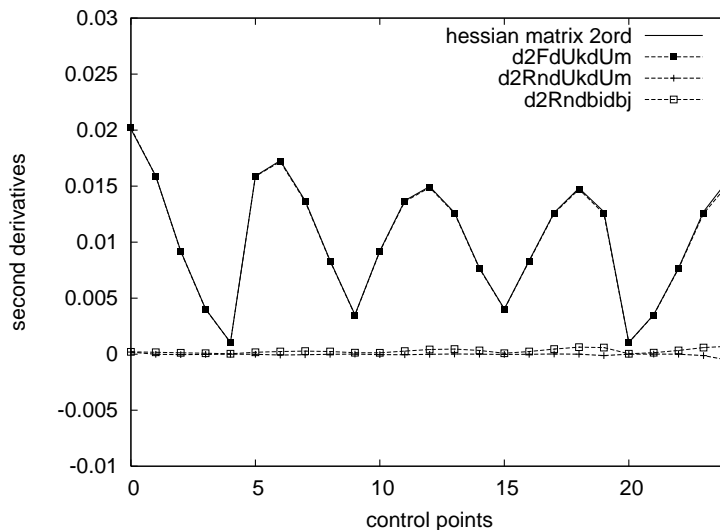


Σχήμα 5.26: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι δεύτερες παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικής (συνεχής γραμμή), πεπερασμένες διαφορές με A^+, A^- σταθερό συναρτήσει της ροής (μαύρα τετραγωνάκια) και πεπερασμένες διαφορές με μεταβαλλόμενο A^+, A^- (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού.

5.3. ΔΕΥΤΕΡΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΚΡΙΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΜΕΘΟΔΟΥ.5-19

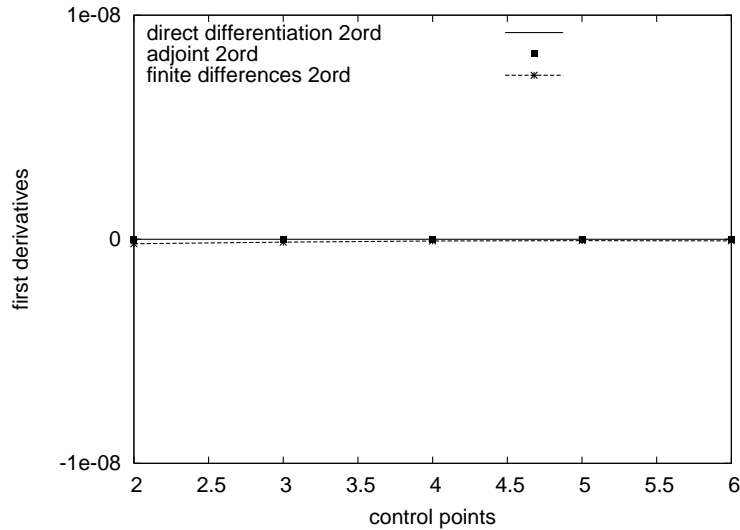


Σχήμα 5.27: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου για 2ης τάξης ακρίβεια. Όρους τους οποίους συγκρίνουμε στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία.

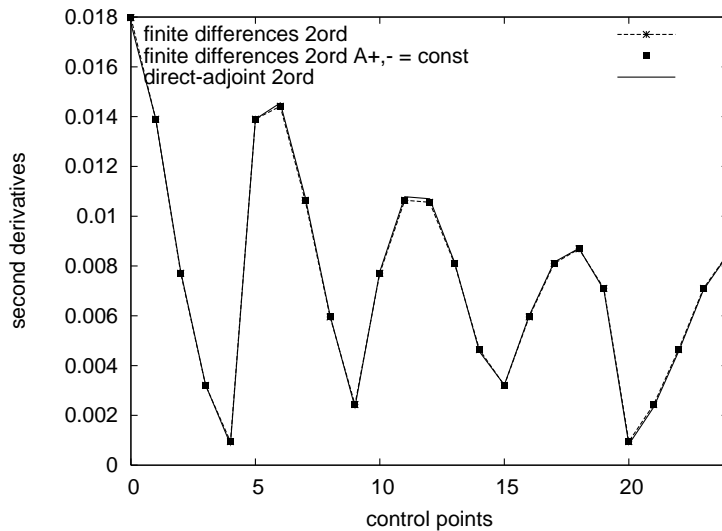


Σχήμα 5.28: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου για 2ης τάξης ακρίβεια. Όρους τους οποίους συγκρίνουμε στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία.

ενώ τα σχήματα 5.29-5.31 για την βέλτιστη γεωμετρία του αγωγού.

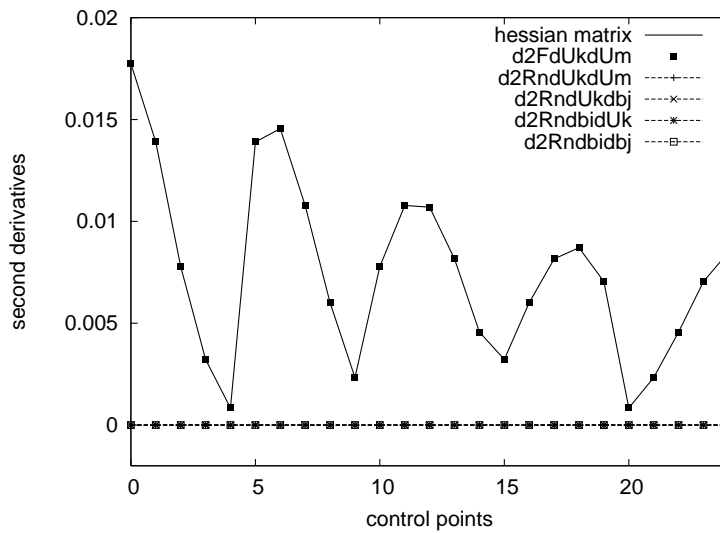


Σχήμα 5.29: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με ευθεία διαφύριση (συνεχής γραμμή), χρήση συζυγούς τεχνικήσ(μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση πεπερασμένων διαφωρών (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια δεύτερης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη γεωμετρία.



Σχήμα 5.30: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς τεχνικήσ (συνεχής γραμμή), πεπερασμένες διαφωρές με A^+, A^- σταθερό συναρτήσει της ροής (μαύρα τετραγωνάκια) και πεπερασμένες διαφωρές με μεταβαλλόμενο A^+, A^- (διακεκομμένη γραμμή) για ακρίβεια 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη γεωμετρία.

5.3. ΔΕΥΤΕΡΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΚΡΙΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΜΕΘΟΔΟΥ.5-21



Σχήμα 5.31: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές όρων από τους οποίους εξαρτάται η τελική τιμή των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου για 2ης τάξης ακρίβεια. Όρους τους οποίους συγκρίνουμε στο παρόν σχήμα με το Hessian μητρώο είναι οι ακόλουθοι: $\frac{\partial^2 F}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} \frac{dU_k}{db_i}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} \frac{dU_k}{db_i} \frac{dU_m}{db_j}$, $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial b_j}$ και $\psi_n^T \frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} \frac{dU_k}{db_j}$. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην βέλτιστη γεωμετρία.

5.4 Τρίτος υπολογισμός διακριτής συζυγούς μεθόδου.

Στους προηγούμενους υπολογισμούς, κατά την επίλυση της εξίσωσης της ροής σε δέλτα διατύπωση:

$$\left[I \frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right] \delta \vec{U} = -\vec{R}$$

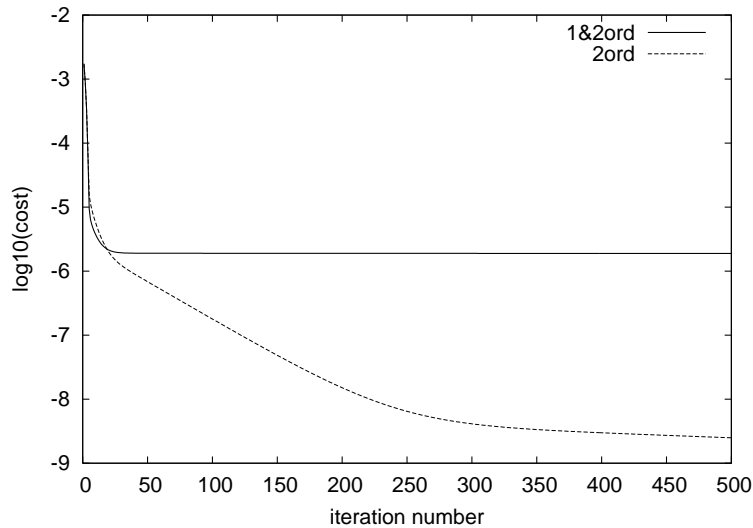
χρησιμοποιήθηκε το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ ως ακριβές αποτέλεσμα της παραγώγισης του δεξιού μέλους της δέλτα διατύπωσης. Ωστόσο, θα μπορούσε να υπολογιστεί το αριστερό μέλος της εξίσωσης προσεγγιστικά, αφού το δεξί μέλος είναι αυτό που καθορίζει την ακρίβεια. Επομένως, στη παρούσα ενότητα, θα επιλυθούν οι εξισώσεις ροής για ακρίβεια 2ης τάξης (υπολογισμός του \vec{R}), ενώ το αριστερό μέλος (μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$) θα υπολογιστεί για ακρίβεια πρώτης τάξης. Με τον τρόπο αυτό, επιδιώκεται η εξοικονόμηση υπολογιστικού κόστους, τόσο στην ευθεία διαφόριση όσο και στο συζυγές πρόβλημα, αφού από αναγκαιότητα επίλυσης πενταδιαγώνιου μπλοκ συστήματος προκύπτει η επίλυση ενός τριδιαγώνιου μπλοκ.

Σκοπός της παρούσας ενότητας είναι αφού επιλυθεί με συνδυασμό τάξεων, το ίδιο πρόβλημα που περιγράφηκε στις προηγούμενες παραγράφους, να συγκριθούν τα αποτελέσματά με τα ήδη υπάρχοντα από την εφαρμογή για 2 τάξης ακρίβεια. Εξάλλου, είναι προφανές ότι τα αποτελέσματα που προέκυψαν με 2ης τάξης ακρίβεια είναι πιο κοντά στην πραγματικότητα από αυτά με πρώτης τάξης, όποτε αποτελούν και καλύτερο μέτρο σύγκρισης αυτής της μεθόδου. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων αποσκοπεί:

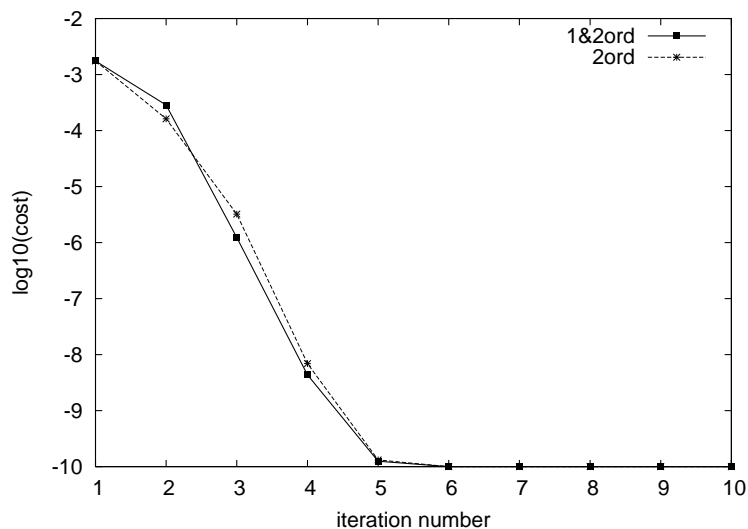
- Στον έλεγχο της ακρίβειας των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης.
- Στον έλεγχο της ταχύτητας σύγκλισης της απότομης καθόδου, καθώς και της μεθόδου Newton.

Αρχικά παρουσιάζονται τα σχήματα 5.32 και 5.33. Ωστόσο, αξίζει να παρατηρηθεί ότι κατά την επίλυση του προβλήματος με συνδυασμό τάξεων το ευθύ πρόβλημα επιλύεται με 2ης τάξης ακρίβεια, επομένως σε αντίθεση με τα όσα αναφέρθηκαν για πρώτης τάξης ακρίβεια, η κατανομή πίεσης στόχου θα είναι ίδια με αυτήν της 2ης τάξης για το ίδιο σχήμα αγωγού. Επομένως, είναι προφανής τα πλεονεκτήματα της μεθόδου συνδυασμού τάξεων έναντι της 1ης τάξης ακρίβειας. Ωστόσο, όπως θα αποδειχθεί και στη συνέχεια, οι παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης, που προκύπτουν από τον συνδυασμό τάξεων είναι διαφορετικές σε σχέση με αυτές που υπολογίστηκαν για αποκλειστικά 2ης τάξης ακρίβεια. Επομένως, κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό θα μπορούσε η μέθοδος να εγκλωβιστεί σε κάποιο τοπικό ακρότατο (ή σε άλλο ακρότατο από ότι θα εγκλωβιζόταν αν εγκλωβιζόταν με δεύτερης τάξης ακρίβεια.) Στο σχήμα 5.32, θα παρουσιαστεί με

βήμα 30 και 500 επαναλήψεις η μέθοδος της απότομης καθόδου με σκοπό την σύγκριση αυτών ως προς τη ταχύτητα σύγκλισης. Ενώ στο σχήμα 5.33 θα πραγματοποιηθεί η ίδια σύγκριση, αλλά με εφαρμογή της μεθόδου Newton.



Σχήμα 5.32: Η πορεία σύγκλισης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης στόχου. Χρησιμοποιείται βήμα=30



Σχήμα 5.33: Η πορεία σύγκλισης της Newton μεθόδου για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης στόχου.

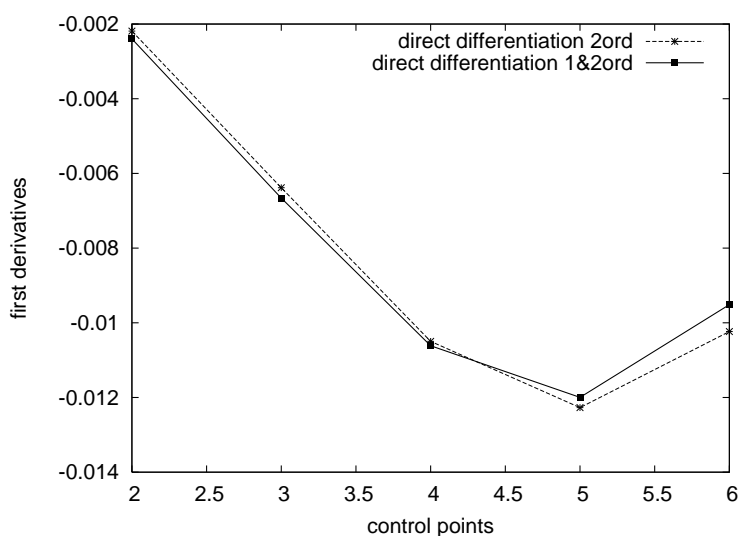
Όπως παρατηρείται στο σχήμα 5.32 η μέθοδος της απότομης καθόδου με βήμα 30 για συνδυασμό τάξεων υστερεί σε ακρίβεια έναντι των αποτελεσμάτων που προέκυψαν

5-24ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5. ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΜΕ ΤΗ ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΜΕΘΟΔΟ.

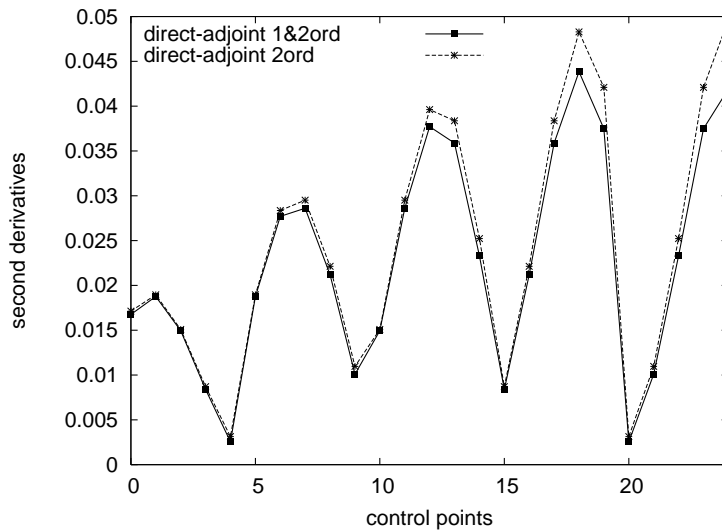
από τον ίδιο υπολογισμό για 2ης τάξης ακρίβεια. Επειδή, όπως θα αποδειχθεί στη συνέχεια, οι παράγωγοι μεταξύ τους είναι διαφορετικές, είναι πιθανόν κατά την πορεία της σύγκλισης να εγκλωβίστηκε η λύση σε κάποιο τοπικό ακρότατο. Επιπλέον, μπορεί να φταίει και η επιλογή του βήματος. Πιο αναλυτικά, η ίδια μέθοδος για άλλο βήμα μπορεί να συγκλίνει μεν καθυστερημένα, αλλά να δώσει την ακρίβεια που επιθυμείται.

Απο την άλλη πλευρά όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.33, η μέθοδος Newton δεν υστερεί σε ακρίβεια. Αυτό οφείλεται στο ότι οι δεύτερες παράγωγοι δεν διαφέρουν πολύ μεταξύ τους, όπως θα αποδειχθεί και στη συνέχεια, επομένως κατά τη πορεία σύγκλισης η κατεύθυνση ανίχνευσης είναι πιο σωστή.

Στη συνέχεια, παρουσιάζονται τα σχήματα 5.34 και 5.35 τα οποία αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία του αγωγού. Στο σχήμα 5.34 συγκρίνονται οι τιμές των πρώτων παραγώγων για συνδυασμό πρώτης και δεύτερης τάξης με αυτές από τον υπολογισμό δεύτερης τάξης. Το ίδιο συμβαίνει και στο σχήμα 5.35 μόνο που συγκρίνονται οι τιμές των δεύτερων παραγώγων (Hessian μητρώο).

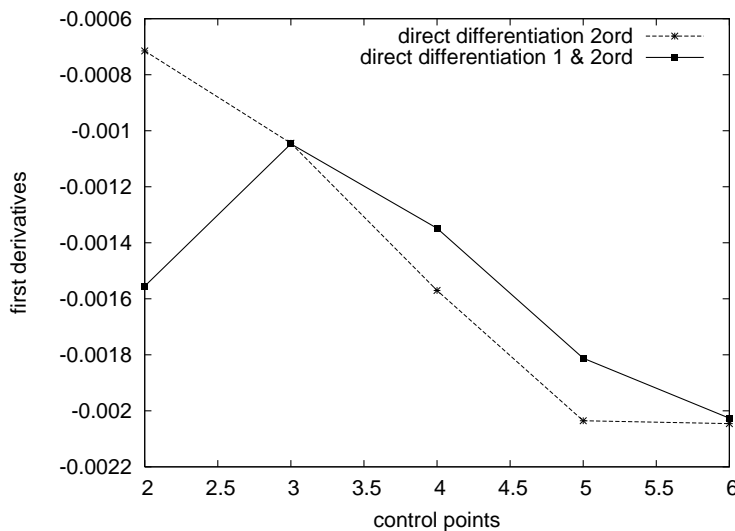


Σχήμα 5.34: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση πρώτων παραγώγων υπολογισμένες με ευθεία διαφόριση για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

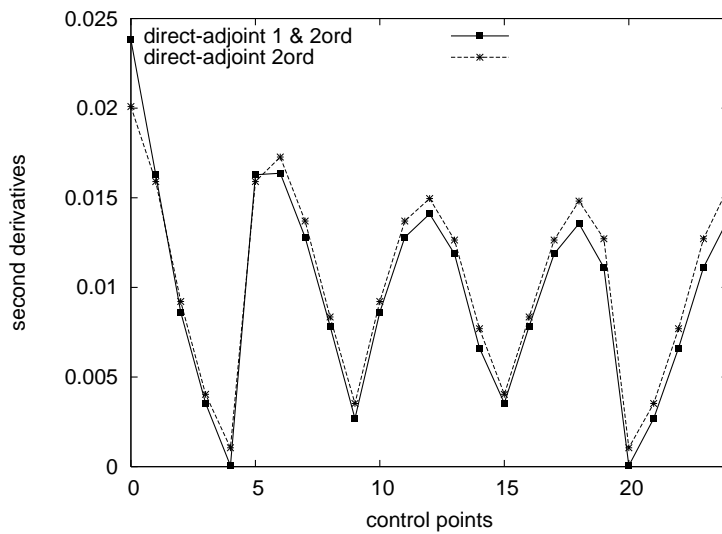


Σχήμα 5.35: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση δεύτερων παραγώγων υπολογισμένες με τη διακριτή συζυγή τεχνική για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

Αντίστοιχα παρουσιάζονται τα σχήματα 5.36, 5.37 για την ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού:

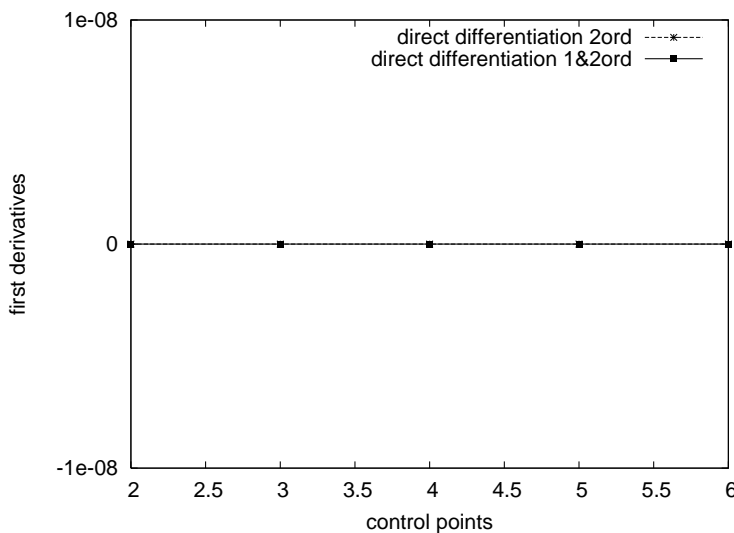


Σχήμα 5.36: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση πρώτων παραγώγων υπολογισμένες με ευθεία διαφόριση για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού.

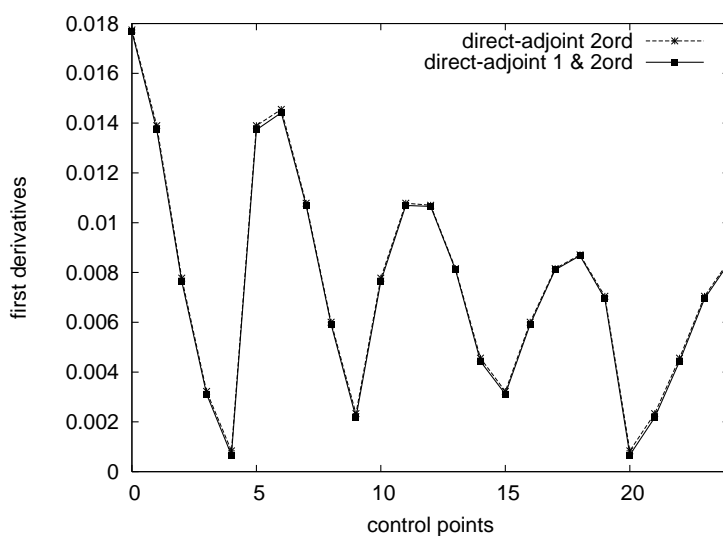


Σχήμα 5.37: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση δεύτερων παραγώγων υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς (direct-adjoint) τεχνικής για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία του αγωγού.

και τέλος τα σχήματα 5.38 και 5.39 για τη βέλτιστη γεωμετρία του αγωγού. Εδώ, γίνεται σαφής η πορεία των πρώτων και δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου συναρτήσει των μεταβλητών σχεδιασμού μέχρι το πέρας της διαδικασίας, δηλαδή μέχρι τη σύγκλιση της μεθόδου (σχήμα 5.34).



Σχήμα 5.38: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση πρώτων παραγώγων υπολογισμένες με ευθεία διαφύριση για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη θέση.



Σχήμα 5.39: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Γίνεται σύγκριση δεύτερων παραγώγων υπολογισμένες με χρήση διακριτής συζυγούς (direct-adjoint) τεχνικής για ακρίβεια 2ης και συνδυασμού 1ης και 2ης τάξης. Το σχήμα αυτό αναφέρεται στη βέλτιστη θέση.

Κεφάλαιο 6

Εύρεση Παραγώγων με τη Συνεχή Συζυγή Μέθοδο.

6.1 Εισαγωγικά σχόλια

Στα προηγούμενα κεφάλαια παρουσιάστηκε ο τρόπος εύρεσης παραγώγων με τη διακριτή συζυγή μέθοδο για προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού 1– D αγωγού. Δηλαδή, υπολογίστηκαν οι παράγωγοι βασιζόμενοι στον ορισμό της επαυξημένης συνάρτησης στόχου, η οποία σχηματίστηκε από τη διακριτή γραφή της συνάρτησης στόχου, τις διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής και τις κομβικές τιμές της συζυγούς μεταβλητής. Ωστόσο, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην εισαγωγή, εναλλακτική μέθοδος υπολογισμού των παραγώγων είναι και η συνεχής συζυγής μέθοδος. Ουσιαστική διαφορά αποτελεί το γεγονός ότι στη συνεχή συζυγή μέθοδο, η διακριτοποίηση ακολουθεί την παραγωγή της συζυγούς εξίσωσης, σε αντίθεση με τη διακριτή όπου η διακριτοποίηση προηγείται και έτσι οι συζυγείς εξισώσεις παράγονται απευθείας σε διακριτή μορφή.

Επομένως, πιο αναλυτικά όσον αφορά την πρώτη παράγωγο στη συνεχή συζυγή μέθοδο, η επαυξημένη συνάρτηση στόχου συντίθεται από την αναλυτική έκφραση της συνάρτησης στόχου και το ολοκλήρωμα των εξισώσεων ροής πολλαπλασιασμένων με τις συζυγείς μεταβλητές. Στη συνέχεια επιθυμώντας να καταστεί η μεταβολή της συνάρτησης στόχου ανεξάρτητη κάθε μεταβολής των μεγεθών ροής, εντοπίζονται ποσότητες που πρέπει να μηδενιστούν. Από τις ποσότητες αυτές παράγονται οι συζυγείς εξισώσεις και οι οριακές τους συνθήκες. Όσα αναφέρθηκαν θα είναι σε διαφορική γραφή, επομένως πρέπει στη συνέχεια να διακριτοποιηθούν.

Αντίστοιχα, όσον αφορά τη δεύτερη παράγωγο (υπολογισμό Hessian μητρώου) στη συνεχή συζυγή μέθοδο, η επαυξημένη δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης στόχου συντίθεται από την αναλυτική έκφραση της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης στόχου και το ολοκλήρωμα της δεύτερης παραγώγου του υπολοίπου των εξισώσεων ροής πολλαπλασιασμένων με τις συζυγείς μεταβλητές. Στη συνέχεια επιθυμώντας να καταστεί η μεταβολή δεύτερης τάξης της συνάρτησης στόχου ανεξάρτητη της μεταβολής

6-2 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

ς δεύτερης τάξης των μεγεθών ροής ($\delta^2 U$), εντοπίζονται ποσότητες που πρέπει να μηδενιστούν. Από τις ποσότητες αυτές θα παραχθούν οι συζυγείς εξισώσεις και οι οριακές τους συνθήκες, που πρέπει στη συνέχεια να διακριτοποιηθούν. Στην παρούσα διπλωματική εργασία, λήφθηκε ο όρος $\frac{d\vec{U}}{db}$ από τη διακριτή μέθοδο της ευθείας διαφοροποίησης που αναλύθηκε στο κεφάλαιο 3.

Ωστόσο, όπως θα αποδειχθεί και στη συνέχεια, οι συζυγείς εξισώσεις, καθώς και οι οριακές συνθήκες αυτών, που θα προκύψουν από τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου θα ταυτίζονται πλήρως με αυτές που θα προκύψουν από τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου. Επομένως, στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστούν οι σχέσεις που ισχύουν για τις παραγώγους ευαισθησίας και στη συνέχεια θα αναφερθεί αναλυτικά ο τρόπος επίλυσης των συζυγών εξισώσεων καθώς και των οριακών τους συνθηκών.

6.2 Υπολογισμός πρώτης παραγώγου με συνεχή συζυγή μέθοδο.

Όπως έχει ήδη αναπτυχθεί σε προηγούμενες παραγράφους, η συνάρτηση στόχος που παρουσιάζεται στη παρούσα διπλωματική, δίδεται από τη σχέση:

$$F(\vec{U}, \vec{b}) = \frac{1}{2} \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x))^2 dx$$

όπου η ολοκλήρωση γίνεται σε όλο το μήκος του αγωγού το οποίο είναι γνωστό και σταθερό.

Η μεταβολή της συνάρτησης στόχου θα είναι:

$$\begin{aligned} \delta F(\vec{U}, \vec{b}) &= \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = \\ &\int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} dx + \frac{1}{2} \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x))^2 \delta(dx) \end{aligned} \quad (6.1)$$

Η μεταβολή της επαυξημένης συνάρτησης στόχου, εισάγοντας τις συζυγείς μεταβλητές είναι:

$$\delta F_{aug} = \delta F - \int_{(L)} \vec{\psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - \delta \vec{q} \right) dx \quad (6.2)$$

όπου παραλείφθηκε ο ψευδοχρονικός όρος των εξισώσεων ροής. Επιπλέον επειδή το πρόβλημά μας είναι $1 - D$, αντί να χρησιμοποιηθεί ο όρος $\delta \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} \right)$ χρησιμοποιείται ο όρος $\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x}$.

6.2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΠΡΩΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.6-3

Τέλος, ο μη ομογενής όρος της εξίσωσης 6.2 αναπτύχθηκε ως εξής:

$$\delta \vec{q} = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = T_u \delta \vec{U} + T_b \delta \vec{b} \quad (6.3)$$

Επομένως η εξίσωση 6.2 τροποποιείται ως εξής:

$$\delta F_{aug} = \delta F - \int_{(L)} \vec{\psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - T_u \delta \vec{U} - T_b \delta \vec{b} \right) dx \quad (6.4)$$

όπου το μητρώο $T_b = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}}$ εξαρτάται από τη παραμετροποίηση της κατανομής της διατομής $S(x)$ και ισούται με:

$$\left[\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}} \right]_i = \left[\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{d\vec{b}} - \frac{1}{S} \frac{d}{d\vec{b}} \left(\frac{dS}{dx} \right) \right]_i \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_i \quad (6.5)$$

ενώ το μητρώο $T_u = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{U}}$ είναι:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{U}} = -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_i \quad (6.6)$$

Ο πρώτος όρος στο δεξί μέλος της 6.4, ο οποίος αντιστοιχεί στη μεταβολή της πραγματικής συνάρτησης στόχου, έχει ήδη αναλυθεί στη σχέση 6.1, ενώ ο δεύτερος όρος, ο οποίος εκφράζει τον περιορισμό να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, αναπτύσσεται με βάση το θεώρημα Green-Gauss ως εξής:

$$\begin{aligned} & \int_{(L)} \vec{\psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - T_u \delta \vec{U} - T_b \delta \vec{b} \right) dx = \\ & \int_{(L)} \left(\frac{\partial(\vec{\psi}^T \delta \vec{f})}{\partial x} - \delta \vec{f}^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} - \vec{\psi}^T T_u \delta \vec{U} - \vec{\psi}^T T_b \delta \vec{b} \right) dx \\ & \left[\vec{\psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{out} - \left[\vec{\psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in} - \int_{(L)} \left(\delta \vec{U}^T A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + \vec{\psi}^T T_u \delta \vec{U} + \vec{\psi}^T T_b \delta \vec{b} \right) dx \end{aligned} \quad (6.7)$$

6-4ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

όπου χρησιμοποιείται ότι $\vec{f} = A\vec{U}$ και $\delta\vec{f} = A\delta\vec{U}$. Ωστόσο, πρέπει να αναφέρουμε ότι η δεύτερη σχέση είναι προσεγγιστική και ισχύει με την παραδοχή ότι $\delta A = 0$. Υπενθυμίζεται ότι ανάλογες παραδοχές έγιναν και στη διακριτή μέθοδο.

Εισάγοντας τις σχέσεις 6.7 και 6.1 στην σχέση 6.2 και λαμβάνοντας υπόψη ότι το πρόβλημά μας είναι $1 - D$ προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} = & \int_{(L)} \vec{\psi}^T T_b \delta \vec{b} dx - \left[\vec{\psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{out} + \left[\vec{\psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in} + \\ & \int_{(L)} \delta \vec{U}^T \left[(p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right) + A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} \right] dx \end{aligned} \quad (6.8)$$

Ωστόσο, όπως έχει ήδη αναφερθεί, είναι επιθυμητό η μεταβολή της συνάρτησης στόχου να γίνει ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta\vec{U}$ του πεδίου ροής. Επομένως, η εξίσωση, η οποία αν διατυπωθεί και ικανοποιηθεί απαλείφει τους όρους που περιέχουν την ποσότητα $\delta\vec{U}$ αποτελεί τη συζυγή εξίσωση, ενώ οι όροι που με την επιβολή τους η συνάρτηση στόχος γίνεται ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta\vec{U}$ στα όρια του πεδίου αποτελούν τις οριακές συνθήκες της συζυγούς εξίσωσης.

Πιο αναλυτικά, η συζυγής εξίσωση δίδεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \int_{(L)} \delta \vec{U}^T \left[(p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right) + A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} \right] dx = 0 \longrightarrow \\ \left[A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} + (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (6.9)$$

Από τη παραπάνω σχέση γίνεται εμφανές ότι η συζυγής εξίσωση είναι μια διανυσματική εξίσωση, δηλαδή ένα σύστημα τριών μερικών διαφορικών εξισώσεων με αγνώστους τα ψ_1, ψ_2, ψ_3 σε κάθε κόμβο. Συνεπώς, το σύστημα των μερικών διαφορικών εξισώσεων για τις συζυγείς μεταβλητές, αφού σε αυτό προστεθεί ο χρονικός όρος για τη διατύπωση ενός χωρο-χρονικά υπερβολικού προβλήματος, γράφεται:

$$\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} - \left[A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} + (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right) \right] = 0 \quad (6.10)$$

ενώ οι οριακές συνθήκες που επιβάλλονται στις συζυγείς εξισώσεις προέρχονται από επίλυση της εξίσωσης $\left[\vec{\psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in,out} = 0$. Σε ανάστροφη γραφή οι οριακές συνθήκες για τις συζυγείς εξισώσεις θα προέρθουν από την επίλυση της σχέσης:

$$\delta \vec{U}^T A^T \vec{\psi} = 0 \quad (6.11)$$

Επομένως, η παράγωγος ευαισθησίας θα υπολογιστεί από τη σχέση:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta \vec{b}} = \int_{(L)} \vec{\psi}^T T_b dx \quad (6.12)$$

Συμπερασματικά, για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου αρκεί η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης για την εύρεση του $\vec{\psi}$.

6.3 Υπολογισμός δεύτερης παραγώγου με συνεχή συζυγή μέθοδο.

Όπως ήδη αναφέρθηκε, η μεταβολή της συνάρτησης στόχου θα είναι:

$$\begin{aligned} \delta F(\vec{U}, \vec{b}) &= \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = \\ &= \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right) \delta \vec{U} dx + \frac{1}{2} \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x))^2 \delta(dx) \end{aligned}$$

Και επειδή το πρόβλημά μας είναι 1 - D με ισαπέχοντες κόμβους, η μεταβολή της συνάρτησης στόχου τελικά θα είναι:

$$\delta F(\vec{U}, \vec{b}) = \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \delta p dx \quad (6.13)$$

όπου

$$p = p(\vec{U}) \longrightarrow \delta p = \frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U}$$

Γνωρίζοντας τη μεταβολή της συνάρτησης στόχου, μπορεί να υπολογιστεί η μεταβολή της μεταβολής αυτής ως εξής:

$$\delta^2 F = \int_{(L)} \delta p \delta p dx + \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \delta^2 p dx$$

6-6 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

όπου

$$\delta^2 p = \delta \left(\frac{\partial p}{\partial U_k} \delta U_k \right) \longrightarrow \delta^2 p = \frac{\partial^2 p}{\partial U_k \partial U_m} \delta U_k \delta U_m + \frac{\partial p}{\partial U_k} \delta^2 U_k$$

Άρα

$$\begin{aligned} \delta^2 F = & \int_{(L)} \frac{\partial p}{\partial U_k} \frac{\partial p}{\partial U_m} \delta U_k \delta U_m dx + \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \frac{\partial p}{\partial U_k} \delta^2 U_k dx \\ & + \int_{(L)} (p(x) - p_{tar}(x)) \frac{\partial^2 p}{\partial U_k \partial U_m} \delta U_k \delta U_m dx \end{aligned} \quad (6.14)$$

Η μεταβολή δεύτερης τάξης της επαυξημένης συνάρτησης στόχου, εισάγοντας τις συζυγείς μεταβλητές είναι:

$$\delta^2 F_{aug} = \delta^2 F - \int_{(L)} \vec{\psi}^T \left(\frac{\partial(\delta^2 \vec{f})}{\partial x} - \delta^2 \vec{q} \right) dx \quad (6.15)$$

όπου παραλείφθηκε ο ψευδοχρονικός όρος των εξισώσεων ροής. Επιπλέον επειδή το πρόβλημά μας είναι $1 - D$ και $\delta x = 0$, αντί να χρησιμοποιηθεί ο όρος $\delta^2 \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} \right)$ χρησιμοποιείται ο όρος $\frac{\partial(\delta^2 \vec{f})}{\partial x}$.

Επιπλέον, ο μη-ομογενής όρος της εξίσωσης 6.15 αναπτύχθηκε ως εξής:

$$\delta \vec{q} = \frac{\partial \vec{q}}{\partial U_k} \delta U_k + \frac{\partial \vec{q}}{\partial b_i} \delta b_i = T_u \delta U_k + T_b \delta b_i$$

άρα η μεταβολή της μεταβολής του θα είναι:

$$\delta^2 \vec{q} = \delta(T_u) \delta U_k + T_u \delta^2 U_k + \delta(T_b) \delta b_i + T_b \delta^2 b_i \quad (6.16)$$

Υπενθυμίζεται ότι τα μητρώα $T_b = \frac{\partial \vec{q}}{\partial b_i}$ και $T_u = \frac{\partial \vec{q}}{\partial U_k}$ είναι υπολογισμένα από τις σχέσεις 6.5 και 6.6.

6.3. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΕΥΤΕΡΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.6-7

Στη συνέχεια αναλύεται το πρώτο ολοκλήρωμα του δεξιού μέλους της εξίσωσης 6.15 με χρήση του θεωρήματος Green-Gauss ως εξής:

$$\int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(\delta^2 \vec{f})}{\partial x} dx = \int_{(L)} \frac{\partial}{\partial x} (\vec{\psi}^T \delta^2 \vec{f}) dx - \int_{(L)} \frac{\partial \vec{\psi}^T}{\partial x} \delta^2 \vec{f} dx \quad (6.17)$$

Όμως ισχύει ότι

$$\delta \vec{f} = A \delta \vec{U} \longrightarrow \delta^2 \vec{f} = \delta(A \delta \vec{U}) = A \delta^2 \vec{U}$$

επομένως ισχύει

$$\vec{\psi}^T \delta^2 \vec{f} = \delta^2 \vec{U}^T A^T \vec{\psi} \quad (6.18)$$

και

$$\int_{(L)} \frac{\partial \vec{\psi}^T}{\partial x} \delta^2 \vec{f} dx = \int_{(L)} \frac{\partial \vec{\psi}^T}{\partial x} A \delta^2 \vec{U} dx = \int_{(L)} \left(A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)^T \delta^2 \vec{U} dx \quad (6.19)$$

Για τον λόγο αυτό η 6.17, με χρήση των σχέσεων 6.18 και 6.19, τροποποιείται σε

$$\int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(\delta^2 \vec{f})}{\partial x} dx = \left[\delta^2 \vec{U}^T A^T \vec{\psi} \right]_{out} - \left[\delta^2 \vec{U}^T A^T \vec{\psi} \right]_{in} - \int_{(L)} \left(A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)^T \delta^2 \vec{U} dx \quad (6.20)$$

Επομένως, σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν η σχέση 6.15 με χρήση των σχέσεων 6.14, 6.16 και 6.20 τροποποιείται σε:

$$\begin{aligned} \delta^2 F_{aug} = & \int_{(L)} \delta^2 U_k^T \left((p(x) - p(x)_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial U_k} \right)^T + A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} \right) dx \\ & - \left[\delta^2 U_k^T A^T \vec{\psi} \right]_{out} + \left[\delta^2 U_k^T A^T \vec{\psi} \right]_{in} + \int_{(L)} \vec{\psi}^T T_b \delta^2 b_i dx + \end{aligned}$$

6-8ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

$$\int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_b)}{\partial b_j} \delta b_i \delta b_j dx + \int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_u)}{\partial b_j} \delta b_j \delta U_k dx + \int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_b)}{\partial U_m} \delta b_i \delta U_m dx +$$

$$\int_{(L)} \left(\frac{\partial p}{\partial U_k} \frac{\partial p}{\partial U_m} + (p(x) - p(x)_{tar}) \frac{\partial^2 p}{\partial U_k \partial U_m} + \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_u)}{\partial U_m} \right) \delta U_k \delta U_m dx \quad (6.21)$$

Ωστόσο, όπως έχει ήδη αναφερθεί, επιθυμία είναι η μεταβολή δεύτερης τάξης της επαυξημένης συνάρτησης στόχου να γίνει ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta^2 \vec{U}$ του πεδίου ροής. Επομένως, η εξίσωση, η οποία αν διατυπωθεί και ικανοποιηθεί απαλείφει τους όρους που περιέχουν την ποσότητα $\delta^2 \vec{U}$ αποτελεί τη συζυγή εξίσωση, ενώ οι όροι που με την επιβολή τους η συνάρτηση στόχος γίνεται ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta \vec{U}$ στα όρια του πεδίου αποτελούν τις οριακές συνθήκες της συζυγούς εξίσωσης. Άρα η δεύτερη παράγωγος ευαισθησίας προκύπτει από τους όρους που απομένουν.

Πιο αναλυτικά, από τη παραπάνω σχέση, γίνεται εμφανές ότι η συζυγής εξίσωση είναι ακριβώς η ίδια διανυσματική εξίσωση με αυτήν που υπολογίστηκε, με τη συνεχή διακριτή μέθοδο, για την πρώτη παράγωγο. Συνεπώς, η συζυγής εξίσωση, αφού σε αυτήν προστεθεί ο χρονικός όρος για τη διατύπωση ενός χωρο-χρονικά υπερβολικού προβλήματος, γράφεται:

$$\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} - \left[A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} + (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \right] = 0 \quad (6.22)$$

ενώ οι οριακές συνθήκες που επιβάλλονται στις συζυγείς εξισώσεις προέρχονται από επίλυση της εξίσωσης $\left[\delta^2 \vec{U}^T A^T \vec{\psi} \right]_{in,out}$. Ωστόσο, μετά από πράξεις καταλήγουμε, αφού αμελήσουμε τους όρους $\delta \vec{U} \delta \vec{U}$ (μικρής τάξης μεγέθους), ότι τελικά προκύπτουν ίδιες οριακές συνθήκες για το συζυγές πρόβλημα με αυτές της πρώτης παραγωγού.

Τελικά, για τη δεύτερη παράγωγο ευαισθησίας προκύπτει:

$$\frac{\delta^2 F_{aug}}{\delta b_i \delta b_j} = \int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_b)}{\partial b_j} dx + \int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_u)}{\partial b_j} \frac{\delta U_k}{\delta b_i} dx + \int_{(L)} \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_b)}{\partial U_m} \frac{\delta U_m}{\delta b_j} dx +$$

$$\int_{(L)} \left(\frac{\partial p}{\partial U_k} \frac{\partial p}{\partial U_m} + (p(x) - p(x)_{tar}) \frac{\partial^2 p}{\partial U_k \partial U_m} + \vec{\psi}^T \frac{\partial(T_u)}{\partial U_m} \right) \frac{\delta U_k}{\delta b_i} \frac{\delta U_m}{\delta b_j} dx \quad (6.23)$$

όπου όλα τα μεγέθη που απαιτούνται είναι γνωστά από τη διακριτή μέθοδο $(\frac{d\vec{U}}{dt}, \frac{\partial^2 p}{\partial U_k \partial U_m})$ και ουσιαστικά, απαιτείται μονάχα η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης για τον προσδιορισμό του $\vec{\psi}$.

6.4 Σχήμα επίλυσης συζυγών εξισώσεων 1ης τάξης ακρίβειας.

Όπως ήδη αναφέρθηκε στη προηγούμενη παράγραφο, οι συζυγείς μεταβλητές υπολογίζονται από την εξίσωση:

$$\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} - \left[A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} + (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \right] = 0$$

Ιδιαίτερη σημασία δίδεται στο ότι το σύστημα είναι γραμμικό, δηλαδή οι συντελεστές A^T, T_u^T δεν συναρτώνται του $\vec{\psi}$. Επιπλέον, επειδή το γραμμικό σύστημα που διέπει τις συζυγείς μεταβλητές έχει πραγματικές ιδιοτιμές, αντίθετες με εκείνες του προβλήματος ροής, το πρόσημο με το οποίο προστέθηκε ο χρονικός όρος είναι αντίθετος απ' αυτόν που ορίσθηκε στην δέλτα-διατύπωση του ευθέως προβλήματος.

Αρχικά, όπως είναι γνωστό (6.9) μας ενδιαφέρει η χρονικά μόνιμη ροή. Επομένως, αγνοώντας προσωρινά τον χρονικό όρο, τίθεται με \vec{R}_ψ η παραπάνω σχέση. Δηλαδή θα έχω:

$$\vec{R}_\psi = - \left[A^T \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} + T_u^T \vec{\psi} + (p(x) - p_{tar}(x)) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \right] = 0 \quad (6.24)$$

Η επίλυση του συζυγούς προβλήματος γίνεται μέσω δέλτα-διατύπωσης. Δηλαδή:

$$\left[I \frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial \vec{R}_\psi}{\partial \vec{\psi}} \right] \delta \vec{\psi} = -\vec{R}_\psi \quad (6.25)$$

όπου, ο χρονικός όρος - ψευδοχρόνος εισάγεται (παρόλο που η ροή θεωρείται χρονικά μόνιμη) ώστε να εκμεταλλευτούμε τις ιδιότητες των υπερβολικών συστημάτων και να εφαρμόσουμε τις τεχνικές χρονοπροέλασης (time-marching) για την επίλυση του συζυγούς πεδίου.

Επιπλέον, στην εξίσωση (6.25) τα εμπλεκόμενα μητρώα είναι:

6-10 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

$$\vec{R}_{\psi}^T = \left[\vec{R}_{\psi_1}, \vec{R}_{\psi_2}, \dots, \vec{R}_{\psi_{z-1}}, \vec{R}_{\psi_z} \right]^T \quad (6.26)$$

$$\delta \vec{\psi}^T = \left[\delta \vec{\psi}_1, \delta \vec{\psi}_2, \dots, \delta \vec{\psi}_{z-1}, \delta \vec{\psi}_z \right]^T \quad (6.27)$$

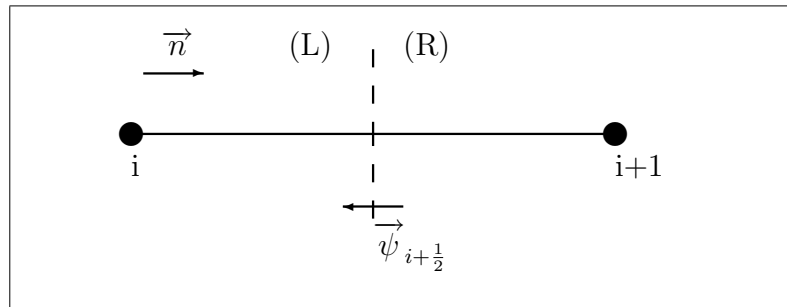
$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{\psi}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_3} & \dots & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_z} \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_3} & \dots & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_z} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_{z-1}}}{\partial \vec{\psi}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_{z-1}}}{\partial \vec{\psi}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_{z-1}}}{\partial \vec{\psi}_3} & \dots & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_{z-1}}}{\partial \vec{\psi}_z} \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_3} & \dots & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_z} \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

Επομένως, ολοκληρώνοντας την εξίσωση 6.24 από $i - \frac{1}{2} \rightarrow i + \frac{1}{2}$, για το \vec{R}_{ψ} στους εσωτερικούς κόμβους, θα έχουμε ότι:

$$\vec{R}_{\psi_i} = - \left[A^T (\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}) + T_{ui}^T \vec{\psi}_i \Delta x_i + (p(x) - p(x)_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial U_i} \right)^T \Delta x_i \right] \quad (6.29)$$

Στη περίπτωση που η διακριτοποίηση της συζυγούς εξίσωσης γίνει με τη μέθοδο Flux Vector Splitting ακρίβειας πρώτης τάξης, θα έχουμε ότι:

$$A^T \vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \vec{\psi}_{i+1} + A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \vec{\psi}_i \quad (6.30)$$



Άρα μετά τη διακριτοποίηση:

$$\vec{R}_{\psi_i} = - \left[A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \vec{\psi}_{i+1} + A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \vec{\psi}_i - A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \vec{\psi}_{i-1} - A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \vec{\psi}_i + T_{u_i}^T \vec{\psi}_i \Delta x_i + (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i} \right)^T \Delta x_i \right]$$

Δηλαδή,

$$\begin{aligned} \vec{R}_{\psi_i} &= A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \vec{\psi}_{i-1} - \left(A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} - A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} + T_{u_i}^T \Delta x_i \right) \vec{\psi}_i \\ &\quad - A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \vec{\psi}_{i+1} - (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i} \right)^T \Delta x_i \end{aligned} \quad (6.31)$$

Από την παραγωγή της έκφρασης (6.31) έχουμε:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_{i-1}} = A_{i-\frac{1}{2}}^{T-}, \quad \frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_i} = - \left(A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} - A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} + T_{u_i}^T \Delta x_i \right), \quad \frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_{i+1}} = -A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \quad (6.32)$$

και $\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_j} = 0$, για $j < i - 1$ και $j > i + 1$.

Τέλος, αν οι οριακές συνθήκες $\vec{R}_{\psi_1} = 0$ και $\vec{R}_{\psi_z} = 0$ είναι γραμμένες με πρώτης τάξης ακρίβεια και παραγωγιστούν, θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_j} &= 0, \quad \forall j = 3, \dots, z \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_j} &= 0, \quad \forall j = 1, \dots, z - 2 \end{aligned} \quad (6.33)$$

Επομένως, με βάση τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω το συνολικό μητρώο (6.28) για ακρίβεια πρώτης τάξης είναι ένα τριδιαγώνιο μητρώο με μορφή:

$$\frac{\partial \vec{R}_\psi}{\partial \vec{\psi}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_{\psi 1}}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 1}}{\partial \psi_2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi 2}}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 2}}{\partial \psi_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 2}}{\partial \psi_3} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 3}}{\partial \psi_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 3}}{\partial \psi_3} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi 3}}{\partial \psi_4} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial \vec{R}_{\psi z}}{\partial \psi_{z-1}} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi z}}{\partial \psi_z} \end{bmatrix}$$

6.5 Οριακές συνθήκες στο συζυγές πρόβλημα.

Σκοπός της παρούσας ενότητας, είναι η περιγραφή του τρόπου επιβολής των οριακών συνθηκών στο συζυγές πρόβλημα. Στην περίπτωση της υποηχητικής ροής, οι οριακές συνθήκες έχουν αρχικά για την είσοδο:

Κόμβος 1:

$$(\psi_1)_1 = \left[\frac{u^2 \left[\frac{u^2}{2c^2} - \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} - \frac{1}{\gamma-1} \frac{c^2}{u^2} \right] \psi_3 + u \left[\frac{u^2}{c^2} - 1 \right] \psi_2}{1 - \frac{u^2}{c^2}} \right]_1 \quad (6.34)$$

$$(\psi_2)_1 = (\psi_2)_2 \quad (6.35)$$

$$(\psi_3)_1 = (\psi_3)_2 \quad (6.36)$$

ενώ για την έξοδο:

Κόμβος z:

$$(\psi_1)_z = (\psi_1)_{z-1} \quad (6.37)$$

$$(\psi_2)_z = \left[\frac{\psi_1}{2u} \frac{u^2(\gamma-2) - 2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2}{2}(1-\gamma)} \right]_z \quad (6.38)$$

$$(\psi_3)_z = \left[\psi_1 \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \right]_z \quad (6.39)$$

Οι παραπάνω σχέσεις προέκυψαν από επίλυση της εξίσωσης (6.11). Η διαχείριση της σχέσης αυτής γίνεται με διαφορετικό τρόπο στην είσοδο και την έξοδο του πεδίου ροής αφού σε αυτά επιβάλλονται διαφορετικές συνθήκες ροής. Ωστόσο, η ανάπτυξη της (6.11) θα είναι ασφαλώς κοινή για την είσοδο και την έξοδο και δίνει:

$$\begin{bmatrix} \delta\rho & \delta(\rho u) & \delta(\rho E) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \frac{\gamma-3}{2}u^2 & -\gamma uE + (\gamma-1)u^3 \\ 1 & (3-\gamma)u & \gamma E - \frac{3(\gamma-1)}{2}u^2 \\ 0 & \gamma-1 & \gamma u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix} = 0 \quad (6.40)$$

Στην είσοδο, όπου επιβάλλονται σταθερές τιμές στα ολικά θερμοδυναμικά μεγέθη της ροής (κεφάλαιο 2), διαφορίζοντας τις σχέσεις τις ισεντροπικής μεταβολής, προκύπτουν οι συσχετίσεις των μεταβολών

$$\delta\rho = -\frac{\rho u}{c^2}\delta u \quad (6.41)$$

$$\delta p = -\rho u \delta u \quad (6.42)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις 6.41 και 6.42 προκύπτουν εύκολα οι μεταβολές της δεύτερης και τρίτης συντηρητικής μεταβλητής των εξισώσεων ροής, ως

$$\delta(\rho u) = u\delta\rho + \rho\delta u = \rho \left[1 - \frac{u^2}{c^2} \right] \delta u \quad (6.43)$$

$$\delta(\rho E) = \frac{\delta p}{\gamma-1} + \frac{1}{2}\delta(\rho u^2) = \rho u \left[\frac{\gamma-2}{\gamma-1} - \frac{1}{2}\frac{u^2}{c^2} \right] \delta u \quad (6.44)$$

Με αντικαταστάσεις των σχέσεων 6.41, 6.43 και 6.44 για τις μεταβολές των ποσοτήτων της ροής στη σχέση 6.40, η τελευταία θα πάρει για την είσοδο της ροής στον αγωγό (υποηχητική ροή) την μορφή της εξίσωσης 6.34.

Ωστόσο, η υλοποίηση της σχέσης αυτής, προϋποθέτει την προεκβολή από το εσωτερικό του πεδίου δύο εκ των τριών συνιστωσών του $\vec{\psi}$ (συνθήκη Neumann) και τον υπολογισμό της τρίτης συνιστώσας από τη σχέση 6.34.

Από την άλλη πλευρά, στην έξοδο επιβάλλεται σταθερή τιμή της στατικής πίεσης, επομένως θα έχουμε:

$$\delta p = (\gamma-1)(\delta(\rho E) - u\delta(\rho u) + \frac{1}{2}u^2\delta\rho) = 0$$

και συνεπώς,

$$\delta(\rho E) = u\delta(\rho u) - \frac{1}{2}u^2\delta\rho = 0 \quad (6.45)$$

Με αντικατάσταση της 6.45 στη σχέση 6.40 προκύπτουν οι σχέσεις 6.38 και 6.39.

Συνεπώς, στην έξοδο υπολογίζεται μια από τις τρεις συνιστώσες της συζυγούς μεταβλητής μέσω προεκβολής από το εσωτερικό του πεδίου και οι υπόλοιπες δύο προκύπτουν τοπικά, στην έξοδο, από τις σχέσεις 6.38 και 6.39.

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν συνοπτικά να γραφούν μέσω του \vec{R}_ψ . Πιο συγκεκριμένα για τον πρώτο κόμβο θα έχουμε:

$$\vec{R}_{\psi_1} = [(\psi_1)_1 - \left[\frac{u^2 \left[\frac{u^2}{2c^2} - \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} - \frac{1}{\gamma-1} \frac{c^2}{u^2} \right] \psi_3 + u \left[\frac{u^2}{c^2} - 1 \right] \psi_2}{1 - \frac{u^2}{c^2}} \right]_1, (\psi_2)_1 - (\psi_2)_2, (\psi_3)_1 - (\psi_3)_2]$$

ενώ για τον τελευταίο κόμβο θα έχουμε

$$\vec{R}_{\psi_z} = \left[(\psi_1)_z - (\psi_1)_{z-1}, (\psi_2)_z - \left[\frac{\psi_1}{2u} \frac{u^2(\gamma-2) - 2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2}{2}(1-\gamma)} \right]_z, (\psi_3)_z - \left[\psi_1 \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2}{2}(1-\gamma)} \right]_z \right].$$

Στη συνέχεια, διαφορίζονται οι παραπάνω εξισώσεις, έτσι ώστε να υπολογιστούν οι όροι, $\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_j}$ και $\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_j}$ $j = 1, \dots, z$.

Πιο αναλυτικά, χρησιμοποιώντας την μεταβολή (variation) της δέλτα-διατύπωσης, θα έχουμε για τον πρώτο και τον τελευταίο κόμβο τις εξής εξισώσεις, που προκύπτουν ύστερα από πράξεις πινάκων:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_1} \delta \vec{\psi}_1 + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_2} \delta \vec{\psi}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_{z-1}} \delta \vec{\psi}_{z-1} + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_z} \delta \vec{\psi}_z = -\vec{R}_{\psi_1} \quad (6.46)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_1} \delta \vec{\psi}_1 + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_2} \delta \vec{\psi}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_{z-1}} \delta \vec{\psi}_{z-1} + \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_z} \delta \vec{\psi}_z = -\vec{R}_{\psi_z} \quad (6.47)$$

Ωστόσο, κατά τον υπολογισμό των μερικών παραγώγων ισχύει η (6.33) εξίσωση. Δηλαδή, μας ενδιαφέρει να υπολογιστούν οι όροι $\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_j}$ για $j = 1, 2$ καθώς και $\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_j}$ για $j = z-1, z$, ενώ οι μερικές παράγωγοι ως προς τα υπόλοιπα διανύσματα της συζυγούς μεταβλητής είναι μηδενικές.

Επομένως κατά τη διαφορίση θα έχουμε τις παρακάτω οριακές συνθήκες:

Αρχικά η πρώτη οριακή συνθήκη για την είσοδο

$$\frac{\partial R_{\psi_1}^1}{\partial \vec{\psi}_1} \delta \vec{\psi}_1 = -R_{\psi_1}^1 \longrightarrow$$

$$\left[1, u, u^2 \frac{-\frac{u^2}{2c^2} + \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} + \frac{c^2}{(\gamma-1)u^2}}{1 - \frac{u^2}{c^2}} \right]_1 \delta \vec{\psi}_1 = \frac{u^2 \left[\frac{u^2}{2c^2} - \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} - \frac{1}{\gamma-1} \frac{c^2}{u^2} \right] (\psi_3)_1}{1 - \frac{u^2}{c^2}} - u(\psi_2)_1 - (\psi_1)_1$$

προφανώς ισχύει ότι :

$$\frac{\partial R_{\psi_1}^1}{\partial \vec{\psi}_2} = [0, 0, 0]_2 \quad (6.48)$$

Η δεύτερη οριακή συνθήκη για την είσοδο

$$\frac{\partial R_{\psi_1}^2}{\partial \vec{\psi}_1} \delta \vec{\psi}_1 + \frac{\partial R_{\psi_1}^2}{\partial \vec{\psi}_2} \delta \vec{\psi}_2 = -R_{\psi_1}^2 \longrightarrow$$

$$[0, 1, 0]_1 \delta \vec{\psi}_1 + [0, -1, 0]_2 \delta \vec{\psi}_2 = (\psi_2)_2 - (\psi_2)_1 \quad (6.49)$$

και η τρίτη οριακή συνθήκη για την είσοδο

$$\frac{\partial R_{\psi_1}^3}{\partial \vec{\psi}_1} \delta \vec{\psi}_1 + \frac{\partial R_{\psi_1}^3}{\partial \vec{\psi}_2} \delta \vec{\psi}_2 = -R_{\psi_1}^3 \longrightarrow$$

$$[0, 0, 1]_1 \delta \vec{\psi}_1 + [0, 0, -1]_2 \delta \vec{\psi}_2 = (\psi_3)_2 - (\psi_3)_1 \quad (6.50)$$

6-16 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6. ΕΥΡΕΣΗ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΜΕ ΤΗ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Ανάλογη είναι και η διαδικασία που ακολουθείται για τις οριακές συνθήκες στην έξοδο του αγωγού. Υπενθυμίζουμε ότι όσον αφορά το \vec{R}_ψ του τελευταίου κόμβου θα έχουμε:
$$\vec{R}_{\psi_z} = \left[(\psi_1)_z - (\psi_1)_{z-1} \quad , \quad (\psi_2)_z - \left[\frac{\psi_1}{2u} \frac{u^2(\gamma-2)-2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \right]_z \quad , \quad (\psi_3)_z - \left[\psi_1 \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \right]_z \right].$$

Επομένως η πρώτη οριακή συνθήκη για την έξοδο:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{\psi_z}^1}{\partial \vec{\psi}_{z-1}} \delta \vec{\psi}_{z-1} + \frac{\partial R_{\psi_z}^1}{\partial \vec{\psi}_z} \delta \vec{\psi}_z &= -R_{\psi_z}^1 \longrightarrow \\ [-1, 0, 0]_{z-1} \delta \vec{\psi}_{z-1} + [1, 0, 0]_z \delta \vec{\psi}_z &= (\psi_1)_{z-1} - (\psi_1)_z \end{aligned} \quad (6.51)$$

Στη συνέχεια η δεύτερη οριακή συνθήκη για την έξοδο

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{\psi_z}^2}{\partial \vec{\psi}_z} \delta \vec{\psi}_z &= -R_{\psi_z}^2 \longrightarrow \\ \left[-\frac{1}{2u} \frac{u^2(\gamma-2)-2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \quad , \quad 1 \quad , \quad 0 \right]_k \delta \vec{\psi}_z &= -(\psi_2)_z + (\psi_1)_{z-1} \frac{1}{2u} \frac{u^2(\gamma-2)-2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \end{aligned}$$

προφανώς ισχύει ότι :

$$\frac{\partial R_{\psi_z}^2}{\partial \vec{\psi}_{z-1}} = [0, 0, 0]_{z-1} \quad (6.52)$$

Και τέλος, η τρίτη οριακή συνθήκη για την έξοδο

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{\psi_z}^3}{\partial \vec{\psi}_z} \delta \vec{\psi}_z &= -R_{\psi_z}^3 \longrightarrow \\ \left[-\frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \quad , \quad 0 \quad , \quad 1 \right]_z \delta \vec{\psi}_z &= -(\psi_3)_z + (\psi_1)_z \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \end{aligned}$$

προφανώς ισχύει ότι :

$$\frac{\partial R_{\psi_z}^3}{\partial \vec{\psi}_{z-1}} = [0, 0, 0]_{z-1} \quad (6.53)$$

6.6 Εναλλακτικός τρόπος διατύπωσης οριακών συνθηκών.

Στην προηγούμενη παράγραφο υπολογίστηκαν οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος στηριζόμενοι στην μεταβολή της δέλτα-διατύπωσης. Ο τρόπος που θα παρουσιαστεί στην παρούσα ενότητα, προϋποθέτει την επιβολή οριακών συνθηκών στην είσοδο και στην έξοδο μέσω τοπικού ισολογισμού ροών.

Πιο συγκεκριμένα, θα διατυπωθεί ένα μονοδιάστατο πρόβλημα Riemann μεταξύ των συζυγών εξισώσεων του κόμβου εισόδου και ενός υποθετικού κόμβου στο εξωτερικό του χωρίου. Το ίδιο θα εφαρμοστεί και για την έξοδο του αγωγού.

Για την επίλυση του προβλήματος Riemann θα εφαρμοστεί η μέθοδος flux vector splitting η οποία εφαρμόστηκε και στο υπόλοιπο πεδίο. Οι τιμές των συζυγών μεταβλητών στους υποθετικούς κόμβους θα υπολογίζονται με βάση τα μεγέθη που επιβάλλονται από τις οριακές συνθήκες και η πληροφορία που λείπει θα ληφθεί από τα αντίστοιχα μεγέθη του εκάστοτε οριακού κόμβου.

Για την είσοδο θα έχουμε:

$$A_1^T \vec{\psi}_{1-\frac{1}{2}} = A_1^{T+} \vec{\psi}_1 + A_1^{T-} \psi_{fake1} \quad (6.54)$$

ενώ για την έξοδο:

$$A_z^T \vec{\psi}_{z+\frac{1}{2}} = A_z^{T-} \vec{\psi}_z + A_z^{T+} \psi_{out} \quad (6.55)$$

Για τις συζυγείς μεταβλητές στην είσοδο του αγωγού, σε αντιστοιχία με τα όσα αναφέρθηκαν στην προηγούμενη παράγραφο, θα ισχύουν:

$$(\psi_1)_{fake1} = \left[\frac{u^2 \left[\frac{u^2}{2c^2} - \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} - \frac{1}{\gamma-1} \frac{c^2}{u^2} \right] \psi_3 + u \left[\frac{u^2}{c^2} - 1 \right] \psi_2}{1 - \frac{u^2}{c^2}} \right]_{fake1} \quad (6.56)$$

$$(\psi_2)_{fake1} = (\psi_2)_1 \quad (6.57)$$

$$(\psi_3)_{fake1} = (\psi_3)_1 \quad (6.58)$$

όπου τα μεγέθη ροής στο κόμβο fake1 υπενθυμίζεται ότι υπολογίζονται με βάση τα μεγέθη που επιβάλλονται από τις οριακές συνθήκες, ενώ η πληροφορία που λείπει λαμβάνεται από τα αντίστοιχα μεγέθη του εκάστοτε οριακού κόμβου. Δηλαδή θα έχουμε:

$$p_{fake1} = p_1 \quad (6.59)$$

$$T_{fake1} = T_t \left(\frac{p_1}{p_t} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (6.60)$$

$$V_{fake1} = (2Cp(T_t - T_{fake1}))^{0.5} \quad (6.61)$$

$$\rho_{fake1} = \frac{p}{r_g T_{fake1}} \quad (6.62)$$

$$(\rho E)_{fake1} = \frac{p_{fake1}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \frac{(\rho u)_{fake1}^2}{\rho_{fake1}} \quad (6.63)$$

Αντίστοιχα, για τις συζυγείς μεταβλητές στην έξοδο του αγωγού θα ισχύουν:

$$(\psi_1)_{out} = (\psi_1)_z \quad (6.64)$$

$$(\psi_2)_{out} = \left[\frac{\psi_1}{2u} \frac{u^2(\gamma - 2) - 2\gamma E}{\gamma E + \frac{u^2}{2}(1 - \gamma)} \right]_{out} \quad (6.65)$$

$$(\psi_3)_{out} = \left[\psi_1 \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} \right]_{out} \quad (6.66)$$

όπου τα μεγέθη ροής στο κόμβο out είναι:

$$\rho_{out} = \rho_z \quad (6.67)$$

$$u_{out} = u_z \quad (6.68)$$

$$(\rho E)_{out} = \frac{p_{out}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \frac{(\rho u)_{out}^2}{\rho_{out}} \quad (6.69)$$

Γράφοντας το \vec{R}_ψ για το κόμβο 1, κατά αντιστοιχία με τη σχέση 6.29 θα έχουμε:

$$\vec{R}_{\psi_1} = - \left[A_1^T (\vec{\psi}_{1+\frac{1}{2}} - \vec{\psi}_{1-\frac{1}{2}}) + T_{u_1}^T \vec{\psi}_1 \Delta x_1 + (p(x) - p(x)_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)_1^T \Delta x_1 \right] \longrightarrow$$

$$\vec{R}_{\psi_1} = - \left[A_{1+\frac{1}{2}}^{T+} \vec{\psi}_2 + \left(A_{1+\frac{1}{2}}^{T-} - A_1^{T+} + T_{u_1}^T \Delta x_1 \right) \vec{\psi}_1 - A_1^{T-} \vec{\psi}_{fake1} + (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)_1^T \Delta x_1 \right] \quad (6.70)$$

6.6. ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΟΣ ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΤΥΠΩΣΗΣ ΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΝΘΗΚΩΝ.6-19

όπου $\vec{\psi}_{fake1} = [(\psi_1)_{fake1}, (\psi_2)_{fake1}, (\psi_3)_{fake1}]$ όπου λαμβάνονται από τις σχέσεις 6.56, 6.57 και 6.58 αντίστοιχα.

Από την έκφραση 6.70 προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \vec{\psi}_1} = - \left[A_{1+\frac{1}{2}}^{T-} - A_1^{T+} + Tu_1^T - A_1^{T-} \frac{\partial \vec{\psi}_{fake1}}{\partial \psi_1} \right] \quad (6.71)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_2} = - \left[A_{1+\frac{1}{2}}^{T+} \right] \quad (6.72)$$

ενώ για κάθε $j > 2$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_j} = 0 \quad (6.73)$$

με

$$\frac{\partial \vec{\psi}_{fake1}}{\partial \vec{\psi}_1} = \begin{bmatrix} 0 & -u & u^2 \frac{\frac{u^2}{2c^2} - \frac{\gamma-3}{2(\gamma-1)} - \frac{c^2}{u^2(\gamma-1)}}{1 - \frac{u^2}{c^2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{fake1} \quad (6.74)$$

Αντίστοιχα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, το \vec{R}_{ψ} για το κόμβο z είναι:

$$\vec{R}_{\psi_z} = - \left[A_z^T (\vec{\psi}_{z+\frac{1}{2}} - \vec{\psi}_{z-\frac{1}{2}}) + T_{u_z}^T \vec{\psi}_z \Delta x_z + (p(x) - p(x)_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)_z^T \Delta x_z \right] \rightarrow$$

$$\vec{R}_{\psi_z} = - \left[A_z^{T+} \vec{\psi}_{out} + \left(A_z^{T-} - A_{z-\frac{1}{2}}^{T+} + T_{u_z}^T \Delta x_z \right) \vec{\psi}_z - A_{z-\frac{1}{2}}^{T-} \vec{\psi}_{z-1} + (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)_z^T \Delta x_z \right] \quad (6.75)$$

όπου $\vec{\psi}_{out} = [(\psi_1)_{out}, (\psi_2)_{out}, (\psi_3)_{out}]$ όπου λαμβάνονται από τις σχέσεις 6.64, 6.65 και 6.66 αντίστοιχα.

Από την έκφραση 6.75 προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_{z-1}} = A_{z-\frac{1}{2}}^{T-} \quad (6.76)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_z} = - \left[-A_{z-\frac{1}{2}}^{T+} + A_z^{T-} + T_{u_z}^T + A_z^{T+} \frac{\partial \vec{\psi}_{out}}{\partial \vec{\psi}_z} \right] \quad (6.77)$$

ενώ για κάθε $j < z - 1$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \vec{\psi}_j} = 0 \quad (6.78)$$

με

$$\frac{\partial \vec{\psi}_{out}}{\partial \vec{\psi}_z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \left[\frac{u^2(\gamma-2)-2\gamma E}{2u(\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2})} \right] & 0 & 0 \\ \frac{1}{\gamma E + \frac{u^2(1-\gamma)}{2}} & 0 & 0 \end{bmatrix}_{out} \quad (6.79)$$

Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη αυτήν την διατύπωση των οριακών συνθηκών μπορεί να υπολογιστεί η συζυγής εξίσωση (6.24) και στη συνέχεια να υπολογιστούν οι παράγωγοι ευαισθησίας (6.12).

6.7 Σχήμα επίλυσης συζυγών εξισώσεων 2ης τάξης ακρίβειας.

Προηγουμένως έγινε ανάλυση του τρόπου επίλυσης του συζυγούς προβλήματος με ακρίβεια πρώτης τάξης στους οριακούς κόμβους. Στην παρούσα ενότητα, θα παρουσιαστεί αναλυτικά η διακριτοποίηση του συζυγούς προβλήματος με δεύτερης τάξης ακρίβεια στους εσωτερικούς κόμβους. Αρχικά χρησιμοποιείται FVS με σχήμα προεκβολής MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws) για τη διακριτοποίηση του \vec{R}_{ψ} και στη συνέχεια, προκύπτει το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}_{\psi}}{\partial \vec{\psi}}$ για ακρίβεια δεύτερης τάξης ως αποτέλεσμα της παραγωγίσιμης του \vec{R}_{ψ} .

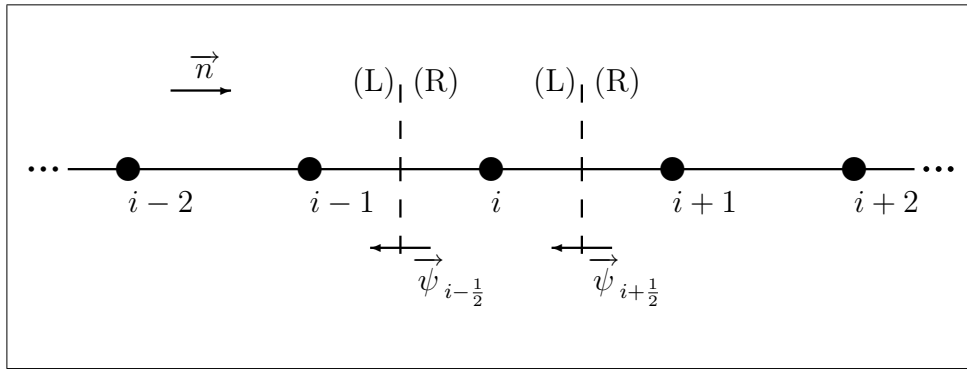
6.7. ΣΧΗΜΑ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΣΥΖΥΓΓΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ 2ΗΣ ΤΑΞΗΣ ΑΚΡΙΒΕΙΑΣ.6-21

Για ακρίβεια δεύτερης τάξης σε οποιοδήποτε εσωτερικό κόμβο i , ισχύει η σχέση:

$$\vec{R}_{\psi i} = - \left[A^T (\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}) + T_u^T \Delta x_i + (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \Delta x_i \right] = 0 \quad (6.80)$$

Δηλαδή, ο τύπος είναι ίδιος με αυτόν για πρώτη τάξης ακρίβεια. Το μόνο που αλλάζει είναι το πώς υπολογίζονται τα $\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}$, $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}$ για ακρίβεια δεύτερης τάξης.

Πιο αναλυτικά, σε συμφωνία με το παρακάτω σχήμα, ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:



$$A^T \vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} (\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}^R) + A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} (\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}^L) \quad (6.81)$$

$$A^T \vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}} = A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} (\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}^R) + A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} (\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}^L) \quad (6.82)$$

όπου,

$$\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}^R = \vec{\psi}_{i+1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)_{i+1} (x_{i+1} - x_i) \quad (6.83)$$

$$\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}^L = \vec{\psi}_i + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)_i (x_{i+1} - x_i) \quad (6.84)$$

Αντίστοιχα για το $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}$ και $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}^L$ ισχύουν τα εξής:

$$\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}^R = \vec{\psi}_i - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)_i (x_i - x_{i-1}) \quad (6.85)$$

$$\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}^L = \vec{\psi}_{i-1} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \right)_{i-1} (x_i - x_{i-1}) \quad (6.86)$$

Επομένως η σχέση 6.81 με χρήση των 6.83 6.84 τροποποιείται σε

$$\begin{aligned} A^T \vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}} &= \left(-\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \vec{\psi}_{i-1} + \left(\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} + A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \right) \vec{\psi}_i \\ &+ \left(\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \right) \vec{\psi}_{i+1} + \left(-\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} \right) \vec{\psi}_{i+2} \end{aligned} \quad (6.87)$$

Ενώ η σχέση 6.82 με χρήση των 6.85 6.86 τροποποιείται σε

$$\begin{aligned} A^T \vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}} &= \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \right) \vec{\psi}_{i-2} + \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \right) \vec{\psi}_{i-1} \\ &+ \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \right) \vec{\psi}_i + \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \vec{\psi}_{i+1} \end{aligned} \quad (6.88)$$

Υπενθυμίζεται ότι στη παρούσα διπλωματική έχουν επιλεγεί τα Δx να είναι ισαπέχοντα. Ωστόσο, οι τύποι γράφτηκαν στη παραπάνω μορφή για χάρη της γενικότητας (6.87, 6.88).

Επομένως, αν στη σχέση 6.80 αντικατασταθούν τα $\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}$ και $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}$ με τις σχέσεις (6.87) και (6.88) αντίστοιχα, προκύπτει μια σχέση της παρακάτω μορφής που θα ισχύει για $i = 3, \dots, z - 2$:

$$\vec{R}_{\psi i} = b b e f_i \vec{\psi}_{i-2} + b e f_i \vec{\psi}_{i-1} + d i a g_i \vec{\psi}_i + a f t_i \vec{\psi}_{i+1} + a a f t_i \vec{\psi}_{i+2} - (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)_i^T \Delta x_i = 0$$

όπου οι συντελεστές κωδικοποιούνται με τα ευκολομημόνευτα ονόματα *diag* (δι-αγώνιος), *aft*, *aaft* (επόμενοι δύο) και *bef*, *bbef* (προηγούμενοι δύο κόμβοι).

Ωστόσο, όπως αναφέρθηκε και στην πρώτης τάξης ακρίβεια, σκοπός είναι ο υπολογισμός του μητρώου $\frac{\partial \vec{R}_{\psi}}{\partial \vec{\psi}}$. Άρα, σύμφωνα με τη παραπάνω σχέση, αναγράφεται η τιμή των παραγώγων για εσωτερικούς κόμβους $i = 3, \dots, z - 2$:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_{i-2}} = b b e f_i = -\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \quad (6.89)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_{i-1}} = b e f_i = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \quad (6.90)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_i} = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} - A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} + \frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} - T_u^T \Delta x_i \quad (6.91)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_{i+1}} = a f t_i = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} - A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} - \left(\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \quad (6.92)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_{i+2}} = a a f t_i = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+2} - x_i} \quad (6.93)$$

ενώ ισχύει:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi i}}{\partial \vec{\psi}_j} = 0 \quad , \quad j \neq i-2, i-1, i, i+1, i+2 \quad (6.94)$$

Όπου ο προσδιορισμός του μητρώου $A_{i+\frac{1}{2}}^{+/-}$ και $A_{i-\frac{1}{2}}^{+/-}$ παρουσιάστηκε αναλυτικά στο κεφάλαιο 2.

Οι σχέσεις που δόθηκαν παραπάνω, αναφέρονται στους εσωτερικούς κόμβους $i = 3, \dots, z-2$. Για τους κόμβους $i = 1$ και $i = z$ ισχύουν οι σχέσεις που δίνονται στην ενότητα επιβολής οριακών συνθηκών για πρώτης τάξης ακρίβεια. Επομένως, απομένει η καταγραφή των σχέσεων για τους εσωτερικούς κόμβους $i = 2$ και $i = z-1$.

Για τον κόμβο $i = 2$ δεν είναι δυνατόν να υπάρχει παρουσία προ-προηγούμενου κόμβου, για αυτό θα έχουμε \vec{R}_{ψ} της μορφής:

$$\vec{R}_{\psi_2} = \left[bef_2 \vec{\psi}_1 + diag_2 \vec{\psi}_2 + aft_2 \vec{\psi}_3 + aaft_2 \vec{\psi}_4 \right] - (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \Delta x_2 = 0 \quad (6.95)$$

Ουσιαστικά, η παραπάνω αλλαγή προέρχεται από αλλαγή στο διάνυσμα της συζυγούς μεταβλητής $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}$. Πιο αναλυτικά, όπως έχουμε ήδη αναφέρει για την εύρεση του \vec{R}_{ψ} κρίνεται απαραίτητη η χρήση των σχέσεων $\vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}$ και $\vec{\psi}_{i-\frac{1}{2}}$. Ωστόσο, για τον κόμβο $i = 2$ είναι αδύνατη η ύπαρξη του όρου $\vec{\psi}_{i-2}$, οπότε για να αποφευχθεί η παρουσία του παραπάνω όρου, θα χρησιμοποιηθεί αντί για κεντρικές διαφορές 2ης τάξης, το σχήμα πρόσω διαφορίσης πρώτης τάξης, όσον αφορά τον υπολογισμό της κλίσης $(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x})_{i-1}$.

Ακριβώς με την ίδια λογική, όσον αφορά τον κόμβο $i = z-1$, λόγω απουσίας μεθεπόμενου κόμβου θα χρησιμοποιηθεί σχήμα πίσω διαφορίσης για τον υπολογισμό της κλίσης $(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x})_{i+1}$.

Επομένως, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν το $\vec{R}_{\psi_{z-1}}$ θα είναι της μορφής:

$$\vec{R}_{\psi_{z-1}} = bbef_{z-1} \vec{\psi}_{z-3} + bef_{z-1} \vec{\psi}_{z-2} + diag_{z-1} \vec{\psi}_{z-1} + aft_{z-1} \vec{\psi}_z - (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \Delta x_{z-1} = 0$$

Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν παραπάνω, γίνεται σαφές πως προκύπτουν τα \vec{R}_{ψ} για τον κόμβο $i = 2$ και $i = z-1$ αντίστοιχα. Επομένως, μπορούν να παρουσιαστούν οι παράγωγοι των συζυγών εξισώσεων για τους προαναφερόμενους κόμβους:

Κόμβος $i = 2$:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_1} = \frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} + \left[\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} + \frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^{T-} \right] \quad (6.96)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_2} = -\frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_3 - x_2}{x_4 - x_2} - A_{2+\frac{1}{2}}^{T-} + \left[\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^{T-} + A_{2-\frac{1}{2}}^{T+} \right] - T_u^T \Delta x_2 \quad (6.97)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_3} = -\frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} - A_{2+\frac{1}{2}}^{T+} + \left[-\frac{1}{2} A_{2-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} \right] \quad (6.98)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_4} = \frac{1}{2} A_{2+\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_3 - x_2}{x_4 - x_2} \quad (6.99)$$

και :

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \vec{\psi}_j} = 0 \quad , \quad j > 4 \quad (6.100)$$

Κόμβο $i = z - 1$:

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_{i-2}} = -\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} \quad (6.101)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_{i-1}} = \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \left[\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \right] \quad (6.102)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_i} = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} - A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} + \left[\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-2}} + A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \right] - T_u^T \Delta x_i \quad (6.103)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{\psi_i}}{\partial \vec{\psi}_{i+1}} = -\frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T+} - \frac{1}{2} A_{i+\frac{1}{2}}^{T-} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \left(-\frac{1}{2} A_{i-\frac{1}{2}}^{T+} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) \quad (6.104)$$

και :

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j < z - 3 \quad (6.105)$$

Με βάση τα παραπάνω προκύπτει ως συμπέρασμα ότι το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}_{\psi}}{\partial \vec{\psi}}$ είναι μπλοκ πενταδιαγώνιο, με μηδενικό τον τρίτο υποπίνακα της πρώτης γραμμής και το $z - 2$

υπομητρώο της z γραμμής (λόγω επιβολής οριακών συνθηκών πρώτης τάξης ακρίβειας). Το μητρώο με τα μη μηδενικά και τα μηδενικά του στοιχεία έχει ως εξής :

$$\frac{\partial \vec{R}_\psi}{\partial \vec{\psi}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_1}}{\partial \psi_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \psi_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \psi_3} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_2}}{\partial \psi_4} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_{\psi_3}}{\partial \psi_1} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_3}}{\partial \psi_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_3}}{\partial \psi_3} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_3}}{\partial \psi_4} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_3}}{\partial \psi_5} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_4}}{\partial \psi_2} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_4}}{\partial \psi_3} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_4}}{\partial \psi_4} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_4}}{\partial \psi_5} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_4}}{\partial \psi_6} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_{z-1}} & \frac{\partial \vec{R}_{\psi_z}}{\partial \psi_z} \end{bmatrix}$$

6.8 Επιλύτης συζυγούς προβλήματος.

Όπως ήδη τονίστηκε παραπάνω, στη συνεχή συζυγή μέθοδο η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης (6.25) πραγματοποιείται με την τεχνική της χρονοπροέλασης. Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν, ο τελεστής της συζυγούς εξίσωσης \vec{R}_ψ (επομένως και το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}_\psi}{\partial \vec{\psi}}$) μπορεί να διακριτοποιηθεί είτε με 1ης τάξης είτε με 2ης τάξης ακρίβεια.

Σε περίπτωση που υπολογιστεί με 1ης τάξης ακρίβεια, το μητρώο είναι τριδιαγώνιας μορφής, επομένως στόχος είναι η επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων τριδιαγώνιας μορφής (3-διαγώνιος αλγόριθμος Thomas με εμπρός και πίσω αντικατάσταση). Ωστόσο, κάθε στοιχείο του μητρώου αντιστοιχεί σε ένα 3×3 υπομητρώο (μπλοκ). Επομένως, η επίλυση του μπλοκ-τριδιαγώνιου συστήματος γίνεται χρησιμοποιώντας τον τροποποιημένο αλγόριθμο Thomas, ο οποίος μπορεί να διαχειρίζεται αντί για βαθμωτά μεγέθη υποπίνακες 3×3 . Αυτό επιτυγχάνεται με διάσπαση σε πάνω και κάτω τριγωνικά μητρώα (παραγοντοποίηση LU).

Από την άλλη πλευρά, σε περίπτωση που το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}_\psi}{\partial \vec{\psi}}$ είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας τότε είναι πενταδιαγώνιας μορφής, επομένως στόχος είναι η επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων πενταδιαγώνιας μορφής με εμπρός και πίσω αντικατάσταση. Ωστόσο, κάθε στοιχείο του μητρώου αντιστοιχεί σε ένα 3×3 υπομητρώο (μπλοκ). Ε-

πομένως, για την επίλυση των διακριτοποιημένων ροϊκών εξισώσεων, σε κάθε χρονικό βήμα, χρησιμοποιούμε επίλυτη μπλοκ-πενταδιαγώνιων συστημάτων.

Άρα δημιουργείται ένας επαναληπτικός αλγόριθμος με επαναλήψεις ή ορθότερα ψευδο-χρονικά βήματα, όπου για κάθε ψευδοχρονική στιγμή οι διακριτοποιημένες εξισώσεις επιλύονται επακριβώς (με μέθοδο παραγοντοποίησης ή με Thomas).

Κεφάλαιο 7

Πιστοποίηση Αντίστροφου Σχεδιασμού με Συνεχή Μέθοδο.

7.1 Εισαγωγικά σχόλια

Στο προηγούμενο κεφάλαιο παρουσιάστηκε ο τρόπος εύρεσης πρώτων και δεύτερων παραγώγων με τη συνεχή συζυγή μέθοδο για $1 - D$ προβλήματα. Στην παρούσα ενότητα σκοπός είναι να αποδειχτεί ότι και με αυτήν την μέθοδο τα αποτελέσματα είναι εξίσου ικανοποιητικά κατά την εφαρμογή της απότομης καθόδου και της μεθόδου Newton όπως και με τη χρήση της διακριτής συζυγούς μεθόδου.

Στην πρώτη εφαρμογή, θα παρουσιαστεί η μέθοδος της απότομης καθόδου, χρησιμοποιώντας πρώτες παραγώγους υπολογισμένες με τη συνεχή συζυγή μέθοδο, για την ίδια εφαρμογή που επιλύθηκε στο διακριτό πρόβλημα, ώστε να είναι δυνατή η σύγκριση μεταξύ τους. Αρχικά, όπως έχει ήδη αναφερθεί το συνεχές συζυγές πρόβλημα μπορεί να επιλυθεί με πρώτης και με δεύτερης τάξης ακρίβεια, ενώ όσον αφορά το ευθύ πρόβλημα επιλέγεται, για λόγους που αναπτύχθηκαν στις εφαρμογές του διακριτού προβλήματος, να επιλυθεί εδώ με δεύτερης τάξης ακρίβεια. Επομένως, στην εφαρμογή αυτή, θα γίνει σύγκριση πρώτων παραγώγων μεταξύ των μεθόδων της διακριτής και της συνεχούς συζυγούς μεθόδου, καθώς και σύγκριση παραγώγων μεταξύ 1ης και 2ης τάξης ακρίβεια του συνεχούς συζυγούς προβλήματος. Υπενθυμίζεται ότι χρησιμοποιείται επίλυση ευθέως προβλήματος με ακρίβεια δεύτερης τάξης.

Εν κατακλείδει στη τελευταία εφαρμογή, θα παρουσιαστεί η μέθοδος Newton, χρησιμοποιώντας πρώτες παραγώγους υπολογισμένες ουσιαστικά από το διακριτό πρόβλημα, (αφού χρησιμοποιούμε το $\frac{dU}{db}$), ενώ οι δεύτερες παράγωγοι θα υπολογιστούν με τη συνεχή συζυγή τεχνική για την ίδια εφαρμογή που επιλύθηκε στο διακριτό πρόβλημα, ώστε να είναι δυνατή η σύγκριση μεταξύ τους. Δηλαδή, στην εφαρμογή αυτή, θα γίνει σύγκριση δεύτερων παραγώγων μεταξύ των μεθόδων της διακριτής και της συνεχούς συζυγούς μεθόδου, καθώς και σύγκριση δεύτερων παραγώγων μεταξύ 1ης και 2ης τάξης ακρίβειας του συνεχούς συζυγούς προβλήματος.

7.2 Υπολογισμός απότομης καθόδου με συνεχή συζυγή μέθοδο.

Στην παρούσα εφαρμογή, σκοπός είναι ο αντίστροφος σχεδιασμός $1 - D$ αγωγού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου, χρησιμοποιώντας τη συνεχή συζυγή μέθοδο για τον υπολογισμό της πρώτης παραγωγού.

Αρχικά, θα παρουσιαστούν για την αρχική γεωμετρία του αγωγού και μια ενδιάμεση θέση οι πρώτες παράγωγοι υπολογισμένες με τη διακριτή και συνεχή συζυγή μέθοδο. Ταυτόχρονα στο ίδιο σχήμα θα απεικονίζονται οι παράγωγοι που προέκυψαν με τη συνεχή συζυγή μέθοδο χρησιμοποιώντας ακρίβεια 1ης και 2ης τάξης.

Από τα επόμενα διαγράμματα, διαπιστώνεται μία απόκλιση στις τελευταίες τιμές των παραγωγών ευαισθησίας έναντι των αντίστοιχων της διακριτής μεθόδου. Ωστόσο, πρέπει να αναφερθεί ότι στη συνεχή συζυγή μέθοδο δεν αναμένεται απόλυτη ταύτιση των τιμών των παραγωγών με αυτών των πεπερασμένων διαφορών σε αντίθεση με όσα αναφέρθηκαν στη διακριτή συζυγή μέθοδο που κρίνεται ως βασική προϋπόθεση.

Πιο αναλυτικά, κατά τη επίλυση του ευθέως προβλήματος έγινε η γνωστή υπόθεση που αφορά τον όρο $\frac{\partial A}{\partial U} = 0$. Στο διακριτό συζυγές πρόβλημα λαμβάνεται η παραδοχή αυτή μία φορά και μεταφέρει το σφάλμα της στο μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ που είναι υπεύθυνο για την επίλυση του συζυγούς προβλήματος. Ωστόσο, στο συνεχή συζυγή πρόβλημα, η παραδοχή αυτή λαμβάνεται σε δύο διαφορετικές φάσεις του προβλήματος μας. Δηλαδή, λαμβάνεται αρχικά κατά την επίλυση του ευθέως προβλήματος και στη συνέχεια, με τις απλοποιήσεις που έγιναν κατά τη διατύπωση-μαθηματική θεμελίωση του συνεχούς συζυγούς προβλήματος (κεφάλαιο 6). Επομένως, είναι πιθανό η επίδραση αυτής της υπόθεσης να είναι μεγαλύτερη στο συνεχές συζυγές πρόβλημα. Τέλος, υπενθυμίζεται ότι κατά τη διακριτοποίηση του διανύσματος ροής με flux vector splitting, για το διάνυσμα ροής επειδή ισούται με $\vec{f} = A\vec{U}$ έχουμε $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^+ \vec{U}_i + A_{i+\frac{1}{2}}^- \vec{U}_{i+1}$ ενώ για τη συζυγή μεταβλητή εφαρμόζεται ακριβώς το ίδιο σχήμα θεωρώντας προσεγγιστικά ότι το $A^T \vec{\psi}_{i+\frac{1}{2}}$ ακολουθεί την ίδια διαδικασία. Πιο αναλυτικά, στο συζυγές πρόβλημα οι εξισώσεις δεν έχουν συντηρητική γραφή και γίνεται παραδοχή κατά την εφαρμογή της παραγοντικής ολοκλήρωσης.

Στη συνέχεια, κρίθηκε απαραίτητη η εφαρμογή της μεθόδου της απότομης καθόδου με σκοπό να συγκριθεί η ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου. Το βήμα που χρησιμοποιήθηκε είναι ίδιο με αυτό που εφαρμόστηκε στο διακριτό συζυγές πρόβλημα (βήμα=30). Όπως θα διαπιστώσουμε στη συνέχεια η μέθοδος της απότομης καθόδου με τη συνεχή συζυγή μέθοδο συγκλίνει περίπου στον ίδιο αριθμό επαναλήψεων με αυτόν της διακριτής μεθόδου. Το αποτέλεσμα αυτό μας αποδεικνύει ότι και οι δύο μέθοδοι επιτυγχάνουν περίπου στον ίδιο αριθμό επαναλήψεων τη σύγκλιση.

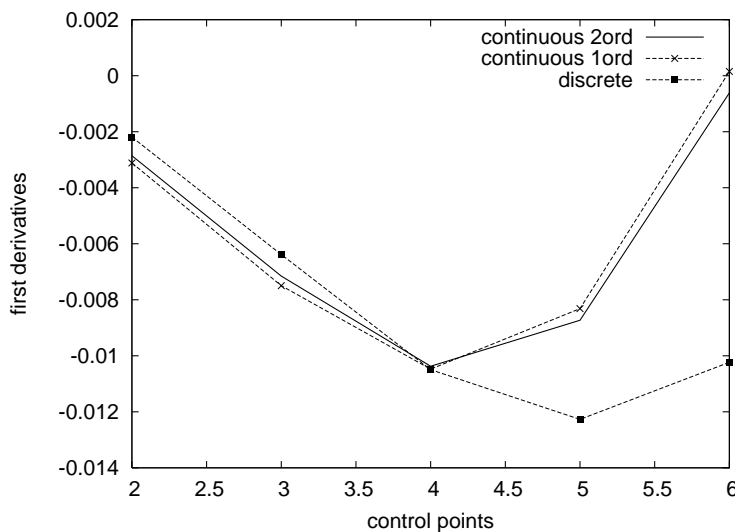
Από την άλλη πλευρά παρατηρείται ότι χρησιμοποιώντας δεύτερης τάξης ακρίβεια οι παράγωγοί μας προσεγγίζουν καλύτερα αυτές τις διακριτές μεθόδου, ακολουθώντας

7.2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΑΠΟΤΟΜΗΣ ΚΑΘΟΔΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΣΥΖΥΓΗ ΜΕΘΟΔΟ.7-3

ωστόσο την ίδια μορφή με αυτών της πρώτης τάξης ακρίβεια. Το αποτέλεσμα αυτό είναι λογικό αφού ο υπολογισμός του συνεχούς συζυγούς προβλήματος γίνεται με καλύτερη ακρίβεια.

Για την κατανόηση της μορφής των πρώτων παραγώγων της συνεχούς συζυγούς μεθόδου δοκιμάστηκαν δύο τρόποι εφαρμογής των οριακών συνθηκών, όπως εξάλλου περιγράφηκαν αναλυτικά στο κεφάλαιο 6, χωρίς ωστόσο να διαφοροποιήσει τα αποτελέσματά μας. Επιπλέον δοκιμάστηκε ένας δεύτερος τρόπος διακριτοποίησης (εναλλακτική μορφή μονοδιάστατου προβλήματος Riemman) έναντι της αναλυτικά, στο κεφάλαιο 6, παρουσιαζόμενης flux vector splitting, ο οποίος έδωσε, και αυτός ουσιαστικά, τα ήδη υπάρχοντα αποτελέσματα. Έτσι από διερεύνηση, βγήκε το συμπέρασμα ότι η διαφοροποίηση αυτή στις παραγώγους οφείλεται στις προσεγγίσεις που λήφθηκαν κατά τον υπολογισμό της συνεχούς συζυγούς μεθόδου.

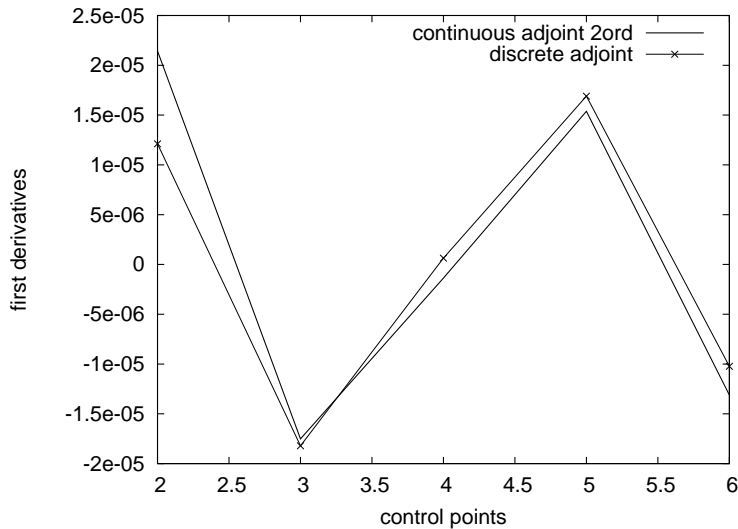
Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των παραγώγων για την αρχική θέση:



Σχήμα 7.1: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με τη συνεχή συζυγή μέθοδο με 2τάξης ακρίβεια (συνεχής γραμμή), με τη διακριτή συζυγή μέθοδο (μαύρα τετραγωνάκια) και με χρήση συνεχούς συζυγούς μεθόδου με 1τάξης ακρίβεια(αστερίσκος). Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

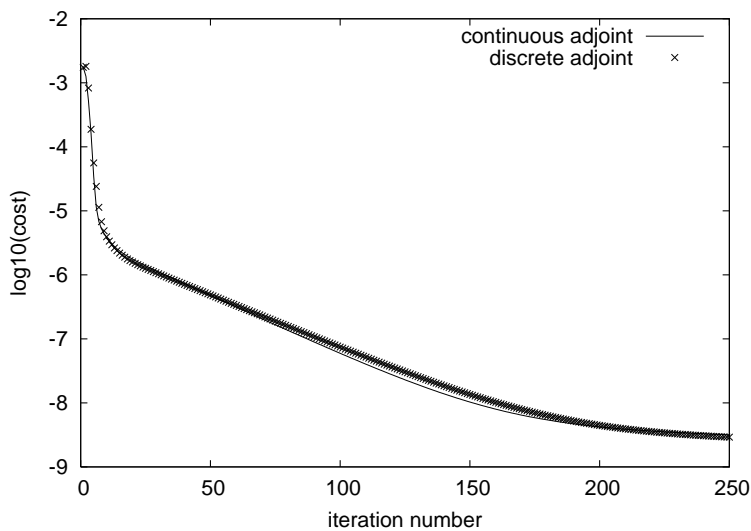
7-4 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7. ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΜΕΘΟΔΟ.

και για την ενδιάμεση:



Σχήμα 7.2: Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός σημείων ελέγχου. Κατακόρυφος άξονας: τιμές πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με τη συνεχή συζυγή μέθοδο 2τάξης (έντονη συνεχής γραμμή), με τη διακριτή συζυγή μέθοδο (αστερίσκος). Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία.

Τέλος παρουσιάζεται ο αντίστροφος σχεδιασμός με τη μέθοδο της απότομης καθόδου για βήμα 30:



Σχήμα 7.3: Η πορεία της σύγκλισης με τη μέθοδο απότομης καθόδου για συνεχή και διακριτή συζυγή μέθοδο. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου. Χρησιμοποιείται βήμα 30.

7.3 Υπολογισμός μεθόδου Newton με συνεχή συζυγή μέθοδο.

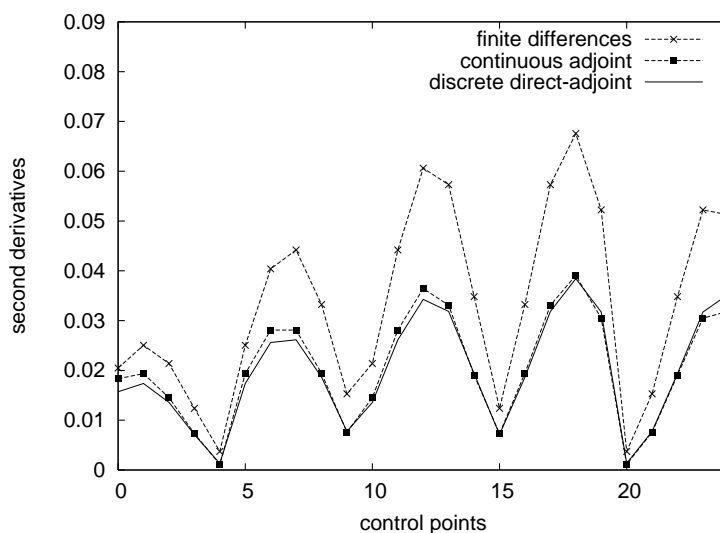
Στην παρούσα εφαρμογή, σκοπός είναι ο αντίστροφος σχεδιασμός $1 - D$ αγωγού με τη μέθοδο Newton, χρησιμοποιώντας τη συνεχή συζυγή μέθοδο για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου.

Υπενθυμίζεται ότι στη συνεχή συζυγή μέθοδο, το μητρώο $\frac{d\bar{U}}{db}$ που απαιτείται για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου και της πρώτης παραγώγου λαμβάνεται από το διακριτό πρόβλημα.

Αρχικά, θα παρουσιαστούν, για την αρχική γεωμετρία του αγωγού και μία ενδιάμεση θέση, οι δεύτερες παράγωγοι υπολογισμένες με τη διακριτή και τη συνεχή συζυγή μέθοδο, όπου θα διαπιστωθεί ότι με τη συνεχή και τη διακριτή συζυγή μέθοδο προκύπτουν οι παράγωγοι πολύ κοντά, ενώ καμμία από τις δύο μεθόδους δεν προσεγγίζει αυτές των πεπερασμένων διαφορών. Υπενθυμίζεται ότι και στη συνεχή και τη διακριτή συζυγή μέθοδο έγινε η παραδοχή ότι το A δεν μεταβάλλεται συναρτήσει της ροής, δηλαδή $\frac{\partial A}{\partial \bar{U}} = 0$.

Τέλος, διαπιστώνεται ότι με τη διακριτή και τη συνεχή συζυγή μέθοδο ο αριθμός επαναλήψεων κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό του αγωγού με τη μέθοδο Newton είναι πολύ κοντά.

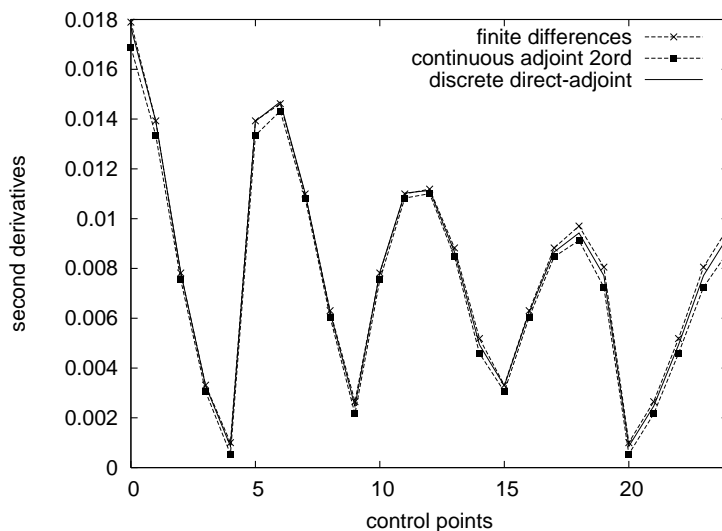
Στο παρακάτω σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.



Σχήμα 7.4: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με τη διακριτή συζυγή μέθοδο 2τάξης (συνεχής γραμμή), με τη συνεχή συζυγή μέθοδο (μαύρα τετραγωνάκια) και με πεπερασμένες διαφορές (διακεκομμένη γραμμή). Το σχήμα αυτό αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία.

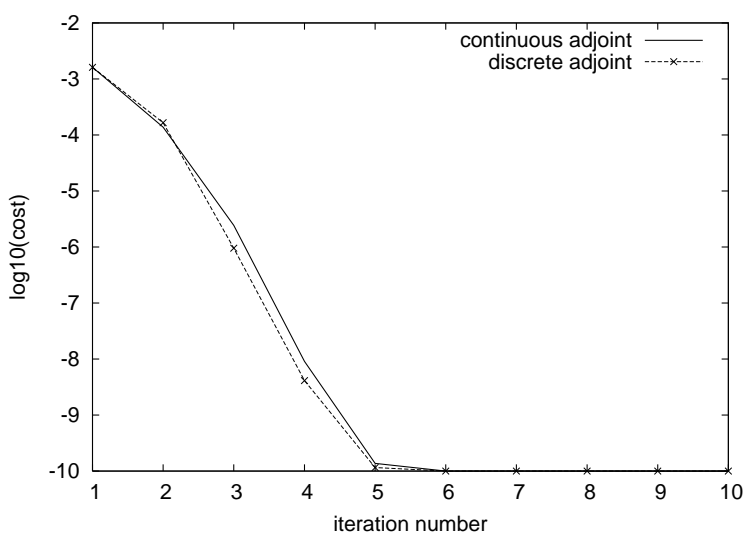
7-6 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7. ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΜΕΘΟΔΟ.

Στο παρακάτω σχήμα αναφέρεται στην ενδιάμεση γεωμετρία.



Σχήμα 7.5: Οριζόντιος άξονας : στοιχεία Hessian μητρώου. Κατακόρυφος άξονας : τιμές δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου. Οι παράγωγοι υπολογισμένες με τη διακριτή συζυγή μέθοδο 2τάξης (συνεχής γραμμή), με τη συνεχή συζυγή μέθοδο (μαύρα τετραγωνάκια) και με πεπερασμένες διαφορες (διακεκομμένη γραμμή). Το σχήμα αυτό αναφέρεται σε ενδιάμεση γεωμετρία.

Το παρακάτω σχήμα παρουσιάζει τη πορεία σύγκλισης με τη μέθοδο Newton με τη συνεχή και διακριτή συζυγή τεχνική.



Σχήμα 7.6: Η πορεία της σύγκλισης με τη μέθοδο Newton με τη συνεχή και διακριτή συζυγή τεχνική. Οριζόντιος άξονας: αριθμός επαναλήψεων. Κατακόρυφος άξονας: δεκαδικός λογάριθμος της τιμής της συνάρτησης - στόχου.

Κεφάλαιο 8

Συμπεράσματα

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκε η διακριτή συζυγής μέθοδος για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου, ενώ προγραμματίστηκε και δοκιμάστηκε επιτυχώς ο υπολογισμός του Hessian μητρώου με την ίδια μέθοδο σε 1D προβλήματα ροής. Ταυτόχρονα αναπτύχθηκε προγραμματίστηκε και δοκιμάστηκε επιτυχώς η συνεχής συζυγής μέθοδος για τον υπολογισμό πρώτων και δευτέρων παραγώγων της συνάρτησης στόχου σε 1D ροή. Στη βάση αυτών, διερευνήθηκαν προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου και της μεθόδου Newton στηριζόμενοι στις μεθόδους που προαναφέρθηκαν. Το λογισμικό αριθμητικής επίλυσης του ευθέος και του συζυγούς προβλήματος, κρίθηκε σκόπιμο να δοκιμαστεί τόσο για πρώτη όσο και για δεύτερης τάξης ακρίβεια. Σε αυτήν την ενότητα συνοψίζονται τα συμπεράσματά όπως πρέκυψαν από τον προγραμματισμό και την εφαρμογή των μεθόδων:

- Αποδείχθηκε πλήρως η ορθότητα του υπολογισμού της πρώτης παραγώγου με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, συγκρινόμενη με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης και των πεπερασμένων διαφορών.
- Αποδείχθηκε η δυνατότητα της διακριτής συζυγούς μεθόδου να υπολογίζει με ακρίβεια το Hessian μητρώο χρησιμοποιώντας ως μέτρο σύγκρισης αποτελέσματα από τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.
- Αποδείχθηκε η δυνατότητα υπολογισμού του Hessian μητρώου με τη συνεχή συζυγή μέθοδο, χρησιμοποιώντας το υπολογισμένο, από τη διακριτή μέθοδο, μητρώο $\frac{d\vec{U}}{db}$.
- Διερευνήθηκε η σημασία του όρου $\frac{\partial(A^{+,-})}{\partial\vec{U}}$ κατά τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης στόχου και του Hessian μητρώου με τη συνεχή και διακριτή συζυγή μέθοδο. Δείχθηκε ότι η παραπάνω παραδοχή επηρεάζει την ακρίβεια υπολογισμού του Hessian μητρώου τόσο με τη συνεχή όσο και τη διακριτή συζυγή μέθοδο.

- Παρατηρήθηκε ότι όσο πλησιάζει το πρόβλημα στη βέλτιστη λύση, η επιρροή του όρου $\frac{\partial(A)}{\partial U}$ στη τιμή των παραγώγων εξαλείφεται σταδιακά.
- Διαπιστώθηκε ότι οι παραδοχές δεν επηρεάζουν τον αντίστροφο σχεδιασμό του αγωγού. Δηλαδή, η βελτιστοποίηση γίνεται με χρήση προσεγγιστικών παραγώγων. Αν επιθυμούνται ακριβείς παράγωγοι πρέπει να εισαχθεί στους υπολογισμούς ο όρος $\frac{\partial(A)}{\partial U}$.
- Διαπιστώθηκε η υπεροχή της Newton μεθόδου με χρήση είτε συνεχούς είτε διακριτής συζυγούς μεθόδου σε σχέση με την μέθοδο της απότομης καθόδου, για μικρό αριθμό μεταβλητών σχεδιασμού. Για μεγάλο αριθμό μεταβλητών ελάγχου, μπορεί η μέθοδος Newton να εξακολουθεί να συγκλίνει σε πολύ μικρό αριθμό επαναλήψεων, αλλά η κάθε επανάληψη της στοιχίζει N+1 ισοδύναμες επιλύσεις.

Βιβλιογραφία

- [1] D.I. PAPANIMITRIΟΥ, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ: Direct, Adjoint and Mixed Approaches for the Computation of Hessian in Airfoil Design Problems, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 53, pp. 455-469, 2007.
- [2] D.I. PAPANIMITRIΟΥ, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ: Computation of the Hessian Matrix in Aerodynamic Inverse Design using Continuous Adjoint Formulations, Computers and Fluids, , 37, pp. 1029-1039, 2008.
- [3] PAPANIMITRIΟΥ D.I., ZYMARIS, A., S., GIANNAKOGΛΟΥ K.C., “Discrete and Continuous Adjoint Formulations for Turbomachinery Applications”, EUROGEN 2005, Munich, September 12-1.
- [4] K.C. GIANNAKOGΛΟΥ, D.I. PAPANIMITRIΟΥ: Adjoint Methods for gradient- and Hessian-based Aerodynamic Shape Optimization, EUROGEN 2007, Jyväskylä, Finland, June 11-13, 2007
- [5] C. HIRSCH, “Numerical Computation of internal and external flows. Volume 2: Computational methods for inviscid and viscous flows.”, 1990.
- [6] K.X. GIANNAKOGΛΟΥ, ‘Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική’, 4η Έκδοση, ΕΜΠ, Αθήνα 2006.
- [7] V.G. ASOUTI, A.S. ZYMARIS, D.I. PAPANIMITRIΟΥ, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ: Continuous and Discrete Adjoint Approaches for Aerodynamic Shape Optimization with Low Number preconditioning, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 57, pp. 1485-1504, 2008.
- [8] D.I. PAPANIMITRIΟΥ, A.S. ZYMARIS, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ: Discrete and Continuous Adjoint Formulations for Turbomachinery Applications, EUROGEN 2005, Munich, September 12-14, 2005..
- [9] D.I. PAPANIMITRIΟΥ, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ, A Continuous Adjoint Method with Objective Function Derivatives Based on Boundary Integrals for Inviscid and Viscous Flows, Computers and Fluids, Vol. 36, pp. 325-341, 2007
- [10] D.I. PAPANIMITRIΟΥ, K.C. GIANNAKOGΛΟΥ: Total Pressure Losses Minimization in Turbomachinery Cascades, Using a New Continuous Adjoint For-

- mulation, Proc. IMechE, Part A: Journal of Power and Energy (Special Issue on Turbomachinery), Vol. 221, pp.865-872, 2007
- [11] D.I. PAPADIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLU, A Continuous Adjoint Method for the Minimization of Losses in Cascade Viscous Flows, 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA-2006-0116, Reno, NV, USA, Jan 9-11, 2006
- [12] D.I. PAPADIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLU, Compressor Blade Optimization using a Continuous Adjoint Formulation, ASME Paper GT-2006/90466, ASME Gas Turbine and Aeroengine Technical Congress and Exposition, Barcelona, Spain, May 8-11, 2006
- [13] D.I. PAPADIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLU, A Continuous Adjoint Formulation with Emphasis to Aerodynamic-Turbomachinery Optimization, EC-COMAS CFD 2006 Conference, Egmond Aan Zee, The Netherlands, Sept. 5-8, 2006
- [14] W. SQUIRE, G. TRAP, (Paper) Using Complex Variables to Estimate Derivatives of Real Functions, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998
- [15] THEODORE W. GAMELIN Complex Analysis, Springer, 2001
- [16] GILES, M.B. AND PIERCE, N.A., "Adjoint Equations in Duality, Boundary Conditions and Solution Behaviour", "AIAA Paper 97-1850, 1997"
- [17] GILES, M.B. AND PIERCE, N.A., "Improved Lift and Drag Estimates using Adjoint Euler Equations", "AIAA Paper 99-3293, 1999"