



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών

**Η ΜΕΘΟΔΟΣ GMRES ΜΕ ΠΡΟΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΟΝ
ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ ΜΟΡΦΩΝ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΩΝ ΣΥΖΥΓΤΩΝ
ΜΕΘΟΔΩΝ**

Διπλωματική Εργασία

ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ Κ. ΧΑΤΖΟΠΟΥΛΟΣ

Επιβλέπων : ΚΥΡΙΑΚΟΣ Χ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ
Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΛΙΟΣ 2009

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η διπλωματική αυτή εργασία επικεντρώνεται στην εφαρμογή της μεθόδου GMRES (Generalized Minimal Residual Method) με επανεκκίνηση και προσταθεροποίηση σε προβλήματα βελτιστοποίησης και ειδικά σε προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού γεωμετριών με αερο-θερμοδυναμικά κριτήρια. Η γραμμική GMRES αποτελεί μέθοδο επίλυσης γραμμικών συστημάτων (επεκτείνεται όμως και σε μη-γραμμικά) και στην παρούσα εργασία επικεντρώνεται κυρίως στην επίλυση τέτοιων συστημάτων στα οποία καταλήγουν οι συζυγείς (adjoint) μέθοδοι βελτιστοποίησης (διακριτή και συνεχής). Οι επιλεγείσες εφαρμογές καλύπτουν προβλήματα εσωτερικής και εξωτερικής αεροδυναμικής (μεμονωμένη αεροτομή, πτερυγώση συμπίεστή καθώς και εναλλάκτη θερμότητας).

Στόχος είναι ο προσδιορισμός του κέρδους σε υπολογιστικό χρόνο (επιτάχυνση-speedup) από την εφαρμογή της προσταθεροποιημένης GMRES συγκριτικά με επιλύτες, όπως ο Jacobi, που το λογισμικό επίλυσης χρησιμοποιούσε μέχρι τώρα. Η σύγκριση γίνεται κυρίως μεταξύ της αποδοτικότερης GMRES και Jacobi. Για αυτό, γίνεται εκτενής διερεύνηση των παραμέτρων που επηρεάζουν τη σύγκλιση της μεθόδου GMRES. Για μεν τη GMRES, εξετάστηκε η αποδοτικότερη διάσταση της διανυσματικής βάσης και των επαναλήψεων προσταθεροποίησης για δε τη Jacobi του αριθμού επαναλήψεων. Επιπλέον εξετάζονται διάφορες μέθοδοι προσταθεροποίησης της GMRES ώστε να βρεθεί η πιο αποδοτική για τα προβλήματα που εξετάζονται.

Η διερεύνηση των παραμέτρων αυτών γίνεται σε αντίστροφο σχεδιασμό αεροτομών και πτερυγώσης με στόχο συγκεκριμένες κατανομές πίεσης, που εκφράζονται από συγκεκριμένο συντελεστή πίεσης, γύρω από ή μέσα σε αυτές. Οι συζυγείς εξισώσεις επιλύονται σε (μη-δομημένα) πλέγματα διαφόρων αριθμών κόμβων καθώς και σε ατριβείς, στρωτές και τυρβώδεις ροές.

Βάσει των παρατηρήσεων που έγιναν προσδιορίστηκε η αποδοτικότερη διαμόρφωση της μεθόδου GMRES που χρησιμοποιείται στην επίλυση προβλημάτων αερο-θερμοδυναμικού σχεδιασμού και βελτιστοποίησης. Αυτή χρησιμοποιήθηκε για το προσδιορισμό του υπολογιστικού κέρδους στο σχεδιασμό εναλλάκτη θερμότητας, μέσω των συζυγών τεχνικών, με στόχο την ελαχιστοποίηση των απωλειών ολικής πίεσης του διερχόμενου ρεύματος ρευστού ενώ μεγιστοποιείται η μεταφορά θερμότητας στο εσωτερικό του.

Στην περίπτωση αυτή, η GMRES εφαρμόστηκε, πέρα από την επίλυση του συζυγούς προβλήματος, στην επίλυση των εξισώσεων ροής (μη-γραμμικές) αλλά και στην εξίσωση μεταφοράς θερμότητας (γραμμική). Η εφαρμογή στις μη-γραμμικές εξισώσεις ροής (μετά από γραμμικοποίηση) δείχνει ότι μπορεί να επιτευχθεί ακόμη μεγαλύτερο υπολογιστικό κέρδος από τη χρήση της μη-γραμμικής GMRES σε τέτοια συστήματα, αν αυτά προγραμματισθούν και χρησιμοποιηθούν.

Λέξεις Κλειδιά: Γραμμικά Συστήματα, GMRES με Επανεκίνηση και Προσταθεροποίηση, Αεροδυναμική Βελτιστοποίηση-Σχεδιασμός, Συζυγείς Τεχνικές, Υπολογιστική Ρευστοδυναμική

ABSTRACT

This Diploma Thesis focuses on the application of the Restarted, Preconditioned GMRES (Generalised Minimal Residual Method) to optimization problems and especially to inverse design and to optimization of shapes common in the field of mechanical engineering. GMRES, as a solution method for linear systems, is applied to those systems which are produced by the discrete and continuous adjoint method of optimization. The shapes to be designed/optimized geometries are airfoil, cascade and the tubes of a heat exchanger.

Our target is to estimate the speedup when using the GMRES method instead of the Jacobi method. Comparison takes place between the optimal, in terms of computing time, GMRES and Jacobi. For that reason we investigate extensively the convergence parameters of those methods. Concerning GMRES, we locate the optimal dimension of vector basis and preconditioning sub-iterations. Regarding the Jacobi method, we locate the optimal value of iterations. In addition, several preconditioning methods are tested in order to find the optimal one in the presented applications.

This investigation is related with inverse design of an airfoil and a cascade aiming a known pressure distribution, signified by a given pressure coefficient, around and through them. The adjoint equations are solved on unstructured grids of different node numbers, for inviscid and viscous (laminar and turbulent) flows.

Taking into account observations made we define the optimal GMRES configuration which is recommended in problems of aero-thermodynamic optimization. This is used to compute the Speedup achieved in the optimization of a heat exchanger. The target in this design is to minimize the major flow losses of total pressure while we maximize the heat transfer phenomena between the cold and the hot fluid flows.

In this case, apart from solving the adjoint equations, GMRES is used to solve the flow equations (which are non linear) and the one of heat exchange (linear) through the exchanger. By using GMRES to the non linear system of flow equations we give a first estimation of the Speedup we expect to obtain.

Keywords: Linear Systems, Restarted and Preconditioned GMRES, Aerodynamic Design-Optimization, Adjoint Methods, Computational Fluid Dynamics

Αντί Προλόγου...

...θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους αυτούς χωρίς τη βοήθεια των οποίων η παρούσα διπλωματική εργασία δεν θα είχε ολοκληρωθεί. Αρχικά, τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Κυριάκο Χ. Γιαννάκογλου για τη συνεχή καθοδήγηση, την ενεργή παρακολούθηση της προόδου μου και την ακούραστη βοήθειά του τις στιγμές που παρουσιάζονταν δυσκολίες. Επίσης, το επιστημονικό προσωπικό της Μονάδας Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής και Βελτιστοποίησης του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών του Ε.Μ.Π., ειδικά τη Διδάκτωρ Βαρβάρα Γ.Ασούτη και τους υποψήφιους Διδάκτορες Ευγενία Α.Κοντολέοντος, Ξενοφώντα Σ.Τρομπούκη και Αλέξανδρο Σ.Ζυμάρη.

Αθανάσιος Χατζόπουλος

Ιούλιος 2009

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Επαναληπτικές Μέθοδοι Επίλυσης Γραμμικών Συστημάτων	1
1.2	Βελτιστοποίηση στην Αεροδυναμική	2
1.3	Υπολογιστικά Πλέγματα και Διακριτοποίηση	5
1.4	Περιεχόμενα και Δομή της Εργασίας	7
2	Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων στον Υποχώρο Krylov - Η Μέθοδος GMRES	9
2.1	Επίλυση του Γραμμικού Συστήματος Εξισώσεων $A\vec{x} = \vec{b}$ με τη Μέθοδο GMRES	10
2.1.1	Ο Βασικός Αλγόριθμος Arnoldi	11
2.1.2	Ο Αλγόριθμος της Μεθόδου GMRES	13
2.1.3	Υπολογισμός των Συντελεστών β_i	15
2.1.4	Η Μέθοδος GMRES με Επανεκκίνηση και Προσταθεροποίηση	20
2.1.5	Οι Εξεταζόμενες Μέθοδοι Προσταθεροποίησης	22
3	Αριθμητική Διερεύνηση της Χρήσης της Μεθόδου GMRES στην Επίλυση των Συζυγών Εξισώσεων	25
3.1	Οι Εξισώσεις της Ροής	26
3.2	Αντίστροφος Σχεδιασμός Αεροτομής μέσω των Διακριτών Συζυγών Εξισώσεων	28
3.2.1	Σύνδεση της Μεθόδου GMRES με τις Συζυγείς Διακριτές Εξισώσεις Βελτιστοποίησης	31
3.3	Ρύθμιση των Παραμέτρων της PGMRES	33
3.3.1	Επιλογή της Διανυσματικής Βάσης	34
3.3.2	Επιλογή των Εσωτερικών Επαναλήψεων Προσταθεροποίησης Jacobi	40
3.4	Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Jacobi) με τη Μέθοδο Jacobi	42

3.4.1	Επιλογή Αριθμού Επαναλήψεων της μεθόδου Jacobi	43
3.4.2	Αντίστροφος Σχεδιασμός Μεμονωμένης Αεροτομής: Ατριβής Ροή	45
3.4.3	Αντίστροφος Σχεδιασμός Μεμονωμένης Αεροτομής: Στρωτή και Τυρβώδης Ροή	52
3.4.4	Αντίστροφος Σχεδιασμός - Επίλυση Συζυγών Εξισώσεων με Στό- χο Δεδομένη Πίεση σε Πτερυγώση Συμπιεστή	57
3.5	Συγκριτική Ανάλυση Μεθόδων Προσταθεροποίησης	61
3.5.1	Σύγκριση PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Runge-Kutta)	62
3.5.2	Σύγκριση PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Gauss-Seidel)	62
3.5.3	Σύγκριση PGMRES(Gauss-Seidel) και PGMRES(Symmetric Gauss- Seidel)	64
4	Εφαρμογή της Μεθόδου GMRES στη Βελτιστοποίηση Μορφής Εναλλά- κτη Θερμότητας	67
4.1	Οι Εξισώσεις της Ροής	68
4.2	Περιγραφή του Προβλήματος Βελτιστοποίησης Εναλλάκτη Θερμότητας - Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων	70
4.3	Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Gauss-Seidel) με τη Μέθοδο Jacobi στην Επίλυση του Πεδίου Ροής και της Εξίσωσης Μεταφοράς Θερμότητας	75
4.4	Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Gauss-Seidel) με τη Μέθοδο Jacobi στην Επίλυση των Συνεχών Συζυγών Εξισώσεων	81
5	Συμπεράσματα	83

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Επαναληπτικές Μέθοδοι Επίλυσης Γραμμικών Συστημάτων

Η επίλυση γραμμικών συστημάτων της μορφής $A\vec{x} = \vec{b}$ αποτελεί πρόβλημα κομβικής σημασίας σε πολλές επιστημονικές εφαρμογές αφού σε τέτοιες μορφές συστημάτων καταλήγουν οι μαθηματικές διατυπώσεις πολλών φυσικών φαινομένων μετά από διακριτοποίηση των εξισώσεων τους. Για την αριθμητική επίλυση των συστημάτων χρησιμοποιούμε, σχεδόν καθολικά, επαναληπτικές μεθόδους (Iterative Methods) βρίσκοντας διαδοχικές προσεγγίσεις της λύσης, ξεκινώντας από μία τυχαία αρχική λύση. Οι μέθοδοι αυτές λειτουργούν διαφορετικά από τις μεθόδους που βασίζονται στην (ακριβή) αντιστροφή του μητρώου συντελεστών του γραμμικού συστήματος. Αυτή η επιλογή αποτελεί μονόδρομο αφού σε πρακτικές εφαρμογές των πλήθους των άγνωστων ποσοτήτων είναι της τάξης αρκετών ή πολλών χιλιάδων γεγονός που καθιστά χρονοβόρα ή και αδύνατη την αντιστροφή μητρώων ακόμη και με υπολογιστές μεγάλης υπολογιστικής ισχύος.

- **Σταθερές Επαναληπτικές Μέθοδοι (Stationary Iterative Methods):** Στις μεθόδους αυτές η νέα προσεγγιστική λύση, έστω \vec{x}_{n+1} , γράφεται στη μορφή $\vec{x}_{n+1} = B\vec{x}_n + C$ όπου τα μητρώα B και C δεν εξαρτώνται από την \vec{x}_{n+1} . Κριτήριο σύγκλισης θεωρείται ένα υπολογιζόμενο σφάλμα, συνήθως η τιμή του υπολοίπου. Αν και είναι η υλοποίηση τους είναι γενικά εύκολη πολλές φορές δεν συγκλίνουν ή απαιτούν μεγάλους χρόνους σύγκλισης. Παραδείγματα τέτοιων μεθόδων αποτελούν οι μέθοδοι Jacobi και Gauss-Seidel.
- **Μέθοδοι Υποχώρου Krylov:** Οι μέθοδοι του υποχώρου Krylov στηρίζονται στη δημιουργία μιας ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων βάσει των διαδοχι-

κών δυνάμεων του υπολοίπου (ακολουθία Krylov). Η νέα προσεγγιστική λύση υπολογίζεται με ελαχιστοποίηση του υπολοίπου στον υποχώρο που έχει σχηματισθεί προηγουμένως. Στις μεθόδους του υποχώρου Krylov εντάσσονται η μέθοδος GMRES (Generalized Minimal Residual Method) και η μέθοδος συζυγών κλίσεων CG (Conjugate Gradient Method).

- **Προσταθεροποίηση Συστημάτων:** Στις μεθόδους του υποχώρου Krylov γίνεται σχεδόν πάντα εφαρμογή μιας μεθόδου προσταθεροποίησης που αποσκοπεί στο να φέρει το σύστημα σε καλύτερη κατάσταση¹. Αν επιλεγεί ο κατάλληλος προσταθεροποιητής για το προς επίλυση πρόβλημα τότε επιτυγχάνεται σημαντική επιτάχυνση της επίλυσης του συστήματος. Για την προσταθεροποίηση του συστήματος επιλέγεται κατάλληλο μητρώο προσταθεροποίησης M και το αρχικό σύστημα $A\vec{x} = \vec{b}$ γίνεται $MA\vec{x} = M\vec{b}$, το σύστημα αυτό έχει τις **ίδιες** λύσεις με το αρχικό αλλά συγκλίνει πιο γρήγορα. Το M είναι μια προσέγγιση του αντίστροφου του A που είναι εύκολα υπολογίσιμη (ενώ ο υπολογισμός του πραγματικού αντιστρόφου στοιχίζει). Ο προσταθεροποιητής που θα χαρακτηριστεί ως κατάλληλος εξαρτάται από το πρόβλημα, για αυτό το λόγο η κατασκευή αποδοτικού προσταθεροποιητή αποτελεί σημαντικό πεδίο έρευνας.

1.2 Βελτιστοποίηση στην Αεροδυναμική

Έστω μια βαθμωτή συνάρτηση $F(\vec{x})$, όπου $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, της οποίας θέλουμε να βρούμε το ελάχιστο. Επιθυμούμε, άρα, το $\min(F(\vec{x}))$. Σε μια επαναληπτική διαδικασία εύρεσης του διανύσματος \vec{x} που ελαχιστοποιεί την τιμή της συνάρτησης F και χρησιμοποιώντας π.χ. τη μέθοδο της απότομης καθόδου θα είναι $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - \eta \nabla F|_n$. Επομένως, για την εύρεση του \vec{x} πρέπει να υπολογισθεί το ∇F , δηλαδή οι παράγωγοι $\left(\frac{\partial F}{\partial x_1}, \frac{\partial F}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F}{\partial x_N}\right)$. Μια μέθοδος υπολογισμού αυτών των παραγώγων είναι η συζυγής μέθοδος, που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία.

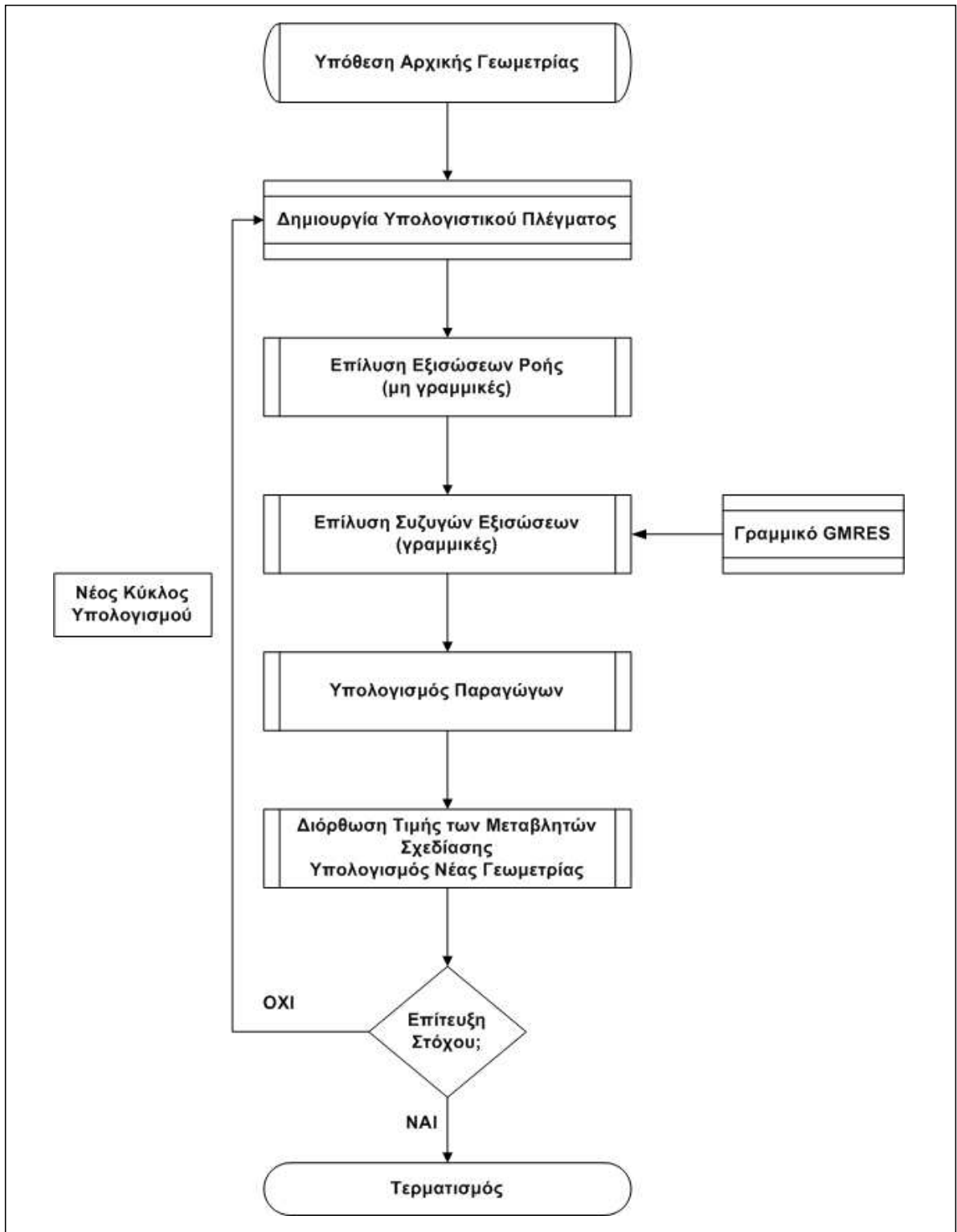
Στη αεροδυναμική βελτιστοποίηση γεωμετριών, π.χ. αεροτομών, η συνάρτηση στόχου F (δηλαδή η συνάρτηση που θα της οποίας ψάχνουμε το ελάχιστο ή το μέγιστο) εξαρτάται τόσο από το πεδίο ροής που διαμορφώνεται γύρω από την εν λόγω γεωμετρία όσο και από την γεωμετρία αυτή καθαυτή. Επομένως, πρόσθετα της προη-

¹Ως **κατάσταση** ενός γραμμικού συστήματος $A\vec{x} = \vec{b}$ ορίζουμε την ευαισθησία της λύσης \vec{x} , που προκύπτει από μία επαναληπτική υπολογιστική μέθοδο, σε μεταβολές των τιμών του μητρώου A και του διανύσματος \vec{b} και αποτελεί χαρακτηριστικό του συστήματος. Για το χαρακτηρισμό της κατάστασης ενός συστήματος ορίζουμε τον αριθμό κατάστασης αυτού. Μικρή τιμή του αριθμού κατάστασης αντιστοιχεί σε καλή κατάσταση συστήματος και μικρή ευαισθησία (well-conditioned system) ενώ μεγάλη τιμή σε κακή κατάσταση και μεγάλη ευαισθησία (ill-conditioned system)

γούμενης διατύπωσης όπου η συνάρτηση F είναι συνάρτηση μόνο μιας ποσότητας (του \vec{x}) έχουμε ότι η $F = F(\vec{U}, \vec{b})$, όπου το πρώτο όρισμα είναι οι μεταβλητές του πεδίου ροής και το δεύτερο οι μεταβλητές που, με βάση την παραμετροποίηση της γεωμετρίας, καθορίζουν το σχήμα της.

Άρα η βελτιστοποίηση στην αεροδυναμική εμπεριέχει και μία επίλυση πεδίου ανα κύκλο υπολογισμού. Στο σχήμα 1.1 παρουσιάζονται τα βασικά στάδια μιας διαδικασίας βελτιστοποίησης. Τα βασικά σημεία αυτής από άποψη υπολογιστικού χρόνου είναι ο υπολογισμός του πεδίου ροής γύρω από τη γεωμετρία που βελτιστοποιούμε καθώς και η επίλυση των συζυγών εξισώσεων (που προκύπτουν από τη ροή και τη συνάρτηση στόχο), που προηγείται του υπολογισμού των παραγώγων, αφού αυτός γίνεται βάση του συζυγούς πεδίου που έχει υπολογισθεί. Γενικά, το πεδίο ροής και οι συζυγείς εξισώσεις έχουν ίδιας τάξης μεγέθους υπολογιστικό χρόνο επίλυσης, με τη διαφορά ότι οι εξισώσεις ροής είναι μη-γραμμικές ενώ οι συζυγείς εξισώσεις γραμμικές. Επιπλέον το κόστος επίλυσης των συζυγών εξισώσεων είναι ανεξάρτητο του διανύσματος των μεταβλητών σχεδίασης \vec{b} .

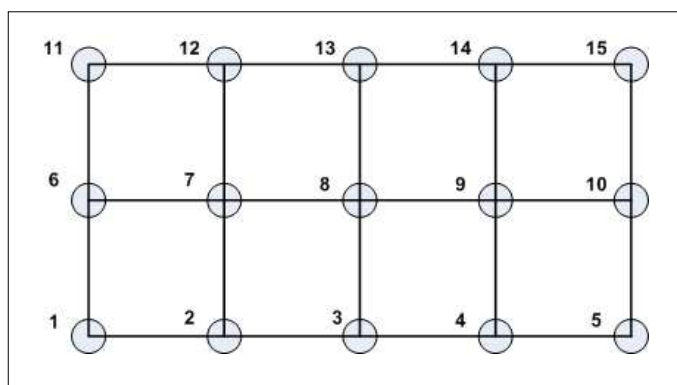
Επομένως αν θέλουμε να μειώσουμε το χρόνο της διαδικασίας της βελτιστοποίησης μπορούμε, σε πρώτη φάση, να εφαρμόσουμε μια μέθοδο επίλυσης γραμμικών συστημάτων για την αριθμητική επίλυση των συζυγών εξισώσεων (γραμμικές) η οποία θα συγκλίνει γρηγορότερα από τους ήδη υπάρχοντες επιλύτες γραμμικών συστημάτων που διαθέτουμε. Στο σημείο αυτό, και εξαιτίας της ανάγκης μας για γρήγορους κύκλους υπολογισμών, μπορεί να υπάρξει σύνδεση της βελτιστοποίησης με τις επαναληπτικές μεθόδους επίλυσης γραμμικών συστημάτων του υποχώρου Krylov και ειδικά με τη μέθοδο GMRES. Επίσης, σε δεύτερο στάδιο, τέτοιες μέθοδοι επαναληπτικής επίλυσης μπορούν να εφαρμοσθούν σε γραμμικοποιημένα συστήματα που προκύπτουν από τις εξισώσεις ροής μετά τη διακριτοποίησή τους. Εναλλακτικά, μπορούμε να εφαρμόσουμε τον λ.χ. αλγόριθμο GMRES για μη-γραμμικά συστήματα, εφαρμογή η οποία δεν γίνεται στη παρούσα εργασία.



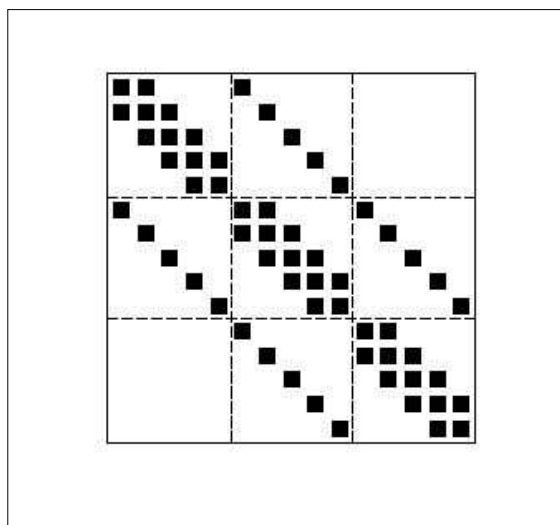
Σχήμα 1.1: Αλγόριθμος βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική

1.3 Υπολογιστικά Πλέγματα και Διακριτοποίηση

Η διακριτοποίηση του χώρου επίλυσης με πλέγματα δομημένου τύπου, όπως αυτό του σχήματος 1.2, οδηγεί σε μητρώα συγκεκριμένης μορφής (διαγώνια «banded» τα οποία μπορούμε να τα διαχειριστούμε εύκολα. Η ευκολία αποθήκευσης των μητρώων από τη διακριτοποίηση των μερικών διαφορικών εξισώσεων σε τέτοια πλέγματα, όπου απαιτείται η αποθήκευση μόνο των διαγωνίων με μη-μηδενικά στοιχεία προσφέροντας πλεονεκτήματα ως προς την απαιτούμενη μνήμη, καθιστά την προγραμματιστική υλοποίηση των αλγόριθμων επίλυσης εύκολη. Σε αυτό συμβάλλει και το γεγονός ότι η αρίθμηση των κόμβων ακολουθεί μια 'λογική' σειρά. Η μορφή των μητρώων που προκύπτουν από τέτοια πλέγματα παρουσιάζεται στο σχήμα 1.3, σε αυτό σημειώνονται τα μη-μηδενικά στοιχεία του μητρώου.

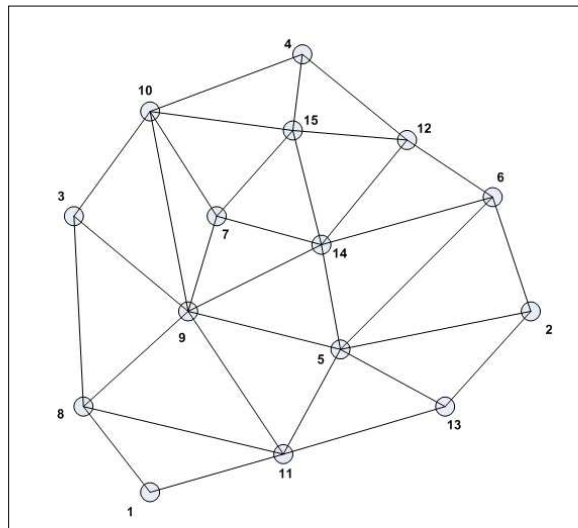


Σχήμα 1.2: Υπολογιστικό πλέγμα δομημένου τύπου

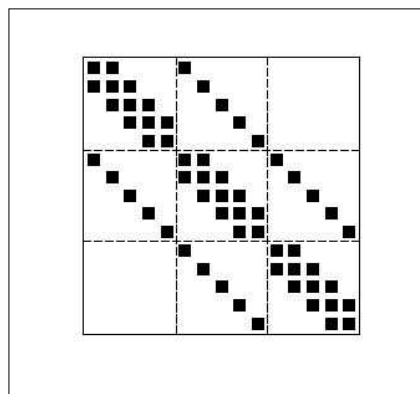


Σχήμα 1.3: Μητρώο που προκύπτει από δομημένο υπολογιστικό πλέγμα

Ωστόσο, τα πλέγματα δομημένου τύπου δεν μπορούν εύκολα να διακριτοποιήσουν χώρους που εμπεριέχουν σύνθετες γεωμετρίες εκτός αν είναι multiblock. Για το λόγο αυτό, σήμερα χρησιμοποιούνται πλέγματα μη-δομημένου τύπου. Ένα μη-δομημένο πλέγμα με τριγωνικά στοιχεία παρουσιάζεται στο σχήμα 1.4. Σε ένα τέτοιο πλέγμα η αρίθμηση των κόμβων είναι τυχαία, γεγονός που έχει αποτέλεσμα την ακανόνιστη δομή του μητρώου που δημιουργείται. Τα μη-μηδενικά στοιχεία του μητρώου, όπως του σχήματος 1.5, αυτού βρίσκονται σε τυχαίες θέσεις οπότε είναι αναγκαία η αποθήκευσή του. Μη-δομημένα πλέγματα εφαρμόστηκαν στην παρούσα διπλωματική εργασία.



Σχήμα 1.4: Μη-δομημένο υπολογιστικό πλέγμα

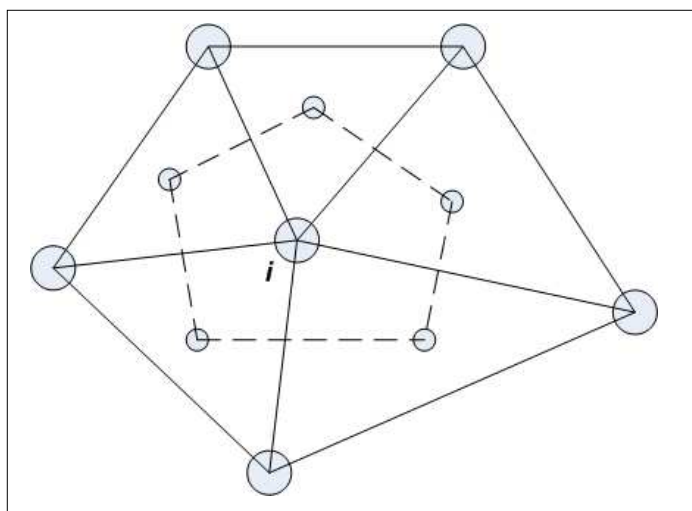


Σχήμα 1.5: Μητρώο που προκύπτει από μη-δομημένο υπολογιστικό πλέγμα

Στο σχήμα 1.6 φαίνεται ένας υπολογιστικός κόμβος μη-δομημένου πλέγματος ο οποίος έχει 5 γειτονικούς. Επιπλέον στο σχήμα 1.6 σημειώνεται ο πεπερασμένος όγκος ισολογισμού γύρω από τον κόμβο αυτό, ο οποίος σχηματίζεται από τα κέντρα βάρους των τριγώνων που τον έχουν ως κορυφή και τα μέσα των ακμών που συντρέχουν στον κεντρικό κόμβο. Διακριτοποιώντας τις εξισώσεις σε κάθε κόμβο, η εκάστοτε εξίσωση που επιλύουμε, παίρνει τη μορφή

$$D_i u_i + \sum_{j=1}^{neigmax} Z_{i,j} u_j = b_i$$

όπου D ο συντελεστής της άγνωστης ποσότητας στον κόμβο που κάθε φορά επιλύεται, Z οι συντελεστές των τιμών των ίδιων ποσοτήτων που αποθηκεύονται στους άμεσους γείτονες που συνδέονται με ακμή με το κεντρικό κόμβο και u η προς προσδιορισμό μεταβλητή.



Σχήμα 1.6: Κόμβος υπολογισμού σε μη-δομημένο πλέγμα. Σημειώνονται οι γειτονικοί κόμβοι καθώς και ο πεπερασμένος όγκος ισολογισμού

1.4 Περιεχόμενα και Δομή της Εργασίας

Στο **Κεφάλαιο 2**, παρουσιάζεται η θεωρία και οι αλγόριθμοι υλοποίησης της μεθόδου GMRES καθώς και ο τρόπος υπολογισμού της νέας προσεγγιστικής λύσης σε ένα κύκλο επαναλήψεων. Ειδικότερα, διατυπώνεται η βασική ιδέα της GMRES, η επαναληπτική χρήση δηλαδή μιας (σχετικά μικρής) ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων και συντελεστών σχετιζόμενων με το ελαχιστοποιημένο υπόλοιπο των εξισώσεων για

τον προσδιορισμό της λύσης αυτής. Για το σχηματισμό της ορθοκανονικής βάσης γίνεται χρήση του αλγόριθμου Arnoldi. Για τους συντελεστές που προκύπτουν από το υπόλοιπο παρουσιάζεται ο τρόπος υπολογισμού τους μέσω της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων, στην πράξη εφαρμόζουμε κατάλληλες στροφές μητρώων που οδηγούν το πρόβλημα ελαχιστοποίησης στην επίλυση ενός γραμμικού προβλήματος. Επιπλέον, παρουσιάζεται η GMRES με προσταθεροποίηση που αποσκοπεί στην ταχύτερη σύγκλιση της μεθόδου ενώ παρουσιάζονται οι αλγόριθμοι των μεθόδων προσταθεροποίησης που εξετάστηκαν. Αυτές είναι οι μέθοδοι Jacobi, Runge-Kutta, Gauss-Seidel και Symmetric Gauss-Seidel.

Στο **Κεφάλαιο 3**, η μέθοδος GMRES εφαρμόζεται στην επίλυση του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από τις συζυγείς διακριτές εξισώσεις κατά την αντίστροφο σχεδιασμό αεροτομής σε συμπιεστό πεδίο ροής με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από αυτήν. Προηγείται σύντομη παρουσίαση των εξισώσεων της ροής, η τεχνική των συζυγών διακριτών εξισώσεων και η σύνδεση αυτών με τη GMRES. Η εφαρμογή της GMRES αποσκοπεί στον προσδιορισμό των ' βέλτιστων ' τιμών διανυσματικής βάσης, επαναλήψεων προσταθεροποίησης και προσταθεροποιητή. Επίσης στόχος είναι ο έλεγχος της συμπεριφοράς της μεθόδου έναντι της Jacobi ως προς τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο σύγκλισης. Για όσο το δυνατόν πιο πλήρη διερεύνηση γίνεται χρήση διαφόρων υπολογιστικών πλεγμάτων, αντίστροφο σχεδιασμό μεμονωμένης αεροτομής και πτερύγωσης συμπιεστή, εφαρμογή της αντίστροφο σχεδιασμό σε ατρίβεις, στρωτές και τυρβώδεις ροές.

Στο **Κεφάλαιο 4**, χρησιμοποιούμε την μέθοδο GMRES στην επίλυση του πεδίου ροής ασυμπίεστου ρευστού σε εναλλάκτη θερμότητας και στην επίλυση των συνεχών συζυγών εξισώσεων στο πρόβλημα βελτιστοποίησης αυτού με στόχο την ελαχιστοποίηση των απωλειών ολικής πίεσης του ρευστού που τον διαρρέει ενώ επιθυμούμε τη μεγιστοποίηση της μεταφοράς θερμότητας στο εσωτερικό του. Αρχικά παρουσιάζεται το πρόβλημα, με αναφορά στις εξισώσεις ροής, την εξίσωση μεταφοράς θερμότητας και διατυπώνονται οι συνεχείς συζυγείς εξισώσεις. Στην παρούσα εφαρμογή γίνεται χρήση της βαθμόνόμησης του GMRES του κεφαλαίου 3 και προσδιορίζεται η επιτάχυνση της επίλυσης όταν εφαρμόζουμε την μέθοδο GMRES σε ένα πρακτικό πρόβλημα. Σε αντίθεση με τα συστήματα που καταλήγουμε από την εφαρμογή διακριτής και συνεχούς συζυγούς μεθόδου η επίλυση του πεδίου ροής καταλήγει σε μη-γραμμικό σύστημα. Αυτό υπόκειται σε γραμμικοποίηση και εφαρμόζουμε την GMRES.

Τέλος, στο **Κεφάλαιο 5**, διατυπώνονται σαφώς τα συμπεράσματα της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Αυτά στηρίζονται στα κεφάλαια των αριθμητικών εφαρμογών 3 και 4.

Κεφάλαιο 2

Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων στον Υποχώρο Krylon - Η Μέθοδος GMRES

Η μέθοδος GMRES (Generalized Minimal Residual Method), η οποία αναπτύχθηκε από τον Youcef Saad [1], [2], [4], [6], [7], [8], [9] εφαρμόζεται στην επίλυση γραμμικών συστημάτων $A\vec{x} = \vec{b}$, επεκτείνεται όμως και σε μη-γραμμικά. Η εργασία αυτή ασχολείται αποκλειστικά με το λεγόμενο **γραμμικό GMRES**. Βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου είναι η δημιουργία και η χρήση μιας ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων στον υποχώρο Krylon, διάστασης m , για τον υπολογισμό της νέας προσεγγιστικής λύσης. Δηλαδή, για τον υπολογισμό της νέας λύσης γίνεται χρήση μιας αλληλουχίας m ορθοκανονικών διανυσμάτων τα οποία πρέπει να είναι αποθηκευμένα, γεγονός το οποίο υποδεικνύει την ανάγκη της GMRES για μεγαλύτερη μνήμη.

Όσον αφορά στη σύγκλιση της GMRES σημειώνουμε τα εξής. Αν θεωρήσουμε ένα γραμμικό πρόβλημα N εξισώσεων με N αγνώστους, το οποίο οδηγεί σε μητρώο συντελεστών διαστάσεων $N \times N$ η μέθοδος GMRES αναμένεται να συγκλίνει το πολύ σε N επαναλήψεις. Αν αναλογιστούμε ότι σε πρακτικά προβλήματα του μηχανικού ο αριθμός N είναι αρκετά μεγάλος γίνεται κατανοητό ότι ο υπολογιστικός χρόνος σύγκλισης είναι πρακτικά απαγορευτικός. Αντίθετα, η GMRES συγκλίνει σε αξιοσημείωτα μικρότερο αριθμό επαναλήψεων αλλά και υπολογιστικού χρόνου. Ακόμη, για πιο σύντομη και ευσταθή πορεία επίλυσης εφαρμόζεται η GMRES με προσταθεροποίηση (Restarted Preconditioned GMRES) [1], [2], [7] στην οποία γίνεται χρήση ενός μητρώου προσταθεροποίησης, έστω M , σε κομβικά σημεία της μεθόδου. Παρόλο που η εισαγωγή του μητρώου M οδηγεί στην εμφάνιση πρόσθετων γραμμικών συστημάτων κατά την επίλυση, αποφέρει σημαντικά γρηγορότερη

σύγκλιση. Η γραμμική μέθοδος GMRES με επανεκκίνηση και προσταθεροποίηση αποτελεί αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας παρουσιάζεται διεξοδικά παρακάτω.

2.1 Επίλυση του Γραμμικού Συστήματος Εξισώσεων $A\vec{x} = \vec{b}$ με τη Μέθοδο GMRES

Για την επίλυση του γραμμικού συστήματος $A\vec{x} = \vec{b}$, η μέθοδος GMRES στηρίζεται στη δημιουργία μιας ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων \vec{v}_j . Αυτή η ορθοκανονική βάση ανήκει στον υποχώρο Krylon ο οποίος ορίζεται ως

$$K_m(A, \vec{r}_0) = \text{span} \{ \vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \dots, A^{m-1}\vec{r}_0 \} \quad (2.1)$$

όπου το μητρώο A είναι διαστάσεων $N \times N$. Σημειώνουμε η παραπάνω σχέση 'δείχνει' ότι ο υποχώρος Krylon παράγεται από ένα μητρώο A όταν προβάλλεται ένα διάνυσμα \vec{r}_0 (στην περίπτωση του GMRES το διάνυσμα του υπολοίπου της εξίσωσης που πρέπει να επιλυθεί) στις δυνάμεις αυτού. Για τη δημιουργία της ορθοκανονικής βάσης γίνεται χρήση του αλγορίθμου Arnoldi, ο οποίος παρουσιάζεται διεξοδικά παρακάτω. Έχοντας δημιουργήσει την ορθοκανονική βάση, οι ανανεωμένες τιμές του πεδίου λύσης υπολογίζονται από την

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{v}_1 + \beta_2 \vec{v}_2 + \dots + \beta_m \vec{v}_m \quad (2.2)$$

ή

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j \vec{v}_j \quad (2.3)$$

όπου στην παραπάνω συμβολίζουμε με \vec{x}_0 την τρέχουσα λύση, με \vec{v}_j τα διανύσματα της ορθοκανονικής βάσης ενώ οι συντελεστές β_i προκύπτουν επιλύοντας ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης του υπολοίπου που θα δώσει το ανανεωμένο πεδίο λύσης. Επίσης \vec{x}_m είναι η ανανεωμένη λύση. Συμβολίζουμε δηλαδή,

$$\vec{x}_0 \equiv \vec{x}_{old} \quad (2.4)$$

$$\vec{x}_m \equiv \vec{x}_{new} \quad (2.5)$$

Στη συνέχεια της εργασίας υιοθετείται ο εξής συμβολισμός, για την τρέχουσα και τη νέα λύση,

$$\vec{x}_n \equiv \vec{x}_{old} \quad (2.6)$$

$$\vec{x}_{n+1} \equiv \vec{x}_{new} \quad (2.7)$$

2.1.1 Ο Βασικός Αλγόριθμος Arnoldi

Ο αλγόριθμος Arnoldi [1], [2] αποτελεί μια μέθοδο δημιουργίας ορθοκανονικής διανυσματικής βάσης διάστασης m $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_m\}$ στον υποχώρο Krylov για μη-Ερμητιανά μητρώα, δηλαδή για μητρώα στα οποία δεν ισχύει $a_{i,j} = \overline{a_{j,i}}$ (με παύλα συμβολίζουμε τη συζυγή ποσότητα του στοιχείου $a_{j,i}$), με δεδομένο το πρώτο από αυτά \vec{v}_1 . Εκ κατασκευής, για τα στοιχεία της βάσης ισχύει

$$(\vec{v}_i, \vec{v}_j) = \begin{cases} 0 & \text{αν } i \neq j \\ 1 & \text{αν } i = j \end{cases} \quad (2.8)$$

όπου με παρένθεση συμβολίζεται το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων, συμβολισμός που ακολουθείται εφ' εξής. Τα βήματα του βασικού αλγόριθμου Arnoldi είναι:

-
1. Επιλογή \vec{v}_1 με $\|\vec{v}_1\| = 1$
 2. Για $j = 1, 2, \dots, m$
 - (α) Για $i = 1, 2, \dots, j$
Υπολογισμός $h_{i,j} = (A\vec{v}_j, \vec{v}_i)$
Τέλος
 - (β) Υπολογισμός $\vec{w}_j = A\vec{v}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j}\vec{v}_i$
 - (γ) Υπολογισμός $h_{j+1,j} = \|\vec{w}_j\|_2$,
αν $h_{j+1,j} = 0$ έξοδος
 - (δ) Υπολογισμός $\vec{v}_{j+1} = \frac{\vec{w}_j}{h_{j+1,j}}$
- Τέλος
-

Οι βοηθητικές ποσότητες $h_{i,j}$ συνθέτουν το άνω τριγωνικό μητρώο H_m διαστάσεων $m \times m$

$$H_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1m} \\ 0 & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2m} \\ 0 & 0 & h_{33} & \dots & h_{3m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & h_{mm} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Στον παραπάνω αλγόριθμο παρατηρούμε ότι υπολογίζεται και η ποσότητα $h_{m+1,m}$, που μαζί με τις προηγούμενες συνθέτουν το επίσης άνω τριγωνικό Hessenberg μητρώο \overline{H}_m διάστασης $(m+1) \times m$. Σημειώνουμε ότι το, τετραγωνικής μορφής $m \times m$ H_m προκύπτει από το \overline{H}_m διαγράφοντας την τελευταία γραμμή αυτού.

Αν θεωρήσουμε το μητρώο V_m , διαστάσεων $N \times m$, το οποίο έχει για στήλες του τα m διανύσματα \vec{v} , διάστασης N , της ορθοκανονικής βάσης και αντίστοιχα το V_{m+1} , διαστάσεων $N \times (m+1)$, με $m+1$ διανύσματα \vec{v} , τότε ισχύουν οι σχέσεις

$$AV_m = V_m H_m + \vec{w}_m e_m^T \quad (2.10)$$

$$= V_{m+1} \overline{H}_m$$

$$V_m^T AV_m = H_m \quad (2.11)$$

όπου e_m είναι το m -ιοστό διάνυσμα στήλης του ταυτοτικού μητρώου I διάστασης $m \times m$.

Οι σχέσεις 2.10 είναι σημαντικές γιατί δείχνουν σε συντομία και σε μητωϊκή μορφή την υλοποίηση του αλγόριθμου Arnoldi. Μάλιστα, η σειρά γραφής των διαδοχικών σχέσεων στην 2.10 ακολουθεί την ακριβή πορεία του αλγορίθμου. Στην πρώτη γραφή της 2.10 έχουμε τη δημιουργία των βοηθητικών διανυσμάτων \vec{w}_j ενώ στη δεύτερη συνδέεται η δημιουργία του διανύσματος \vec{v}_{j+1} με το \vec{v}_j και το μητρώο Hessenberg \overline{H}_m .

Σχηματικά η $AV_m = V_{m+1} \overline{H}_m$ είναι:

$$\begin{array}{c} \leftarrow N \rightarrow \\ \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \vdots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ N \\ \downarrow \end{array} \cdot \begin{array}{c} \leftarrow m \rightarrow \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \vdots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ N \\ \downarrow \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow m+1 \rightarrow \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \vdots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ N \\ \downarrow \end{array} \cdot \begin{array}{c} \leftarrow m \rightarrow \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline & \dots & \\ \hline & \vdots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ m+1 \\ \downarrow \end{array} \end{array}$$

Για την απόδειξη των παραπάνω εργαζόμαστε ως ακολούθως. Από τον αλγόριθμο Arnoldi έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \vec{w}_j &= A\vec{v}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j}\vec{v}_i \\ \vec{v}_{j+1} &= \frac{\vec{w}_j}{h_{j+1,j}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow A\vec{v}_j = h_{j+1,j}\vec{v}_{j+1} + \sum_{i=1}^j h_{i,j}\vec{v}_i$$

δηλαδή συνοψίζοντας σε μία άθροιση

$$A\vec{v}_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}\vec{v}_i$$

η οποία αν γραφεί σε μητρική μορφή γίνεται $AV_m = V_{m+1}\overline{H}_m$, η δεύτερη δηλαδή προς απόδειξη εξίσωση. Αν ληφθεί υπόψη ότι το μητρώο \overline{H}_m περιέχει στην τελευταία γραμμή του μόνο το στοιχείο $h_{m+1,m}$ τότε έχουμε

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m}\vec{v}_{m+1} = V_m H_m + \vec{w}_m e_m^T \tag{2.12}$$

η οποία είναι η πρώτη προς απόδειξη εξίσωση. Τέλος, πολλαπλασιάζοντας την 2.12 με $(V_m)^T$, προκύπτει

$$(V_m)^T AV_m = \underbrace{(V_m)^T V_m}_I H_m + \underbrace{(V_m)^T \vec{w}_m e_m^T}_0 = H_m \tag{2.13}$$

2.1.2 Ο Αλγόριθμος της Μεθόδου GMRES

Στη μέθοδο GMRES με επανεκκίνηση (Restarted GMRES) γίνεται χρήση του αλγορίθμου Arnoldi για τη δημιουργία της ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων διάστασης m . Βάσει αυτής, ανανεώνεται η τρέχουσα λύση (σε έναν εξωτερικό κύκλο επαναλήψεων) επιλύοντας ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης του υπολοίπου των εξισώσεων για την ανανεούμενη λύση. Στη συνέχεια υπολογίζεται μια νέα βάση διανυσμάτων μέσω της νέας λύσης κ.ο.κ. Εξ αυτού προκύπτει ο χαρακτηρισμός της επανεκκίνησης της μεθόδου. Ειδικότερα, με δεδομένη τη διάσταση του υποχώρου Krylov υπολογίζουμε τη διανυσματική βάση με τον αλγόριθμο Arnoldi και στη συνέχεια βρίσκουμε τη νέα προσεγγιστική λύση. Έτσι σε ένα βρόχο επαναλήψεων, με μετρητή n τους κύκλους υπολογισμού, η νέα λύση θα είναι \vec{x}_n , ενώ στην νέα $n+1$ επανάληψη θέτουμε $\vec{x}_0 = \vec{x}_n$ και υπολογίζουμε νέα βάση διανυσμάτων.

Ακολουθεί ο αλγόριθμος GMRES [1], [2], [10]:

-
1. Επιλογή αρχικής λύσης $\vec{x}_{(0)}$ κατά τον πρώτο κύκλο ή $\vec{x}_{(0)} = \vec{x}_{(n)}$ για κάθε επόμενο, και υπολογισμός του αρχικού υπολοίπου $\vec{r}_0 = \vec{b} - A\vec{x}_0$.

$$\text{Υπολογισμός των } \vec{v}_1 = \frac{\vec{r}_0}{\|\vec{r}_0\|}$$

2. Υπολογισμός $m-1$ (πρακτικά όμως m) ορθοκανονικών διανυσμάτων βάσης $\vec{v}_2, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_m$ μέσω του αλγόριθμου Arnoldi

(α) Για $j = 1, 2, \dots, m$

$$\text{Υπολογισμός } \vec{w}_j = A\vec{v}_j$$

(β) Για $i = 1, 2, \dots, j$

$$\text{Υπολογισμός } h_{i,j} = (\vec{w}_j, \vec{v}_i)$$

Τέλος

(γ) Υπολογισμός $\vec{v}_{j+1} = \vec{w}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} \vec{v}_i$

$$\text{Υπολογισμός } h_{j+1,i} = \|\vec{v}_{j+1}\|_2$$

$$\text{Κανονικοποίηση του } \vec{v}_{j+1}, \vec{v}_{j+1} = \frac{\vec{v}_{j+1}}{h_{j+1,j}}$$

Τέλος

3. Υπολογισμός, μέσω της επίλυσης ενός προβλήματος ελαχιστοποίησης του υπολοίπου, των m συντελεστών $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ και δημιουργία της νέας λύσης προσέγγισης της λύσης ως $\vec{x}_m = \vec{x}_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i \vec{v}_i$.
-

Στον παραπάνω αλγόριθμο παρατηρούμε την πραγματοποίηση πολλαπλασιασμών διάνυσμα \times διάνυσμα (vector-vector multiplication) και μητρώο \times διάνυσμα (matrix-vector multiplication). Το πλήθος αυτών των πράξεων, σε έναν κύκλο υπολογισμού, εξαρτάται από τη διάσταση διανυσματικής βάσης που έχουμε επιλέξει. Για παράδειγμα στο βήμα 2α πραγματοποιούνται συνολικά, σε κάθε κύκλο, m πολλαπλασιασμοί του μητρώου A και του εκάστοτε διανύσματος \vec{v}_j ενώ αντίστοιχα στο βήμα 2β $m \sum_{i=1}^m i$ πολλαπλασιασμοί μεταξύ των διανυσμάτων \vec{w}_j και \vec{v}_i . Επισημαίνεται ότι ο πολλαπλασιασμός διανύσματος με διάνυσμα έχει αμελητέο υπολογιστικό χρόνο

(πρακτικά μηδενικό) σε αντίθεση με τον πολλαπλασιασμό μητρώου με διάνυσμα. Ο πολλαπλασιασμός μητρώου με διάνυσμα αποτελεί τη μονάδα υπολογιστικού κόστους της μεθόδου GMRES.

Αποτέλεσμα της υλοποίησης του αλγόριθμου GMRES είναι η δημιουργία του μητρώου Hessenberg \overline{H}_m , διάστασης $(m+1) \times m$ [3], [10]. Η μορφή αυτού, έστω για $m=4$

$$\overline{H}_4 = \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & h_{1,3} & h_{1,4} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & h_{2,4} \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} \\ 0 & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} \\ 0 & 0 & 0 & h_{5,4} \end{bmatrix}$$

Παρακάτω, θα αναλύσουμε πιο διεξοδικά τον τρόπο υπολογισμού των συντελεστών $h_{i,j}$. Π.χ. ο $h_{1,2}$ υπολογίζεται ως $h_{1,2} = (\vec{w}_2, \vec{v}_1) = (A\vec{v}_2, \vec{v}_1)$ εξασφαλίζοντας, με αυτόν τον τρόπο, την καθετότητα των \vec{v}_1 και \vec{v}_3 , αφού

$$(\vec{v}_3, \vec{v}_1) = (A\vec{v}_2 - h_{1,2}\vec{v}_1 - h_{2,2}\vec{v}_2, \vec{v}_1) = (A\vec{v}_2, \vec{v}_1) - h_{1,2}(\vec{v}_1, \vec{v}_1) - h_{2,2}(\vec{v}_2, \vec{v}_1)$$

όπου γνωρίζουμε ότι $(\vec{v}_1, \vec{v}_1) = 1$ και $(\vec{v}_2, \vec{v}_1) = 0$ και θέλουμε $(\vec{v}_3, \vec{v}_1) = 0$. Ακόμη σημειώνεται ότι εξακολουθεί να ισχύει η 2.10, αφού χρησιμοποιήσαμε τον αλγόριθμο Arnoldi για τη δημιουργία της ορθοκανονικής βάσης.

΄Αστοχία΄ του Αλγόριθμου GMRES

Εξετάζοντας τα βήματα του αλγόριθμου υλοποίησης της μεθόδου GMRES διαπιστώνουμε ότι το μόνο σημείο στο οποίο υπάρχει περίπτωση να διακοπεί αναπάντεχα αυτός είναι η δημιουργία της ορθοκανονικής βάσης διανυσμάτων μέσω της μεθόδου Arnoldi. Ειδικότερα, κατά την κανονικοποίηση του διανύσματος \vec{v}_{j+1} αν $h_{j+1,j} = 0$ τότε ο υπολογιστικός κώδικας καλείται να διαιρέσει με μηδενική ποσότητα, επομένως θα υπάρξει διακοπή της εκτέλεσης του προγράμματος. Σε αυτήν την περίπτωση, όμως, το υπόλοιπο της μεθόδου έχει μηδενική τιμή, άρα έχει βρεθεί η ακριβής λύση του γραμμικού συστήματος. ΄Ισχύει άρα ότι $h_{j+1,j} = 0 \iff \vec{b} - A\vec{x} = 0 \iff \vec{x}_{approx} = \vec{x}_{exact}$. **Επομένως η αναπάντεχη αστοχία του αλγόριθμου GMRES αποτελεί ουσιαστικά ευστοχία της μεθόδου υπολογίζοντας την ακριβή λύση.**

2.1.3 Υπολογισμός των Συντελεστών β_i

Για την ανανέωση της νέας προσεγγιστικής λύσης, με τη σχέση $\vec{x}_m = \vec{x}_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i \vec{v}_i$, εμπλέκεται ο υπολογισμός των συντελεστών β_i και αυτό επιτυγχάνεται μέσω ενός

προβλήματος ελαχιστοποίησης [2]. Για το σκοπό αυτό θα υπολογίσουμε το υπόλοιπο \vec{r}_m του \vec{x}_m να έχει ελάχιστη νόρμα-2. Απαιτούμε άρα

$$\min \left\| A\vec{x}_m - \vec{b} \right\|_2 = \min \left\| A\vec{x}_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i A\vec{v}_i - \vec{b} \right\|_2 = \min \left\| \vec{r}_0 - \sum_{i=1}^m \beta_i A\vec{v}_i \right\|_2 \quad (2.14)$$

Η παραπάνω, προς ελαχιστοποίηση, παράσταση μπορεί να γραφεί σε μητρωϊκή μορφή ως $\min \left\| \vec{r}_0 - (AV_m) B_m \right\|$, όπου B_m το διάνυσμα των συντελεστών $\beta_i, i = 1, \dots, m$. Αν λάβουμε υπόψη την 2.10 τότε η προς ελαχιστοποίηση παράσταση γράφεται ως

$$\min \left\| \vec{r}_0 - V_{m+1} \overline{H}_m B_m \right\|_2 \quad (2.15)$$

Ακόμη εκφράζουμε το \vec{r}_0 ως

$$\vec{r}_0 = \|\vec{r}_0\|_2 \vec{v}_1 \quad (2.16)$$

όπου

$$\vec{v}_1 = V_{m+1} e_1 \quad (2.17)$$

άρα

$$\vec{r}_0 = \|\vec{r}_0\|_2 V_{m+1} e_1 \quad (2.18)$$

Σημειώνεται ότι e_1 η πρώτη στήλη του ταυτοτικού μητρώου I διάστασης $(m+1) \times (m+1)$. Άρα η 2.15 μπορεί να γραφεί ως

$$\min \left\| \|\vec{r}_0\|_2 V_{m+1} e_1 - V_{m+1} \overline{H}_m B_m \right\|_2 = \min \left\| V_{m+1} \left\{ \|\vec{r}_0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \right\} \right\|_2 \quad (2.19)$$

Όμως τα διανύσματα \vec{v}_i που συνθέτουν το μητρώο V_{m+1} είναι ανεξάρτητα των συντελεστών β_i όποτε απαιτούμε

$$\min \left\| \|\vec{r}_0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \right\|_2 \quad (2.20)$$

υπολογίζοντας τους συντελεστές $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$.

Σχηματικά η προς ελαχιστοποίηση παράσταση της 2.20 είναι

$$\|\vec{r}_0\|_2 \cdot \begin{array}{|c|} \hline \leftarrow 1 \rightarrow \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \vdots \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ m+1 \\ \downarrow \end{array} - \begin{array}{|c|c|c|} \hline \leftarrow m \rightarrow \\ \hline \square & \dots & \square \\ \hline \square & \dots & \square \\ \hline \vdots & & \vdots \\ \hline \square & \dots & \square \\ \hline \square & \dots & \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ m+1 \\ \downarrow \end{array} \cdot \begin{array}{|c|} \hline \leftarrow 1 \rightarrow \\ \hline \square \\ \hline \vdots \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ m \\ \downarrow \end{array}$$

Παρατηρούμε ότι πρόκειται για $m + 1$ εξισώσεις με m αγνώστους. Το παραπάνω πρόβλημα ελαχιστοποίησης θα μπορούσε να αντιμετωπιστεί π.χ. με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Εδώ, εφαρμόζεται η μέθοδος των διαδοχικών στροφών μητρών γιατί έχει συγκεκριμένα πλεονεκτήματα που θα φανούν στη συνέχεια.

Πρακτικά, για τον υπολογισμό των συντελεστών $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ εργαζόμαστε ως εξής. Θεωρούμε m , έστω F_1, F_2, \dots, F_m , κατάλληλα μητρώα στροφής διαστάσεων $(m + 1) \times (m + 1)$. Τα μητρώα αυτά θεωρείται ότι αποτελούνται (όπως κάθε μητρώο στροφής) από συνημίτονα και ημίτονα της υποτιθέμενης γωνίας στροφής, έστω φ , όπως π.χ. παρακάτω

$$F_1 \equiv \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 & 0 & \dots \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, F_2 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 & \dots \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Όπου για τα $\cos \varphi$ και $\sin \varphi$ χρησιμοποιούμε τις εκφράσεις

$$\cos \varphi = \frac{h_{i,i}}{h_{i,i}^2 + h_{i+1,i}^2} \tag{2.21}$$

και

$$\sin \varphi = \frac{h_{i+1,i}}{h_{i,i}^2 + h_{i+1,i}^2} \tag{2.22}$$

Αν εφαρμόσουμε π.χ. τη στροφή F_1 στο μητρώο Hessenberg \overline{H}_m θα απαλειφθεί, με κατάλληλη επιλογή των ημιτόνων και συνημιτόνων (δηλαδή της αντίστοιχης γωνίας φ), το στοιχείο του $h_{2,1}$ κ.ο.κ. Εφαρμόζοντας διαδοχικά και τα m μητρώα στροφής στο μητρώο \overline{H}_m μπορεί να προκύψει ένα άνω τριγωνικό μητρώο \overline{H}_m^* διαστάσεων $m \times m$. Για την ακρίβεια, το μητρώο που προκύπτει έχει διαστάσεις $(m + 1) \times m$ αλλά η 'πρόσθετη' γραμμή $m + 1$ αποτελείται μόνο από μηδενικά στοιχεία. Άρα, συμβολίζοντας με $Q = F_m F_{m-1} \dots F_2 F_1$ τις διαδοχικές στροφές, έχουμε

$$\overline{H}_m^* = Q \overline{H}_m \tag{2.23}$$

Για το μητρώο των συνολικών στροφών ισχύει

$$Q^H Q = I \tag{2.24}$$

όπου

$$Q^H = \overline{Q}^T = \overline{Q}^T \quad (2.25)$$

Για, έστω, $m=2$ θα έχουμε

$$F_1 \equiv \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, F_2 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

οπότε

$$Q = F_2 F_1 = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \cos \varphi \sin \varphi & \cos^2 \varphi & -\sin \varphi \\ \sin^2 \varphi & \cos \varphi \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

και

$$Q^H = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \cos \varphi \sin \varphi & \sin^2 \varphi \\ -\sin \varphi & \cos^2 \varphi & \cos^2 \varphi \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

άρα

$$Q^H Q = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & 0 \\ q_{21} & q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & q_{33} \end{bmatrix}$$

με

$$\begin{aligned} q_{11} &= \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi + \sin^4 \varphi = 1 \\ q_{12} &= \cos^3 \varphi \sin \varphi + \cos \varphi \sin^3 \varphi - \cos \varphi - \sin \varphi = 0 \\ q_{21} &= \cos^3 \varphi \sin \varphi + \cos \varphi \sin^3 \varphi - \cos \varphi \sin \varphi = 0 \\ q_{22} &= \cos^4 \varphi + \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1 \\ q_{33} &= \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1 \end{aligned}$$

(2.26)

αφού $\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$. Συνεπώς, $Q^H Q = I$.

Εφαρμόζουμε τώρα την συνολική στροφή Q στην εξίσωση 2.20 τότε απαιτούμε

$$\min \|\overline{g}_m - \overline{H}_m^* B_m\|_2 \quad (2.27)$$

όπου

$$\overline{g}_m = Q \|\vec{r}_0\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} \gamma_1 & \gamma_2 & \dots & \gamma_{m+1} \end{bmatrix}^T$$

Η απαίτηση της σχέσης 2.27 οδηγεί στην επίλυση του γραμμικού συστήματος $\overline{g}_m = \overline{H}_m^* B_m$, διαστάσεων $m \times m$. Όμως το μητρώο των συντελεστών H_m^* , όπως έχει ήδη σημειωθεί παραπάνω, είναι άνω τριγωνικό επομένως η επίλυση του γραμμικού συστήματος γίνεται εύκολα με μία μόνο πίσω αντικατάσταση. Το μητρώο H_m^* , διαστάσεων $m \times m$, προκύπτει από το \overline{H}_m , διαστάσεων $(m+1) \times m$, απαλείφοντας τη μηδενική, τελευταία γραμμή (γραμμή $m+1$).

Στο σημείο αυτό παραθέτουμε μια σχέση ιδιαίτερα χρήσιμη, ειδικά κατά την προγραμματιστική υλοποίηση της GMRES,

$$\gamma_{m+1} = \|\|\vec{r}_0\|_2 + \overline{H}_m^* B_m\|_2 \tag{2.28}$$

Η 2.28 υπολογίζει τα $m+1$ στοιχεία του μητρώου στήλης \overline{g}_m το οποίο εμπλέκεται άμεσα στον υπολογισμό των συντελεστών β_i που είναι το ζητούμενο. Για την απόδειξη της παραπάνω έχουμε διαδοχικά, ξεκινώντας από τον υπολογισμό της προσεγγιστικής λύσης \vec{x}_m και του αντίστοιχου υπολοίπου

$$\begin{aligned} \vec{r}_m &= \vec{b} - A\vec{x}_m \\ &= \vec{b} - A(\vec{x}_0 + V_m B_m) \\ &= \vec{r}_0 - AV_m B_m \\ &= \vec{r}_0 - V_{m+1} \overline{H}_m B_m \\ &= \|\vec{r}_0\|_2 V_{m+1} e_1 - V_{m+1} \overline{H}_m B_m \\ &= V_{m+1} \{ \|\vec{r}_0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \} \end{aligned}$$

Επειδή $Q^T Q = I$ μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} \vec{r}_m &= V_{m+1} Q^T Q \{ \|\vec{r}_0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \} \\ &= V_{m+1} Q^T \{ \overline{g}_m - \overline{H}_m^* B_m \} \end{aligned}$$

Στο προς επίλυση πρόβλημα ελαχιστοποίησης επιλέγουμε να λύσουμε την

$$\overline{H}_m^* B_m = \overline{g}_m \tag{2.29}$$

η οποία ουσιαστικά απαλείφει τις m συνιστώσες του \overline{g}_m εκτός από την $m+1$. Επομένως μπορούμε να γράψουμε

$$\vec{r}_m = \vec{b} - A\vec{x}_m = V_{m+1} Q^T (\gamma_{m+1} e_{m+1})$$

Επιπλέον το γεγονός ότι η διανυσματική βάση που δημιουργήθηκε είναι ορθοκανονική επάγεται ότι $V_{m+1}Q^T = I$, άρα τελικά η 2.1.3 δίνει

$$\|\vec{r}_m\|_2 = \left\| \vec{b} - A\vec{x}_m \right\|_2 = \gamma_{m+1} \quad (2.30)$$

Η σχέση 2.30 έχει πολύ σημαντικό ρόλο κατά την προγραμματιστική υλοποίηση της GMRES αφού υπολογίζει τις $m + 1$ συνιστώσες του διανύσματος \overline{g}_m . Έτσι, έχοντας υπολογίσει τα \overline{H}_m^* και \overline{g}_m , είναι εφικτός ο προσδιορισμός του διανύσματος B_m (των συντελεστών β_i) μέσω της 2.29 που ήταν το ζητούμενο.

2.1.4 Η Μέθοδος GMRES με Επανεκκίνηση και Προσταθεροποίηση

Στην GMRES με επανεκκίνηση και προσταθεροποίηση (Preconditioning) γίνεται χρήση ενός κατάλληλου μητρώου προσταθεροποίησης, έστω M , ώστε να επιτευχθεί ταχύτερα η επίλυση του προβλήματος. Σημειώνεται ότι ο προσταθεροποιητής εξαρτάται από τη φύση του προβλήματος, επομένως ένα μητρώο προσταθεροποίησης που αποδίδει σε ένα πρόβλημα δεν είναι σίγουρο ότι θα λειτουργεί με τον ίδιο τρόπο σε ένα άλλο. Επιπλέον, εισαγωγή του μητρώου αυτού οδηγεί σε πρόσθετα γραμμικά συστήματα εντός του βασικού αλγορίθμου. Το μητρώο M που επιλέξαμε κρίνεται λειτουργικό ή όχι βάσει του πόσο πιο γρήγορα λύνουμε το πρόβλημα. Επιπλέον, σημειώνουμε ότι το μητρώο M επιλέγεται να είναι μια εύκολα (μικρού υπολογιστικού κόστους) αντιστρέψιμη εκδοχή του μητρώου των συντελεστών A , δηλαδή μεταξύ των M και A ισχύει $MA \cong I$ όπου I το μοναδιαίο μητρώο διαστάσεων $N \times N$.

Με δεδομένο τον αλγόριθμο της GMRES, ακολουθεί ο τροποποιημένος αλγόριθμος της μεθόδου με προσταθεροποιητή.

-
1. Επιλογή αρχικής λύσης \vec{x}_0 κατά την πρώτη επανάληψη ή $\vec{x}_{(0)} = \vec{x}_{(n)}$ για κάθε επόμενη, και υπολογισμός του αρχικού προσταθεροποιημένου υπολοίπου μέσω της επίλυσης του $M\vec{r}_0 = \vec{b} - A\vec{x}_0$.

$$\text{Υπολογισμός } \vec{v}_1 = \frac{\vec{r}_0}{\|\vec{r}_0\|}$$

2. Υπολογισμός $m - 1$, πρακτικά όμως m , διανυσμάτων βάσης $\vec{v}_2, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_m$

(α) Για $j = 1, 2, \dots, m$

$$\text{Υπολογισμός του } \vec{w}_j \text{ από την επίλυση του } M\vec{w}_j = A\vec{v}_j$$

(β) Για $i = 1, 2, \dots, j$

$$\text{Υπολογισμός } h_{i,j} = (\vec{w}_j, \vec{v}_i)$$

Τέλος

(γ) Υπολογισμός $\vec{v}_{j+1} = \vec{w}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} \vec{v}_i$

$$\text{Υπολογισμός } h_{j+1,i} = \|\vec{v}_{j+1}\|_2$$

$$\text{Κανονικοποίηση του } \vec{v}_{j+1}, \vec{v}_{j+1} = \frac{\vec{v}_{j+1}}{h_{j+1,j}}$$

Τέλος

3. Υπολογισμός, μέσω της επίλυσης ενός προβλήματος ελαχιστοποίησης του υπολοίπου, των m συντελεστών $\beta_1, \beta_1, \dots, \beta_m$ και δημιουργία της νέας λύσης με τη σχέση

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i \vec{v}_i$$

Στον παραπάνω αλγόριθμο, εντοπίζονται δύο επιπλέον γραμμικά συστήματα τα οποία πρέπει να λυθούν. Το πρώτο είναι το $M\vec{r}_{0,pre} = \vec{b} - A\vec{x}_0 = \vec{r}_{0nopro}$, και το δεύτερο το $M\vec{w}_j = A\vec{v}_j$. Σημειώνεται, ότι δεν είναι αναγκαία η σύγκλιση αυτών σε υπερβολικό βάθος, αφού κάτι τέτοιο επιβαρύνει αισθητά τον συνολικό χρόνο σύγκλισης της GMRES. Αντίθετα πρέπει να βρεθεί ο αριθμός επαναλήψεων που εξασφαλίζει μια ικανοποιητική σύγκλιση αυτών των ' υποσυστημάτων ' σε μικρό υπολογιστικό χρόνο. Επίσης, πρέπει να επιλεγεί και η αποδοτικότερη μέθοδος που θα χρησιμοποιηθεί για τη σύγκλιση αυτών. Στην παρούσα διπλωματική εργασία έγινε χρήση και σύγκριση των εξής μεθόδων επίλυσης των γραμμικών συστημάτων προσταθεροποίησης: Jacobi, Runge-Kutta, Gauss-Seidel και Symmetric Gauss-Seidel. Ακολουθεί η συνοπτική παρουσίαση των μεθόδων αυτών, ενώ τα αριθμητικά αποτελέσματα βρίσκονται στο επόμενο κεφάλαιο.

2.1.5 Οι Εξεταζόμενες Μέθοδοι Προσταθεροποίησης

Για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων εξισώσεων που προέκυψαν από τη χρήση του προσταθεροποιητή M

$$M\vec{r}_{0,pre} = \vec{b} - A\vec{x}_0 = \vec{r}_{0nopre} \quad (2.31)$$

και

$$M\vec{w}_j = A\vec{v}_j \quad (2.32)$$

όπου \vec{r}_{0nopre} το πραγματικό, πριν την προσταθεροποίηση, υπόλοιπο και \vec{r}_{0pre} το προσταθεροποιημένο. Αντίστοιχα, \vec{w}_j το προσταθεροποιημένο διάνυσμα του διανύσματος $A\vec{v}_j$.

Εκφράζουμε τις σχέσεις 2.31 και 2.32 ως ακολούθως

$$D_M\vec{r}_{0pre} + \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}\vec{r}_{0pre,nei} = \vec{r}_{0nopre} \quad (2.33)$$

$$D_M\vec{w}_j + \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}\vec{w}_{j,nei} = A\vec{v}_j \quad (2.34)$$

όπου με D_M συμβολίσαμε τα διαγώνια στοιχεία και με Z_M τα λοιπά στοιχεία του μητρώου προσταθεροποίησης M . Η άθροιση των γινομένων των Z_M με το προς υπολογισμό μέγεθος γίνεται (στην προσταθεροποίηση το \vec{r}_{0pre} και το \vec{w}_j αντίστοιχα) στον εκάστοτε αριθμό γειτονικών κόμβων $neimax$ ενός κόμβου επίλυσης, σύμφωνα με την ορολογία που σημειώθηκε στο εισαγωγικό κεφάλαιο.

• Μέθοδος Jacobi

Η μέθοδος Jacobi [17] στηρίζεται στον προσδιορισμό της νέας προσεγγιστικής λύσης, \vec{r}_{0pre}^{n+1} και \vec{w}_j^{n+1} , σε ένα βρόχο επαναλήψεων με μετρητή n , στηριζόμενη μόνο στην παλαιά λύση, \vec{r}_{0pre}^n και \vec{w}_j^n . Ακολουθούν οι σχέσεις προσδιορισμού της νέας λύσης.

$$\vec{r}_{0pre}^{n+1} = D_M^{-1} \left[\vec{r}_{0nopre} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}\vec{r}_{0pre}^n \right] \quad (2.35)$$

$$\vec{w}_j^{n+1} = D_M^{-1} \left[A\vec{v}_j - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}\vec{w}_j^n \right] \quad (2.36)$$

• Μέθοδος Runge-Kutta

Στην επίλυση των συστημάτων με τη μέθοδο Runge-Kutta [11] εκτελούνται nrk βήματα κατά τα οποία σε κάθε ένα από αυτά έχουμε νέο υπολογισμό των όρων $(\vec{r}_{0npre} - M\vec{r}_{0pre}^{n+1,rk})$, $(A\vec{v}_j - M\vec{w}_{0pre}^{n+1,rk})$ και στη συνέχεια προσδιορισμό νέας λύσης. Συνήθως είναι η επιλογή της Runge-Kutta τέταρτης τάξης με τους συντελεστές a_{rk} να παίρνουν τις τιμές $a_1 = 0.11$, $a_2 = 0.2766$, $a_3 = 0.5$, $a_4 = 1$. Ακολουθούν οι σχέσεις προσδιορισμού της νέας λύσης.

$$\begin{aligned} \vec{r}_{0pre}^{n+1,0} &= \vec{r}_{0pre}^n \\ \vec{r}_{0pre}^{n+1,rk} &= \vec{r}_{0pre}^n - a_{rk} \frac{\Delta t}{\Omega} \left(\vec{r}_{0npre} - M\vec{r}_{0pre}^{n+1,rk-1} \right), rk = 1, \dots, nrk \\ \vec{r}_{0pre}^{n+1} &= \vec{r}_{0pre}^{n+1,nrk} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \vec{w}_j^{n+1,0} &= \vec{w}_j^n \\ \vec{w}_j^{n+1,rk} &= \vec{w}_j^n - a_{rk} \frac{\Delta t}{\Omega} \left(A\vec{v}_j - M\vec{w}_{0pre}^{n+1,rk-1} \right), rk = 1, \dots, nrk \\ \vec{w}_j^{n+1} &= \vec{w}_j^{n+1,nrk} \end{aligned} \quad (2.38)$$

• Μέθοδος Gauss-Seidel

Η μέθοδος Gauss-Seidel [17] αποτελεί παραλλαγή της μεθόδου Jacobi. Σε αντίθεση με την Jacobi όμως, σε μια επανάληψη της Gauss-Seidel, για τους γειτονικούς κόμβους του κεντρικού, γίνεται χρήση των νέων τιμών που έχουν υπολογισθεί προηγουμένως στη σάρωση του πλέγματος μέχρι τον κόμβο επίλυσης. Ακολουθούν οι σχέσεις προσδιορισμού της νέας λύσης.

$$\vec{r}_{0pre}^{n+1} = D_M^{-1} \left[\vec{r}_{0npre} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{r}_{0pre}^n - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{r}_{0pre}^{n+1} \right] \quad (2.39)$$

$$\vec{w}_j^{n+1} = D_M^{-1} \left[A\vec{v}_j - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{w}_j^n - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{w}_j^{n+1} \right] \quad (2.40)$$

Στις παραπάνω σχέσεις αναφέρουμε ότι με $Z_{M,nei}^U$ και $Z_{M,nei}^L$ συμβολίζουμε τα άνω και κάτω τριγωνικά μητρώα του μητρώου $(M - D_M)$, όπου D_M το μητρώο των διαγώνιων στοιχείων του M , δηλαδή τις περιοχές όπου βρίσκονται τα μη-διαγώνια στοιχεία.

• Μέθοδος Συμμετρική Gauss-Seidel

Όμοια με την Gauss-Seidel, η Συμμετρική Gauss-Seidel [7] χρησιμοποιεί τις ήδη υπολογισμένες νέες τιμές, αλλά σε δύο βήματα. Εκτελεί δύο σάρωσεις του πλέγματος με διαφορετική όμως κατεύθυνση σάρωσης, με την πρώτη να υπολογίζει την τιμή στο βήμα $n + \frac{1}{2}$ και σάρωση από τον (αριθμημένα) πρώτο κόμβο προς τον τελευταίο και τη δεύτερη τη νέα λύση της $n + 1$ σαρώνοντας από τον τελευταίο κόμβο στον πρώτο. Ουσιαστικά, πρόκειται για δύο επαναλήψεις της Gauss-Seidel. Το παραπάνω τονίζεται για λόγους που θα γίνουν κατανοητοί στο επόμενο κεφάλαιο με τις αριθμητικές εφαρμογές.

$$\begin{aligned}\vec{r}_{0pre}^{n+\frac{1}{2}} &= D_M^{-1} \left[\vec{r}_{0nopre} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{r}_{0pre}^n - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{r}_{0pre}^{n+1} \right] \\ \vec{r}_{0pre}^{n+1} &= D_M^{-1} \left[\vec{r}_{0nopre} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{r}_{0pre}^{n+1} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{r}_{0pre}^{n+\frac{1}{2}} \right]\end{aligned}\quad (2.41)$$

$$\begin{aligned}\vec{w}_j^{n+\frac{1}{2}} &= D_M^{-1} \left[A\vec{v}_j - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{w}_j^n - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{w}_j^{n+1} \right] \\ \vec{w}_j^{n+1} &= D_M^{-1} \left[A\vec{v}_j - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^U \vec{w}_j^{n+1} - \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{M,nei}^L \vec{w}_j^{n+\frac{1}{2}} \right]\end{aligned}\quad (2.42)$$

Κεφάλαιο 3

Αριθμητική Διερεύνηση της Χρήσης της Μεθόδου GMRES στην Επίλυση των Συζυγών Εξισώσεων

Μετά τη μαθηματική θεμελίωση της μεθόδου GMRES με προσταθεροποίηση (PGMRES) ακολουθεί η αριθμητική διερεύνηση αυτής στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό αεροτομής (μεμονωμένης αλλά και πτερύγωσης συμπίεστη), με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από αυτήν. Στόχος είναι να εξετάσουμε τη συμπεριφορά της PGMRES έναντι της μεθόδου Jacobi, αλλά και να επιλέξουμε τις παραμέτρους αυτής ώστε να γίνει ακόμη πιο αποδοτική από άποψη υπολογιστικού χρόνου, πράγμα που αποτελεί και το ζητούμενο σε πρακτικά προβλήματα. Οι βασικοί παράγοντες από τους οποίους εξαρτάται ο υπολογιστικός χρόνος σύγκλισης της μεθόδου θεωρούμε ότι είναι η επιλεγείσα βάση της PGMRES m και ο αριθμός των επαναλήψεων n_{pre} , της μεθόδου των υπόσυστημάτων προσταθεροποίησης. Επιπλέον, άλλος ένας παράγοντας είναι και η μέθοδος προσταθεροποίησης που θα επιλεγεί. Για τη μελέτη των παραπάνω θεωρούμε ότι κάθε παράγοντας είναι ανεξάρτητος από τον άλλον, έτσι η αλλαγή σε έναν παράγοντα επιδρά άμεσα και μόνο στον υπολογιστικό χρόνο.

Για όσο το δυνατόν πιο αξιόπιστα συμπεράσματα σχετικά με τη μέθοδο PGMRES, αυτή εφαρμόστηκε σε ένα πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού και συγκεκριμένα στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων (και μόνο, αφού αυτές είναι ένα block γραμμικό σύστημα) για διαφορετικού μεγέθους υπολογιστικά πλέγματα (πάντα μη δομημένου τύπου), σε διαφορετικούς θεωρούμενους τύπους ροών αλλά και σε μεμονωμένες αεροτομές και πτερυγώσεις στροβιλομηχανών, με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από αυτές. Ειδικά για τους τύπους ροών αναφέρουμε ότι χρησιμο-

ποιήθηκαν ατριβείς ροές (ροές που διέπονται από τις εξισώσεις Euler), στρωτές ροές (laminar flows) και τυρβώδεις ροές (turbulent flows). Για τη γένεση των μη δομημένων πλεγμάτων και για τον υπολογισμό του πεδίου ροής έγινε εφαρμογή λογισμικού του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών (ΕΘΣ) του ΕΜΠ. Τέλος, εξετάζεται η συμπεριφορά της PGMRES με χρήση προσαθεροποιητών Jacobi, Runge-Kutta, Gauss-Seidel και Συμμετρική Gauss-Seidel.

Σημειώνεται ότι οι υπολογιστικοί χρόνοι οι οποίοι παρουσιάζονται στο παρόν κεφάλαιο αντιστοιχούν σε προσωπικό υπολογιστή με χαρακτηριστικά 2GB μνήμη RAM, επεξεργαστή Intel Core 2 Duo 1.66GHz και λειτουργικό σύστημα 32bit Windows Vista.

3.1 Οι Εξισώσεις της Ροής

Στο παρόν κεφάλαιο θεωρούμε διδιάστατη ροή συμπιεστού, συνεκτικού ρευστού γύρω από μεμονωμένη αεροτομή και μέσα σε περύγωση συμπιεστή. Η ροή αυτή μοντελοποιείται μέσω των εξισώσεων Navier-Stokes οι οποίες εκφράζουν τη διατήρηση της συνέχειας, της ορμής και της ενέργειας. Οι εξισώσεις αυτές σε συντηρητική μορφή γράφονται [16]

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}^{inv}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}^{inv}}{\partial y} - \frac{\partial \vec{F}^{vis}}{\partial x} - \frac{\partial \vec{G}^{vis}}{\partial y} = \vec{0} \quad (3.1)$$

όπου $\vec{U} = (\rho, \rho u, \rho v, E)^T$ το διάνυσμα των μεταβλητών της ροής. Επιπλέον ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, u και v οι καρτεσιανές συνιστώσες της ταχύτητας κατά x και y , E η ολική ενέργεια του ρευστού ανά μονάδα όγκου που ισούται με

$$E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \quad (3.2)$$

όπου e η εσωτερική ενέργεια ανά μονάδα μάζας. Στις εφαρμογές που ακολουθούν θεωρούμε μόνιμη ροή (άρα μηδενική μεταβολή των μεγεθών στο χρόνο), ωστόσο στο πλαίσιο επίλυσης των εξισώσεων σε μια επαναληπτική διαδικασία ο όρος $\frac{\partial \vec{U}}{\partial t}$ σχετίζεται με τη μεταβολή των μεγεθών στο ψευδοχρόνο που εισάγει αυτή. Με \vec{F} και \vec{G} συμβολίζονται τα διανύσματα της ροής στις δύο συνιστώσες, ενώ με inv οι μη-συνεκτικοί όροι και με vis οι συνεκτικοί. Τα παραπάνω διανύσματα ορίζονται ως

ακολουθώς

$$\vec{F}^{inv} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{bmatrix}, \vec{G}^{inv} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

και

$$\vec{F}^{vis} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \\ u\sigma_{xx} + v\sigma_{xy} + q_x \end{bmatrix}, \vec{G}^{vis} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \\ u\sigma_{xy} + v\sigma_{yy} + q_y \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

όπου σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} είναι οι συνιστώσες του τανυστή των συνεκτικών τάσεων οι οποίες ορίζονται ως

$$\sigma_{xx} = 2\nu \frac{\partial u}{\partial x}, \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \sigma_{yy} = 2\nu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.5)$$

όπου ν η κινηματική συνεκτικότητα του ρευστού. Τέλος, q_x , q_y οι συνιστώσες του διανύσματος μεταφοράς θερμότητας από στοιχειώδη όγκο ρευστού προς το περιβάλλον.

Ακόμη, στο παρόν κεφάλαιο γίνεται εφαρμογή ατριβών ροών οι οποίες διέπονται από τις εξισώσεις Euler. Οι εξισώσεις Euler προκύπτουν από τις εξισώσεις 3.1 μηδενίζοντας τους όρους συνεκτικότητας \vec{F}^{vis} , \vec{G}^{vis} . Σημειώνουμε ότι στις εξισώσεις 3.1 έχουν παραλειφθεί οι όροι βαρύτητας, ενώ για το κλείσιμο αυτών θεωρούμε ι-σεντροπικό, νευτώνιο ρευστό για το οποίο ισχύει η καταστατική εξίσωση των τελειών αερίων.

Για τη μοντελοποίηση του όρου ροής θερμότητας γίνεται χρήση του νόμου του Fourier, ενώ για τη μοντελοποίηση της τύρβης (όταν η ροή είναι τυρβώδης) έγινε χρήση του μοντέλου μιας εξίσωσης Spalart–Allmaras [14]. Έτσι μαζί με τις εξισώσεις της ροής ο κώδικας επιλύει και την εξίσωση μοντελοποίησης της τύρβης.

Οι εξισώσεις που περιγράφονται από τη σχέση 3.1 τονίζεται ότι είναι συζευγμένες (coupled) δηλαδή λύνονται ταυτόχρονα με τη λύση μιας μεταβλητής να εξαρτάται από τις λύσεις των άλλων. Επιπλέον οι εξισώσεις 3.1 αντιστοιχούν σε ένα μη γραμμικό, block σύστημα. Λέγοντας block αναφερόμαστε στο γεγονός ότι σε κάθε κόμβο υπολογισμού λύνουμε ένα 4×4 ή 3×3 (ανάλογα με το πλήθος των μεταβλητών για συμπίεστο ή ασυμπίεστο ρευστό) σύστημα εξισώσεων ώστε να υπολογίσουμε το διάνυσμα των μεταβλητών ροής σε κάθε θέση του πεδίου. Στο παρόν κεφάλαιο ασχολούμαστε με εφαρμογές συμπίεστου ρευστού άρα έχουμε 4×4 block συστήματα.

Υπογραμμίζεται ότι για τη γένεση πλεγμάτων και για τον υπολογισμό του πεδίου ροής γύρω από τις ή μέσα στις επιλεγείσες γεωμετρίες έγινε χρήση του κώδικα

Navier–Stokes του ΕΣΘ/ΕΜΠ [4], [16] χωρίς κάποια παρέμβαση της παρούσας εργασίας.

3.2 Αντίστροφος Σχεδιασμός Αεροτομής μέσω των Διακριτών Συζυγών Εξισώσεων

Στο παρόν κεφάλαιο εφαρμόζουμε αντίστροφο σχεδιασμό (μεμονωμένης) αεροτομής (αλλά και πτερύγωσης συμπίεστη) [11], [3] με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από αυτήν. Ο στόχος αυτός εκφράζεται μαθηματικά μέσω μιας συνάρτησης στόχου F η οποία είναι βαθμωτή, εκφράζει δηλαδή μόνο ένα στόχο, και μπορεί να γραφεί ως

$$F = \frac{1}{2} \int_s (p - p_{target})^2 ds \quad (3.6)$$

Στις ακόλουθες εφαρμογές ο στόχος θα παρουσιάζεται μέσω της κατανομής του συντελεστή πίεσης C_p που αντιστοιχεί στη δεδομένη κατανομή πίεσης. Η αεροτομή που σχεδιάζεται παραμετροποιείται με πολυώνυμα Bezier-Bernstein τα οποία ορίζουν ένα διάνυσμα \vec{b} μεταβλητών σχεδιασμού, που είναι τα σημεία σχεδιασμού.

Η συνάρτηση στόχου διατυπώνεται στη μορφή

$$F = F(\vec{U}, \vec{b}) \quad (3.7)$$

όπου \vec{U} είναι το διάνυσμα που εκφράζει τις μεταβλητές ροής και προκύπτει από την επίλυση των εξισώσεων Navier–Stokes ή Euler ανάλογα με την περίπτωση. Η εξίσωση 3.7 εκφράζει την εξάρτηση της συνάρτησης στόχου από το διάνυσμα \vec{b} , δηλαδή από τη μορφή της αεροτομής, και το διάνυσμα \vec{U} , δηλαδή από το πεδίο ροής που διαμορφώνεται γύρω από την αεροτομή. Κάθε αλλαγή $\delta\vec{b}$ στις μεταβλητές σχεδιασμού \vec{b} τροποποιεί τη γεωμετρία της αεροτομής, διαμορφώνει διαφορετικό πεδίο ροής \vec{U} γύρω από αυτήν (μεταβάλλεται κατά $\delta\vec{U}$) και, επομένως, δίνει μια νέα τιμή της συνάρτησης στόχου. Μπορούμε δηλαδή να γράψουμε $F = F(\vec{U}(\vec{b}), \vec{b})$ ενώ βάση της παραπάνω πρότασης ισχύει για τη μεταβολή της συνάρτησης στόχου F

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \quad (3.8)$$

που με $\delta\vec{b}$ συμβολίζουμε κάθε μεταβολή της μορφής της αεροτομής και αντίστοιχα με $\delta\vec{U}$ την προκαλούμενη μεταβολή του πεδίου ροής. Η εύρεση του ακρότατου της F , δηλαδή η ικανοποίηση του στόχου της δεδομένης κατανομής πίεσης, ισοδυναμεί με

την εύρεση των τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} , για τις οποίες έχουμε $\delta F = \vec{0}$.

Στην εξίσωση 3.8 υπάρχουν δύο συμμετοχές στη μεταβολή της συνάρτησης στόχου, μία που οφείλεται στη μεταβολή του ροϊκού πεδίου, οφειλόμενη στην αλλαγή της γεωμετρίας της αεροτομής, και μία που εκφράζει την απευθείας επίδραση της αλλαγής της γεωμετρίας στην τιμή της συνάρτησης στόχου. Οι εξισώσεις που διέπουν το πεδίο ροής, δηλαδή οι εξισώσεις Euler ή Navier-Stokes ανάλογα με το μοντέλο ροής που θα επιλεγεί, γράφονται με τη συμβολική χρήση του τελεστή ροής \vec{R} στη μορφή

$$\vec{R} = \vec{R}(\vec{U}, \vec{b}) = \vec{0} \quad (3.9)$$

Κάθε μεταβολή $\delta\vec{b}$ της μορφής της αεροτομής έχει ως αποτέλεσμα τη μεταβολή του πεδίου ροής γύρω από αυτήν. Συνεχίζουν, όμως, να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, άρα πρέπει να ισχύει

$$\delta\vec{R} = \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{U}}\delta\vec{U} + \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{b}}\delta\vec{b} = \vec{0} \quad (3.10)$$

όπου

$$\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{b}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial b_1} & \frac{\partial R_1}{\partial b_2} & \cdots & \frac{\partial R_1}{\partial b_N} \\ \frac{\partial R_2}{\partial b_1} & \frac{\partial R_2}{\partial b_2} & \cdots & \frac{\partial R_2}{\partial b_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial R_k}{\partial b_1} & \frac{\partial R_k}{\partial b_2} & \cdots & \frac{\partial R_k}{\partial b_N} \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

και αντίστοιχα για το μητρώο $\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{U}}$. Το διάνυσμα της μεταβολής $\delta\vec{R}$ πολλαπλασιάζεται με ένα διάνυσμα γραμμής $\vec{\Psi}^T$ και η βαθμωτή ποσότητα που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό αυτό αφαιρείται από τη μεταβολή της συνάρτησης στόχου, εξίσωση 3.8. Το αν θα γίνει αφαίρεση ή πρόσθεση είναι αδιάφορο, αρκεί οι υπόλοιπες ενέργειες να είναι συμβατές. Η πράξη αυτή δεν αλλοιώνει το στόχο μας ο οποίος συνεχίζει να είναι η εύρεση εκείνου του διανύσματος \vec{b} που μηδενίζει τη μεταβολή δF και ικανοποιεί το στόχο, η οποία αποτελεί αναγκαία συνθήκη για το ακρότατο της συνάρτησης στόχου F , αφού η μεταβολή $\delta\vec{R}$ είναι μηδενική.

Δημιουργείται έτσι λεγόμενη επαυξημένη συνάρτηση στόχου (augmented objective function, F_{aug}), της οποίας η μεταβολή είναι

$$\delta F_{aug} = \frac{\partial F}{\partial\vec{U}}\delta\vec{U} + \frac{\partial F}{\partial\vec{b}}\delta\vec{b} - \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{U}}\delta\vec{U} + \frac{\partial\vec{R}}{\partial\vec{b}}\delta\vec{b} \right) \quad (3.12)$$

ή

$$\delta F_{aug} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \delta \vec{U} + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (3.13)$$

Η κεντρική ιδέα της συζυγούς μεθόδου είναι να επιλεγεί εκείνο το διάνυσμα $\vec{\Psi}$ το οποίο μηδενίζει τον πρώτο όρο του δεξιού μέλους της 3.13, να έχουμε δηλαδή

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) = 0 \quad (3.14)$$

Με την απαίτηση αυτή, η μεταβολή της συνάρτησης στόχου εξαρτάται μόνο από την μεταβολή του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού $\delta \vec{b}$ αλλά όχι από τις επαγόμενες μεταβολές $\delta \vec{U}$ του πεδίου ροής. Το πεδίο $\vec{\Psi}$, το οποίο ονομάζεται πλέον πεδίο των **συζυγών μεταβλητών** (adjoint variables) προκύπτει από τη λύση της **συζυγούς εξίσωσης** (adjoint equation), ή ακριβέστερα από τη λύση του συστήματος εξισώσεων,

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \vec{\Psi} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (3.15)$$

Επίσης, στις περιπτώσεις που θεωρούμε τυρβώδη ροή (και χρησιμοποιούμε το μοντέλο Spalart-Allmaras μαζί με τις εξισώσεις της μέσης ροής για τον υπολογισμό του πεδίου) δεν επιλύουμε τη συζυγή εξίσωση της τυρβώδους συνεκτικότητας αλλά μόνο τις συζυγείς εξισώσεις της μέσης ροής. Θεωρούμε δηλαδή

$$\delta (\text{Spalart} - \text{Allmaras}) = 0 \quad (3.16)$$

Υπογραμμίζεται ότι η εξίσωση 3.15 είναι **γραμμική** ως προς $\vec{\Psi}$, αφού το μητρώο $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T$ δεν συναρτάται του $\vec{\Psi}$. Τέλος, από την εξίσωση 3.13 απομένει μόνο η ευθεία συσχέτιση της μεταβολής της τιμής της συνάρτησης στόχου με τη μεταβολή της γεωμετρίας του ορίου $\delta \vec{b}$. Είναι δηλαδή,

$$\delta F_{aug} = \vec{G}^T \delta \vec{b} \quad (3.17)$$

με

$$\vec{G}^T = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (3.18)$$

Η επίλυση του συστήματος 3.15 υπολογίζει το πεδίο των συζυγών μεταβλητών $\vec{\Psi}$, το οποίο εν συνεχεία χρησιμοποιείται στις σχέσεις 3.17 και 3.18 ώστε να υπολογισθεί η παράγωγος της συνάρτησης στόχου ως προς τις μεταβλητές ελέγχου της γεωμετρίας

\vec{b} . Οι συζυγείς μεταβλητές $\vec{\Psi}$, συχνά ονομάζονται και **δυναδικές μεταβλητές** (dual variables), τονίζοντας έτσι τη δυναδικότητα τους ως προς τις μεταβλητές του πεδίου ροής \vec{U} .

Με τη διαδικασία που προηγήθηκε καταλήξαμε στο ότι η μεταβολή της επαυξημένης συνάρτησης στόχου είναι ανεξάρτητη από τη μεταβολή κάθε ροϊκού μεγέθους και εξαρτάται μόνο από τις μεταβολές της γεωμετρίας. Επισημαίνεται ότι η επαυξημένη συνάρτηση-στόχος σχηματίστηκε από τη διακριτή γραφή της συνάρτησης-στόχου, τις διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής καθώς και από τις κομβικές τιμές της συζυγούς μεταβλητής.

Η παραπάνω συζυγής μέθοδος χαρακτηρίζεται ως **διακριτή** γιατί οι συζυγείς εξισώσεις δημιουργούνται επεξεργάζοντας το μητρώο των εξισώσεων ροής Navier-Stokes μετά τη **διακριτοποίηση** τους. Δηλαδή οι εξισώσεις που δημιουργούνται είναι συζυγείς των διακριτοποιημένων Navier-Stokes.

3.2.1 Σύνδεση της Μεθόδου GMRES με τις Συζυγείς Διακριτές Εξισώσεις Βελτιστοποίησης

Όπως αναλύθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο η μέθοδος GMRES χρησιμοποιείται για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος της μορφής $A\vec{x} = \vec{b}$ ενώ στον αντίστροφο σχεδιασμό αεροτομής με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης καταλήξαμε στη επίλυση του γραμμικού συστήματος που ακολουθεί

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \quad (3.19)$$

Στην 3.19 $\vec{\Psi}$ είναι το συζυγές πεδίο που διαμορφώνεται γύρω από την αεροτομή, δηλαδή το συζυγές του \vec{U} . Επομένως και το $\vec{\Psi}$ είναι ένα διάνυσμα που σε κάθε κόμβο του διακριτοποιημένου χώρου έχει τέσσερις μεταβλητές (τις συζυγείς των $(\rho, \rho u, \rho v, E)^T$) που χρειάζεται να υπολογισθούν. Σε αντιστοιχία με τις παρατηρήσεις που διατυπώθηκαν για τις εξισώσεις ροής σημειώνουμε ότι οι εξισώσεις των εξισώσεων 3.19 είναι γραμμικές και συζευγμένες (coupled). Επιπλέον το σύστημα 3.19 είναι επίσης block και μάλιστα 4×4 , αφού προσδιορίζουμε τις συζυγείς μεταβλητές συμπιεστού ρευστού.

Στο πλαίσιο μίας επαναληπτικής διαδικασίας επίλυσης, εισάγοντας τον ψευδο-

χρονικό όρο $\frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t}$, γίνεται

$$\frac{\partial \vec{\Psi}_{n+1}}{\partial t} + \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \vec{\Psi}_{n+1} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (3.20)$$

Ακολουθώντας τη δέλτα διατύπωση (Delta Formulation) το προς υπολογισμό μέγεθος $\vec{\Psi}$ υπολογίζεται ως

$$\vec{\Psi}_{n+1} = \vec{\Psi}_n + \Delta \vec{\Psi} \quad (3.21)$$

όπου $\Delta \vec{\Psi}$ η διόρθωση του μεγέθους $\vec{\Psi}$ μεταξύ των κύκλων υπολογισμού. Αντικαθιστώντας την 3.21 στην 3.20 προκύπτει

$$\frac{\partial [\vec{\Psi}_n + \Delta \vec{\Psi}]}{\partial t} + \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T [\vec{\Psi}_n + \Delta \vec{\Psi}] = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (3.22)$$

ή ισοδύναμα

$$\frac{\partial \Delta \vec{\Psi}}{\partial t} + A \Delta \vec{\Psi} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T - \left[A \vec{\Psi}_n + \frac{\partial \vec{\Psi}_n}{\partial t} \right] = \vec{c} \quad (3.23)$$

με το $\vec{\Psi}_{old}$ να είναι 'παγωμένο' κατά την επίλυση της 3.23, ενώ συμβολίζουμε $A = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T$.

Για την επίλυση της 3.23, δηλαδή του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από την απαίτηση να υπάρχει δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από την αεροτομή κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό αυτής, εφαρμόζεται η μέθοδος GMRES με το διάνυσμα των άγνωστων ποσοτήτων \vec{x} να εκφράζει τις συζυγείς μεταβλητές, δηλαδή είναι $\vec{x} = \Delta \vec{\Psi}$, ενώ το διάνυσμα \vec{b} του δεξιού μέλους την ποσότητα $\left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T - \left[A \vec{\Psi}_n + \frac{\partial \vec{\Psi}_n}{\partial t} \right] = \vec{c}$, είναι δηλαδή $\vec{b} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T - \left[A \vec{\Psi}_n + \frac{\partial \vec{\Psi}_n}{\partial t} \right] = \vec{c}$.

Για την επίλυση του συζυγούς πεδίου, δηλαδή τον προσδιορισμό του $\vec{\Psi}$, χρειαζόμαστε τη διακριτοποίηση του χώρου γύρω από την υπό μελέτη αεροτομή. Στην παρούσα διπλωματική εργασία έγινε χρήση μη-δομημένων πλεγμάτων με τριγωνικά στοιχεία στα οποία κάθε κόμβος επίλυσης δεν έχει σταθερό αριθμό γειτονικών κόμβων. Επιπλέον η γενική αρίθμηση των κόμβων έχει ως αποτέλεσμα την τυχαιότητα και στους αύξοντες αριθμούς των γειτόνων ενός κόμβου. Έτσι το μητρώο A είναι αραιό και απέχει πολύ από τη μορφή που έχει σε ένα δομημένο πλέγμα όπου πέρα της κεντρικής διαγωνίου, η οποία αφορά τους κόμβους επίλυσης, οι συνεισφορές των γειτόνων βρίσκονται και αυτές σε μορφή γειτονικών διαγωνίων ως προς την κεντρική.

Για τον παραπάνω λόγο την 3.23 την γράφουμε ισοδύναμα

$$D\Delta\vec{\Psi}_{node} + \sum_{nei=1}^{neimax} Z_{nei}\Delta\vec{\Psi}_{nei} = \vec{c} \quad (3.24)$$

Στην παραπάνω εξίσωση το μητρώο D περιέχει τους συντελεστές των διαγωνίων στοιχείων μαζί με αυτούς που προκύπτουν από την εισαγωγή του ψευδοχρονικού όρου ενώ αντίστοιχα το Z την συνεισφορά κάθε γειτονικού κόμβου στον κόμβο επίλυσης, για αυτό υπάρχει και η άθροιση σε όλο το πλήθος των γειτόνων. Σημειώνεται ακόμη, ότι οι συντελεστές που σχετίζονται με την ψευδοχρονική εξάρτηση του $\vec{\Psi}$ και οι οποίοι δημιουργήθηκαν από την εισαγωγή του όρου $\frac{\partial\vec{\Psi}_{n+1}}{\partial t}$ παίζουν σημαντικό ρόλο στη σύγκλιση των αριθμητικών μεθόδων που χρησιμοποιούνται αφού, όπως σημειώθηκε, εμπεριέχονται στο μητρώο D . **Στο σημείο αυτό υπογραμμίζεται ότι η μέθοδος GMRES είχε πιο γρήγορη και σε μικρότερη τιμή υπολοίπου σύγκλιση όταν δεν λαμβάνεται υπόψη ο ψευδοχρονικός όρος, για αυτό στο σύνολο των εφαρμογών που εξετάζονται η χρήση της μεθόδου GMRES θα γίνεται χωρίς τον ψευδοχρονικό όρο.** Επιπλέον με $node$ συμβολίσαμε τον κόμβο επίλυσης και με nei τον γείτονα αυτού. Έτσι σε κάθε σημείο του αλγόριθμου GMRES που παρουσιάζεται πράξη μεταξύ διανυσματικής ποσότητας ή μητρώου με το μητρώο συντελεστών A αυτή υλοποιείται μέσω της ανάλυσης αυτού σε D και Z .

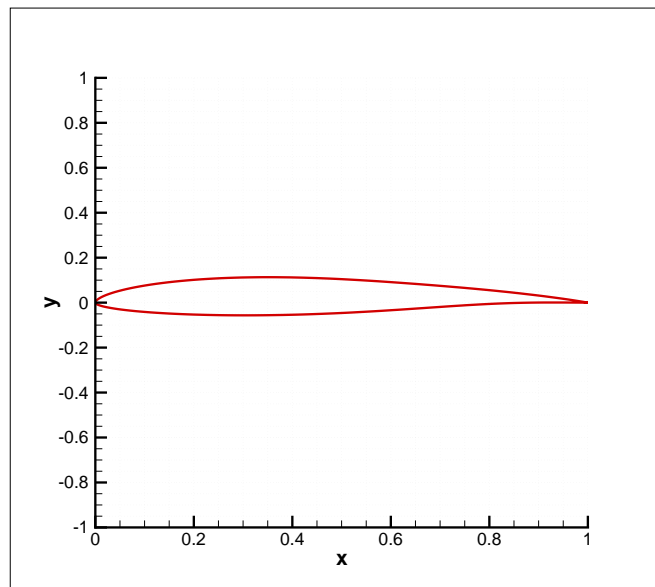
3.3 Ρύθμιση των Παραμέτρων της PGMRES

Στις εφαρμογές που ακολουθούν επιλύουμε τις συζυγείς εξισώσεις στον αντίστροφος σχεδιασμός μεμονωμένης αεροτομής με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από αυτήν. Ο στόχος της δεδομένης πίεσης θα παρουσιάζεται από την αντίστοιχη κατανομή του συντελεστή πίεσης C_p . Για την εφαρμογή εργαζόμαστε ως εξής. Με δεδομένη την αεροτομή του σχήματος 3.1 παράγουμε τη κατανομή του συντελεστή πίεσης 3.2. Αυτή η κατανομή θα είναι ο στόχος του αντίστροφου σχεδιασμού, που φυσιολογικά πρέπει να αναπαράγει τη γεωμετρία αεροτομής από την οποία παράχθηκε αν ολοκληρώναμε τη διαδικασία του αντίστροφου σχεδιασμού. Με αυτόν τον τρόπο είναι ξεκάθαρο το γεγονός ότι στην παρούσα εργασία δεν μας απασχολεί το θέμα της αντίστροφου σχεδιασμού αλλά το πόσο γρηγορότερα μπορούμε να επιλύσουμε τις συζυγείς εξισώσεις σε ένα τέτοιο πρόβλημα. Για το λόγο αυτό δεν υπήρξε καμία παρέμβαση στον κώδικα των συζυγών εξισώσεων [11] πέρα της προσθήκης της μεθόδου GMRES σαν επιλύτη.

Επιπλέον στις εφαρμογές μεμονωμένης αεροτομής που ακολουθούν έχουμε τα

εξής χαρακτηριστικά ροής :

- Αριθμός Mach της επ' άπειρον ροής $M=0.2$.
- Γωνία πρόσπτωσης της ροής $\alpha=4^\circ$.

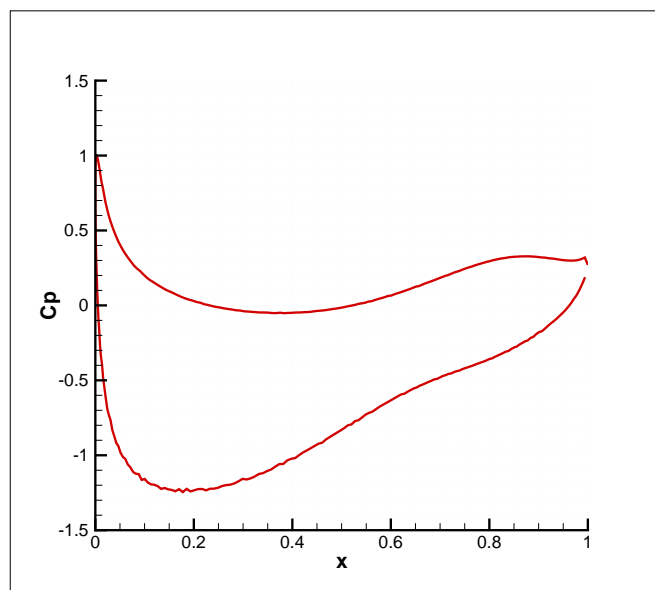


Σχήμα 3.1: Αναμενόμενη μορφή μεμονωμένης αεροτομής μετά τον αντίστροφο σχεδιασμό

Στο σχήμα 3.2 ο άξονας x αντιστοιχεί στην αξονική κατεύθυνση. Από τη στιγμή που η αεροτομή 3.1 βρίσκεται υπό μηδενική κλίση αυτή ταυτίζεται με τη χορδή της αεροτομής.

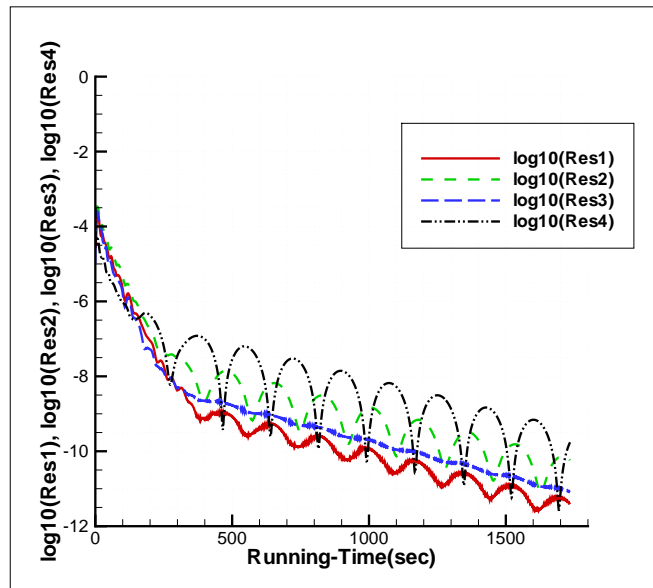
3.3.1 Επιλογή της Διανυσματικής Βάσης

Αρχικά παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα εφαρμογής της μεθόδου GMRES με και χωρίς προσαθεροποίηση στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων του προβλήματος αντίστροφου σχεδιασμού μεμονωμένης αεροτομής. Εφαρμόζουμε στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων σε πλέγμα περίπου 5000 κόμβων με κριτήριο σύγκλισης $\max(\log_{10}(Residual)) \leq -12.00$. Στο κριτήριο σύγκλισης δεν γίνεται αναγωγή στο αρχικό υπόλοιπο αλλά η επαναληπτική διαδικασία τερματίζεται όταν το μέγιστο λογαριθμικό υπόλοιπο των εξισώσεων είναι κάτω από μια ορισμένη τιμή. Σημειώνεται ακόμη ότι θα συμβολίζουμε $\log_{10}(Residual_i) \equiv LOGERR_i$, όπου i το πλήθος των εξισώσεων που επιλύουμε. Στο σχήμα 3.15 παρουσιάζεται η λογαριθμική τιμή υπολοίπου των εξισώσεων της GMRES με προσαθεροποίηση ενώ στο σχήμα

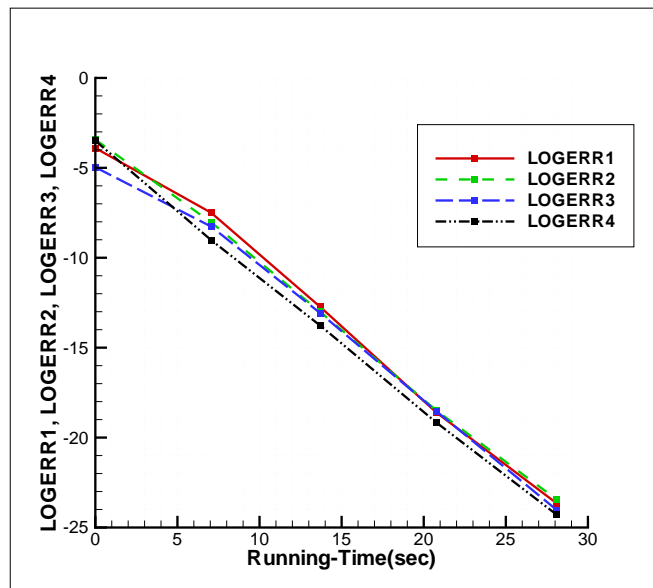


Σχήμα 3.2: Επιθυμητή κατανομή (στόχος) του συντελεστή πίεσης C_p στο περίγραμμα της αεροτομής

3.3 φαίνεται η πορεία του υπολοίπου της GMRES χωρίς προσαθεροποίηση. Όπως φαίνεται η χρήση της μεθόδου GMRES χωρίς προσαθεροποίηση δεν πιάνει την τιμή υπολοίπου που έχουμε θέσει ως κριτήριο σύγκλισης σε χρόνο που να είναι συγκρίσιμος με αυτόν της προσαθεροποιημένης μεθόδου (η προσαθεροποιημένη συγκλίνει πολύ γρηγορότερα). Για αυτόν τον λόγο, στη συνέχεια, εφαρμόζεται μόνο η GMRES με προσαθεροποίηση (PGMRES).



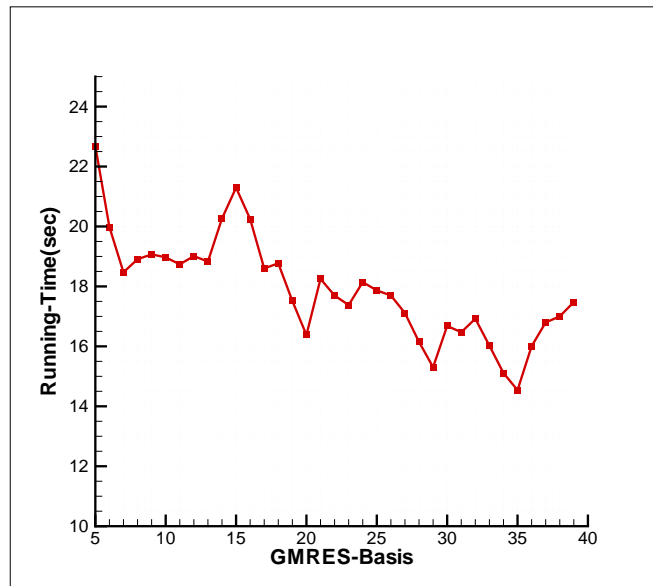
Σχήμα 3.3: Υπολογιζόμενο υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος GMRES χωρίς προσαθεροποίηση, βάση $m = 35$



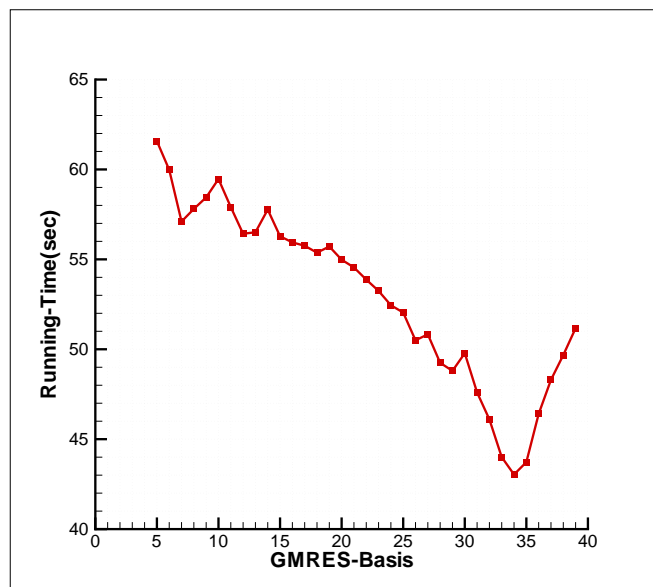
Σχήμα 3.4: Υπολογιζόμενο υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, υποεπαναλήψεις προσαθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$

Εξετάζουμε τώρα τον απαιτούμενο χρόνο σύγκλισης της PGMRES, στο πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού που εξετάζουμε, ως προς την τιμή της διανυσματικής ορθοκανονικής βάσης m . Σημειώνουμε ότι βιβλιογραφικά [6], [2], [9] προτείνεται ένα εύρος τιμών $5 \leq m \leq 40$. Σημειώνουμε ότι για την προσαθεροποίηση χρησιμοποιούμε

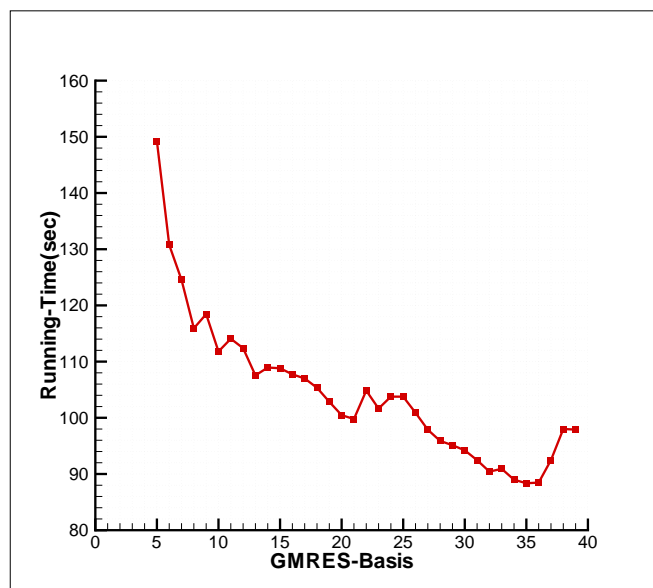
τη μέθοδο Jacobi και συμβολίζουμε εφεξής PGMRES(Jacobi), όπου στην παρένθεση θα σημειώνεται η εκάστοτε μέθοδος προσαθεροποίησης. Θεωρούμε συμπιεστή, ατριβή ροή γύρω από μεμονωμένη αεροτομή σε υπολογιστικά πλέγματα περίπου 5000, 10000 και 15000 κόμβων. Επιλέγουμε ως κριτήριο σύγκλισης των τεσσάρων συζυγών εξισώσεων, συνέχειας, ορμής κατά x και y , ενέργειας, το μέγιστο δεκαδικό λογάριθμος υπόλοιπου αυτών που επιβάλλουμε να είναι μικρότερος του -12.00 , δηλαδή $\max(\text{LOGERR}) \leq -12.00$. Τα αποτελέσματα των χρόνου σύγκλισης ως προς τη βάση m ακολουθούν στα διαγράμματα 3.5, 3.6 και 3.7.



Σχήμα 3.5: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση της βάση m . Υπολογιστικό πλέγμα 5000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$



Σχήμα 3.6: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση της βάση m . Υπολογιστικό πλέγμα 10000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$



Σχήμα 3.7: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση της βάσης m . Υπολογιστικό πλέγμα 15000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -12.00$

Από τα σχήματα 3.5, 3.6 και 3.7 μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η βάση που αποδίδει καλύτερα, από τη πλευρά του υπολογιστικού χρόνου, βρίσκεται κοντά στην τιμή 35. Για το λόγο αυτό στις εφαρμογές που παρουσιάζονται παρακάτω χρησιμοποιούμε την τιμή $m = 35$. Όμως, για να υπάρχει σύγκριση, χρησιμοποιείται επιπλέον μία μικρή βάση, επιλέγουμε $m = 15$, και μία κοντά στην βέλτιστη περιοχή, επιλέγουμε $m = 30$. Για την περιοχή τιμών βάσης μεγαλύτερων του 40 δεν θα επιμείνουμε αφού η σύγκλιση του κώδικα καθυστερεί χαρακτηριστικά.

Επιπλέον των παραπάνω, σημειώνουμε (με βάση τις εφαρμογές που πραγματοποιήθηκαν) ότι όσο μεγαλύτερη είναι η επιλεγείσα τιμή m της διανυσματικής βάσης τόσο μεγαλύτερη η μεταβολή του υπολοίπου ανάμεσα σε δύο διαδοχικές επαναλήψεις PGMRES. Ωστόσο, καθώς μεγαλώνει η βάση μεγαλώνει και ο χρόνος υπολογισμού αυτής άρα και ο συνολικός χρόνος σύγκλισης.

3.3.2 Επιλογή των Εσωτερικών Επαναλήψεων Προσταθεροποίησης Jacobi

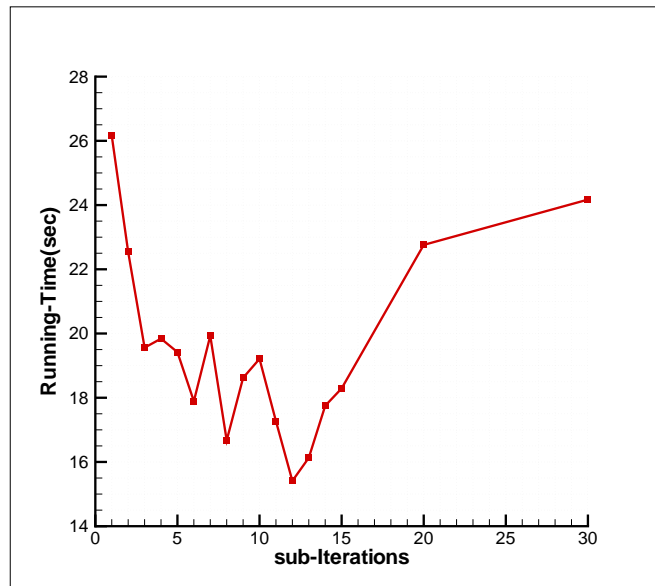
Θεωρούμε ως μέθοδο προσταθεροποίησης, δηλαδή ως μέθοδο επίλυσης των συστημάτων

$$D_M \vec{r}_{0pre} + \sum_{nei=1}^{neimax} Z m_{M,nei} \vec{r}_{0pre,nei} = \vec{r}_{0nopre} \quad (3.25)$$

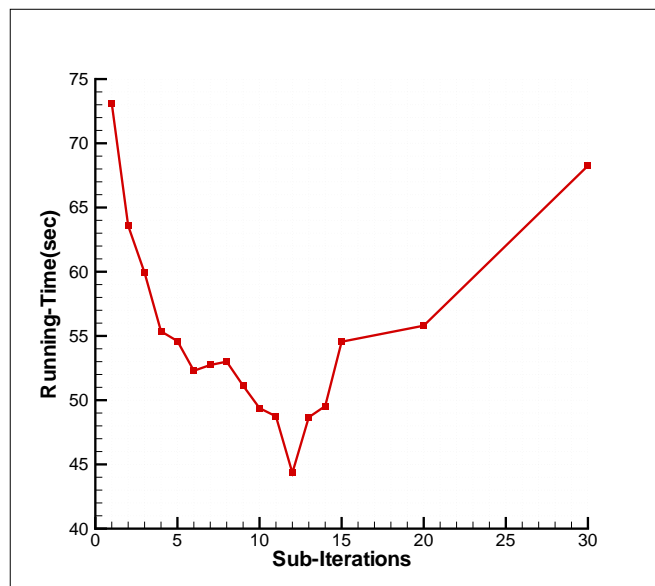
$$D_M \vec{w}_j + \sum_{nei=1}^{neimax} Z m_{M,nei} \vec{w}_{j,nei} = A \vec{v}_j \quad (3.26)$$

τη μέθοδο Jacobi, δηλαδή ο επιλύτης των συζυγών εξισώσεων είναι η PGMRES(Jacobi), όπου \vec{r}_{0nopre} το υπόλοιπο πριν την προσταθεροποίηση και \vec{r}_{0pre} το προσταθεροποιημένο υπόλοιπο. Αντίστοιχα, το γινόμενο $A \vec{v}_j$ είναι πριν την προσταθεροποίηση και \vec{w}_j το προσταθεροποιημένο διάνυσμα. Επιπλέον, τα μητρώα D_M και Z_M είναι το μητρώο των διαγωνίων στοιχείων και το μητρώο των γειτόνων που προκύπτουν από το μητρώο προσταθεροποίησης M . Στόχος μας είναι η επιλογή τόσων επαναλήψεων προσταθεροποίησης n_{pre} που να συγκλίνουν τα 3.25 και 3.26 σε όσο το δυνατόν μικρότερο υπολογιστικό χρόνο.

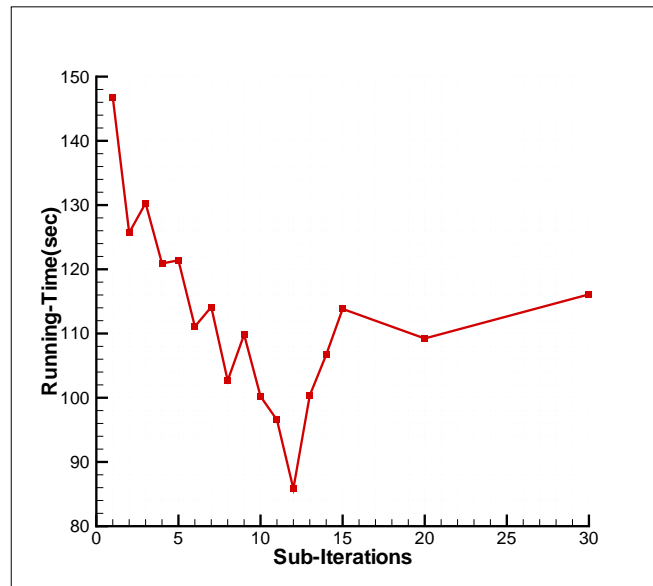
Όπως πριν, εξετάζουμε τον απαιτούμενο χρόνο σύγκλισης ως προς την τιμή των επαναλήψεων n_{pre} . Θεωρούμε συμπιεστή, ατριβή ροή γύρω από μεμονωμένη αεροτομή σε υπολογιστικά πλέγματα 5000, 10000 και 15000 κόμβων. Επιλέγουμε ως κριτήριο σύγκλισης των τεσσάρων συζυγών εξισώσεων, συνέχειας, ορμής κατά x και y , ενέργειας, το μέγιστο υπόλοιπο αυτών να είναι μικρότερο του 10^{-12} , δηλαδή $max(LOGERR) \leq -12.00$. Τα αποτελέσματα των χρόνων σύγκλισης ως προς n_{pre} ακολουθούν στα διαγράμματα 3.8, 3.9 και 3.10.



Σχήμα 3.8: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση των επαναλήψεις προσαθεροποίησης n_{pre} . Υπολογιστικό πλέγμα 5000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$



Σχήμα 3.9: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση των επαναλήψεων προσαθεροποίησης n_{pre} . Υπολογιστικό πλέγμα 10000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$



Σχήμα 3.10: Χρόνος σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) ως συνάρτηση των επαναλήψεων προσαθεροποίησης n_{pre} . Υπολογιστικό πλέγμα 15000 κόμβων, κριτήριο σύγκλισης $max (LOGERR) \leq -12.00$

Διαπιστώσαμε ότι ο αριθμός επαναλήψεων του προσαθεροποιητή Jacobi που επιφέρει την ταχύτερη σύγκλιση είναι περίπου 12. Για το λόγο αυτό στις εφαρμογές που παρουσιάζονται παρακάτω χρησιμοποιούμε την τιμή $n_{pre} = 12$, ενώ για λόγους πληρότητας, παρουσιάζονται αποτελέσματα για μια μικρότερη βάση, επιλέγουμε $n_{pre} = 8$.

Η μέθοδος PGMRES έδειξε ότι έχει την ίδια συμπεριφορά όσον αφορά τον αριθμό των επαναλήψεων προσαθεροποίησης n_{pre} με την εξάρτηση της από τη βάση m . Έτσι μεγάλη τιμή n_{pre} είχε ως αποτέλεσμα μεγαλύτερη μεταβολή υπολοίπου σε δύο διαδοχικές επαναλήψεις ενώ ταυτόχρονα αύξανε το υπολογιστικό κόστος. Η αποδοτικότερη τιμή είναι στην περιοχή του $n_{pre} = 12$.

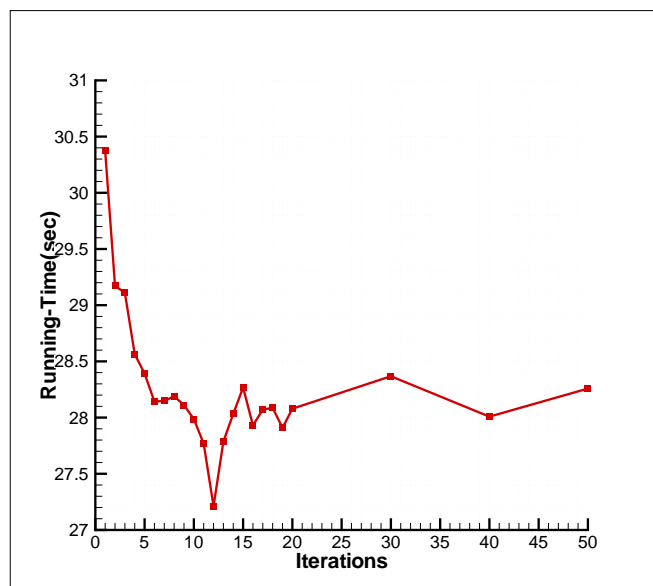
3.4 Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Jacobi) με τη Μέθοδο Jacobi

Στην παράγραφο αυτή γίνεται σύγκριση του χρόνου σύγκλισης της PGMRES(Jacobi) και της μεθόδου Jacobi στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων με στόχο τη δεδομένη κατανομή πίεσης στο περίγραμμα μεμονωμένης αεροτομής. Σκοπός είναι το να ποσοτικοποιήσουμε το πόσο γρηγορότερη είναι η πρώτη. Οι συγκρίσεις γίνονται σε μη δομημένα πλέγματα (περίπου) 5000, 10000 και 15000 για ατριβή ροή, ενώ

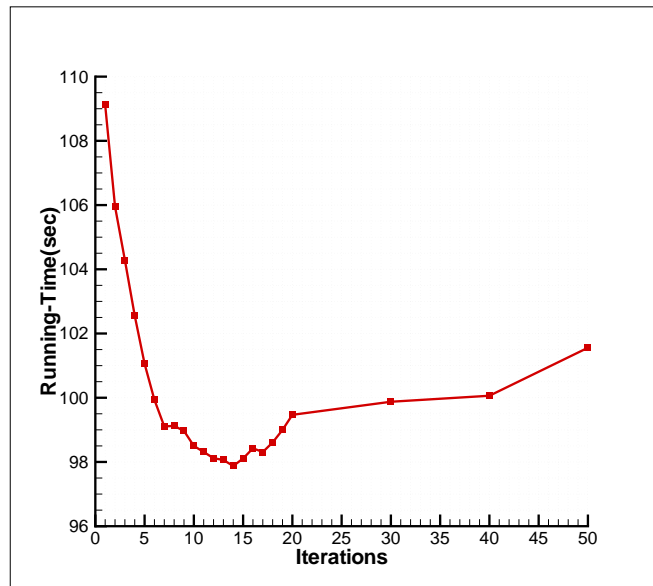
ακολουθούν συγκρίσεις σε στρωτή ροή, τυρβώδη ροή και, τέλος, σε μία διδιάστατη περύγωση στροβιλομηχανής όπου επιπλέον συνθήκη είναι αυτή της περιοδικότητας.

3.4.1 Επιλογή Αριθμού Επαναλήψεων της μεθόδου Jacobi

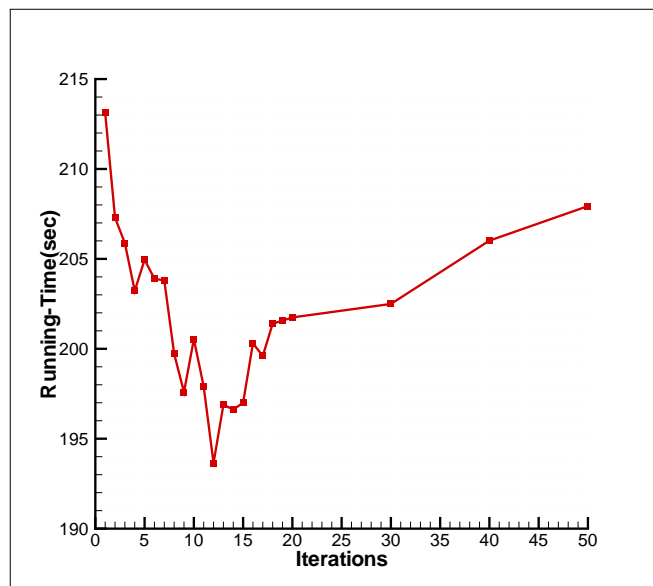
Στα σχήματα 3.11, 3.12, 3.13 παρουσιάζεται ο απαιτούμενος χρόνος σύγκλισης, όταν το **αρχικό γραμμικό σύστημα 3.15 επιλύεται με τη μέθοδο Jacobi**, σε πλέγματα περίπου 5000, 10000 και 15000 κόμβων. Όπως φαίνεται ο αποδοτικότερος αριθμός επαναλήψεων της Jacobi είναι $n = 12$ (όπως και ο αριθμός εσωτερικών επαναλήψεων όταν η Jacobi χρησιμοποιείται για προσταθεροποίηση της GMRES).



Σχήμα 3.11: Χρόνος σύγκλισης της μεθόδου Jacobi σε συνάρτηση με τον αριθμό επαναλήψεων n . Υπολογιστικό πλέγμα 5000, κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -12.00$



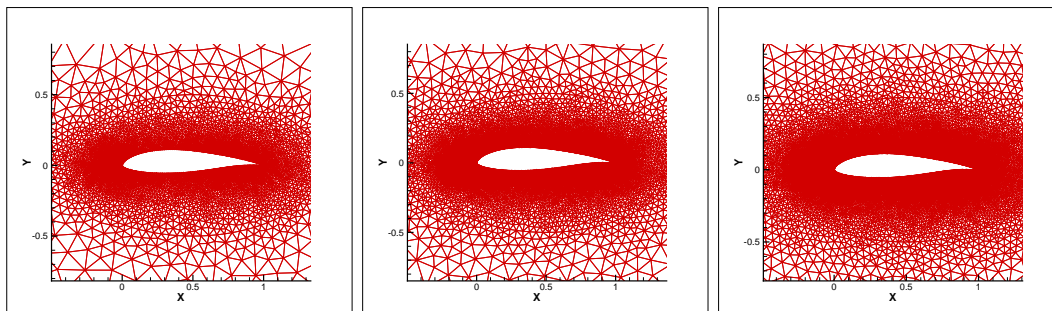
Σχήμα 3.12: Χρόνος σύγκλισης της μεθόδου Jacobi σε συνάρτηση με τον αριθμό επαναλήψεων n . Υπολογιστικό πλέγμα 10000, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$



Σχήμα 3.13: Χρόνος σύγκλισης της μεθόδου Jacobi σε συνάρτηση με τον αριθμό επαναλήψεων n . Υπολογιστικό πλέγμα 5000, κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$

3.4.2 Αντίστροφος Σχεδιασμός Μεμονωμένης Αεροτομής: Α-τριβής Ροή

Τμήματα των πλεγμάτων 5000, 10000, 15000 κόμβων ακολουθούν στο σχήμα 3.14.



Σχήμα 3.14: Υπολογιστικά πλέγματα 5000, 10000 και 15000 κόμβων γύρω από μεμονωμένη αεροτομή

Σε αυτά τα σχήματα έγινε σύγκριση της επίλυσης των συζυγών εξισώσεων με τη μέθοδο PGMRES(Jacobi) και με τη μέθοδο Jacobi. Τα αριθμητικά αποτελέσματα ακολουθούν στους παρακάτω πίνακες.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	28.7	-12.12	18.2	-13.63
35	12	28.7	-12.12	14.9	-12.73
15	12	28.7	-12.12	19.2	-13.57
30	8	28.9	-12.11	19.3	-14.75
35	8	28.9	-12.11	17.1	-13.58
15	8	28.9	-12.11	16.9	-12.03

Πίνακας 3.1: Υπολογιστικό Πλέγμα 5000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -12.00$

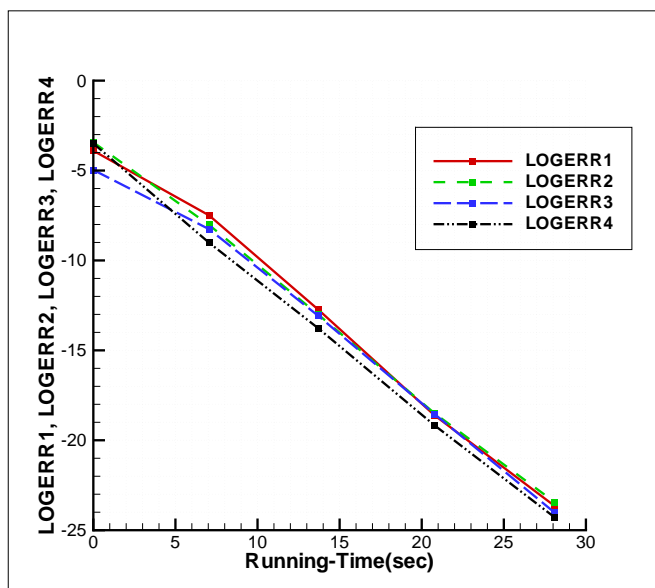
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	65.2	-21.00	29.8	-22.32
35	12	65.2	-21.00	28.1	-22.32
15	12	65.2	-21.00	35.2	-22.39
30	8	67.2	-21.06	28.9	-21.23
35	8	67.2	-21.06	29.5	-23.44
15	8	67.2	-21.06	34.3	-21.10

Πίνακας 3.2: Υπολογιστικό Πλέγμα 5000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -21.00$

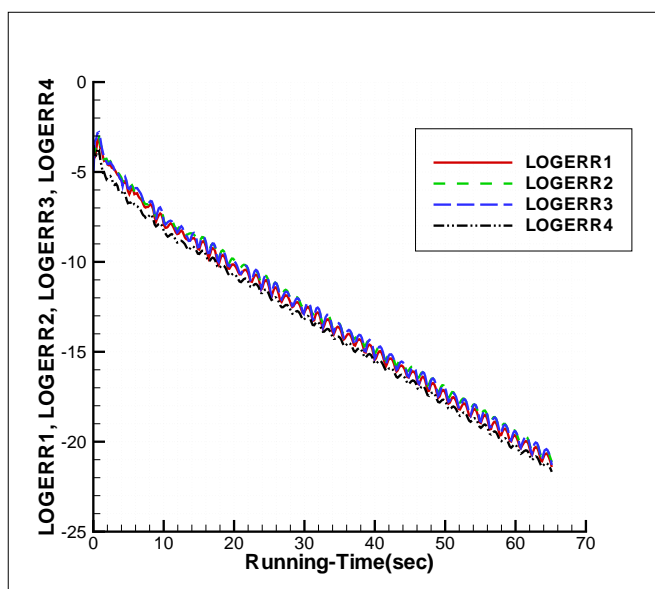
Από τους πίνακες 3.1 και 3.2 συμπεραίνουμε ότι ο αποδοτικότερος συνδυασμός διανυσματικής βάσης και επαναλήψεων προσταθεροποίησης Jacobi είναι $m = 35$ και $n_{pre} = 12$, όπως αναμέναμε βάση της πρώτης ενότητας του παρόντος κεφαλαίου, ενώ ο χρόνος σύγκλισης της Jacobi παρουσιάζει μικρή μεταβολή ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων n (που στους πίνακες αναφέρεται ως n_{pre}). Βέβαια αυτή η παρατήρηση χάνει την ισχύ της όσο μεγαλώνει το υπολογιστικό πλέγμα. Επιλέον η PGMRES(Jacobi), σε σύγκριση με την Jacobi (όταν αυτή χρησιμοποιείται ως επιλύτης του προβλήματος και όχι ως προσταθεροποιητής), παρουσιάζει επιτάχυνση S (Speedup) της επίλυσης ίση με $S = 1.93$, για κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -12.00$, και $S = 2.32$, για κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -21.00$. Ως S ορίζουμε τη ποσότητα

$$S = \frac{RT_{Jacobi}}{RT_{PGMRES}}$$

όπου RT_{Jacobi} και RT_{PGMRES} οι χρόνοι σύγκλισης των μεθόδων Jacobi και PGMRES αντίστοιχα. Σε διαφορετική χρήση του S αυτό θα ορίζεται σαφώς. Σημειώνουμε ότι η επιτάχυνση S παρουσιάζεται για τις πιο γρήγορες επιλύσεις τόσο για την PGMRES όσο και για τη Jacobi. Ακολουθεί ο σχεδιασμός της σύγκλισης του υπολοίπου για κάθε μία από τις τέσσερις εξισώσεις του συζυγούς πεδίου για τις ταχύτερες επιλύσεις με PGMRES(Jacobi) και Jacobi. Στα σχήματα 3.15 και 3.16 βλέπουμε την πορεία σύγκλισης για τις δύο μεθόδους επίλυσης. Εύκολα παρατηρούμε ότι η PGMRES έχει καθολικά πιο σταθερή (χωρίς ταλαντώσεις στο $LOGERR$) σύγκλιση έναντι της Jacobi.



Σχήμα 3.15: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, υποεπαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$



Σχήμα 3.16: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Ατριβής ροή, πλέγμα 5000 κόμβων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$

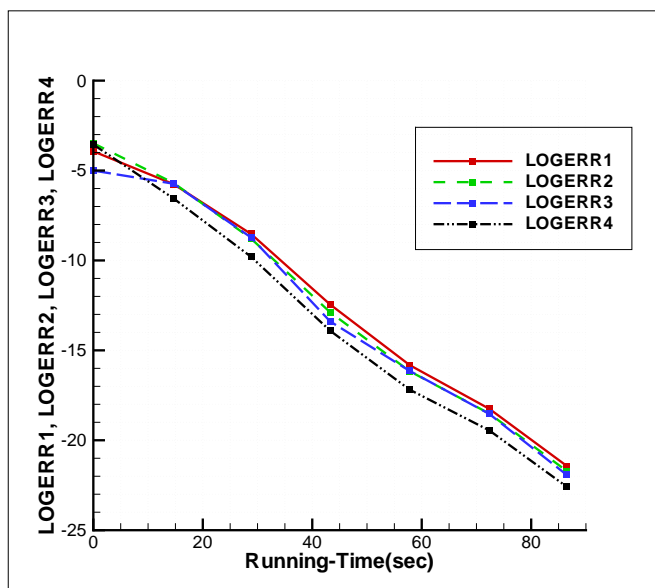
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	98.6	-12.15	47.9	-12.35
35	12	98.6	-12.15	43.2	-12.44
15	12	98.6	-12.15	55.4	-12.51
30	8	102.3	-12.10	57.8	-13.21
35	8	102.3	-12.10	59.0	-14.16
15	8	102.3	-12.10	54.7	-12.13

Πίνακας 3.3: Υπολογιστικό Πλέγμα 10000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -12.00$

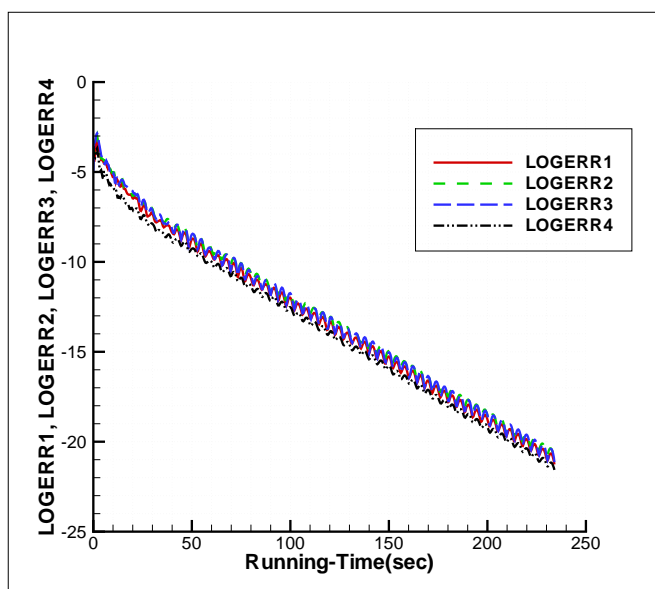
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	234.0	-21.13	95.9	-21.30
35	12	234.0	-21.13	86.5	-21.43
15	12	234.0	-21.13	99.0	-21.33
30	8	248.5	-21.01	93.8	-21.12
35	8	248.5	-21.01	93.8	-21.12
15	8	248.5	-21.01	122.9	-21.14

Πίνακας 3.4: Υπολογιστικό Πλέγμα 10000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -21.00$

Στους πίνακες 3.3 και 3.4 ο αποδοτικότερος συνδυασμός διανυσματικής βάσης και επαναλήψεων προσταθεροποίησης είναι $m = 35$ και $n_{pre} = 12$. Επιπλέον, η PGMRES(Jacobi), σε σύγκριση με την Jacobi, παρουσιάζει επιτάχυνση (Speedup) της επίλυσης ίση με $S = 2.28$, για κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -12.00$, και $S = 2.70$, για κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -21.00$. Η πορεία σύγκλισης παρουσιάζεται στα σχήματα 3.17 και 3.18.



Σχήμα 3.17: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, υποεπαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$



Σχήμα 3.18: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$

Όπως και πριν, τα σχήματα 3.17 και 3.18 επιβεβαιώνουν την υπεροχή της PGMRES έναντι της Jacobi.

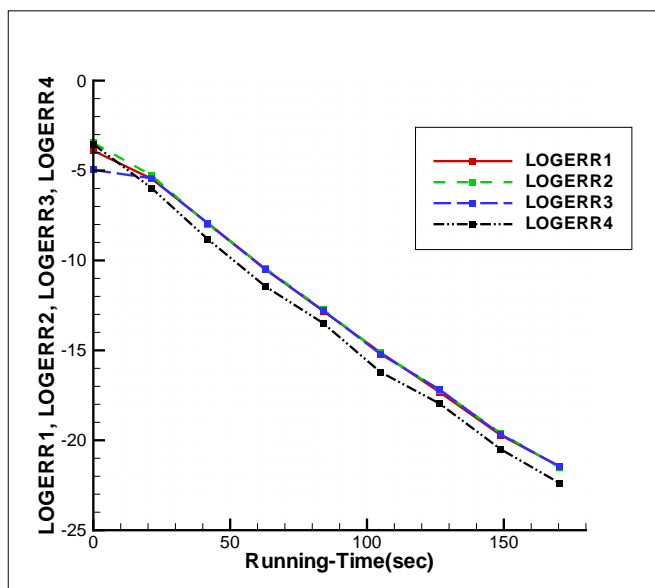
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max (LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max (LOGERR)$
30	12	196.9	-12.02	89.2	-12.59
35	12	196.9	-12.02	86.7	-12.74
15	12	196.9	-12.02	102.7	-12.66
30	8	198.3	-12.01	98.4	-12.92
35	8	198.3	-12.01	103.1	-13.34
15	8	198.3	-12.01	101.7	-12.31

Πίνακας 3.5: Υπολογιστικό Πλέγμα 15000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max (LOGERR) \leq -12.00$

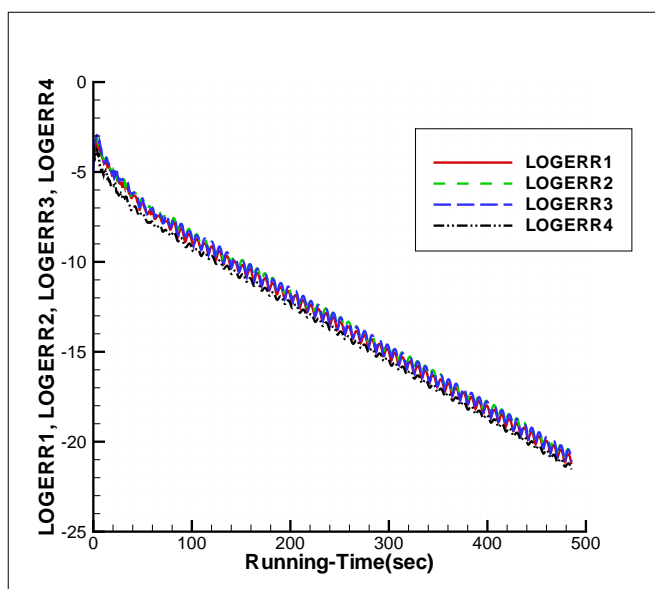
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max (LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max (LOGERR)$
30	12	485.3	-21.00	179.3	-21.62
35	12	485.3	-21.00	170.4	-21.46
15	12	485.3	-21.00	204.6	-21.26
30	8	489.9	-21.00	183.0	-21.44
35	8	489.9	-21.00	190.4	-22.59
15	8	489.9	-21.00	195.7	-21.29

Πίνακας 3.6: Υπολογιστικό Πλέγμα 15000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max (LOGERR) \leq -21.00$

Οι πίνακες 3.5 και 3.6 δείχνουν ότι και στην περίπτωση πλέγματος 15000 κόμβων ο συνδυασμός $m = 35$, $n_{pre} = 12$ λειτουργεί αποδοτικά. Επίσης, η επιτάχυνση της επίλυσης είναι ίση με $S = 2.27$, για κριτήριο σύγκλισης $max (LOGERR) \leq -12.00$, και $S = 2.85$, για κριτήριο σύγκλισης $max (LOGERR) \leq -21.00$. Επιπλέον η PGMRES(Jacobi) συγκλίνει για ακόμη μια φορά σε πολύ μικρό αριθμό επαναλήψεων, όπως φαίνεται από το σχήμα 3.19.



Σχήμα 3.19: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, υποεπαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$

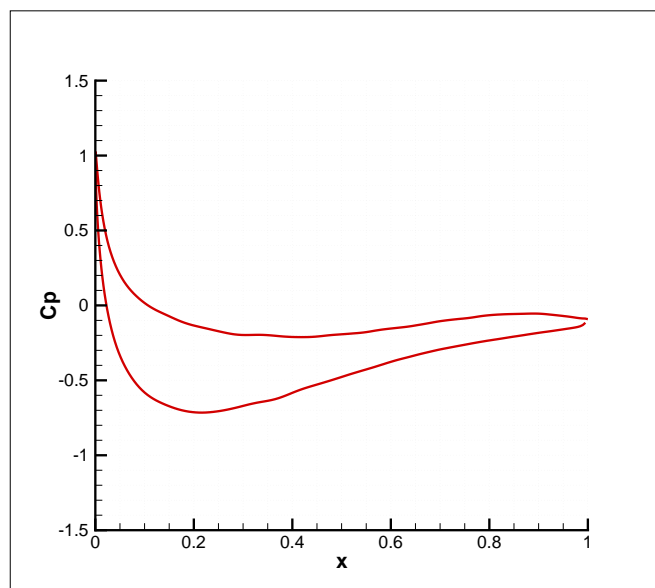


Σχήμα 3.20: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -21.00$

3.4.3 Αντίστροφος Σχεδιασμός Μεμονωμένης Αεροτομής: Στρωτή και Τυρβώδης Ροή

Στην προηγούμενη ενότητα παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα της σύγκρισης ανάμεσα στη μέθοδο PGMRES(Jacobi) και τη μέθοδο Jacobi για την επίλυση των συζυγών εξισώσεων κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό για ατριβή ροή και για υπολογιστικά πλέγματα 5000, 10000 και 15000. Βάσει αυτών συμπεράναμε την αποδοτική συμπεριφορά, από άποψη υπολογιστικού χρόνου σύγκλισης, της πρώτης για διανυσματική βάση $m=35$ και επαναλήψεις προσαθεροποίησης $n_{pre}=12$. Η επιτάχυνση σύγκλισης που επιτεύχθηκε ήταν περίπου $S=2.5$. Στην παρούσα ενότητα γίνεται έλεγχος για το αν η PGMRES συνεχίζει να υπερτερεί σε στρωτές και τυρβώδεις ροές στην ίδια με πριν γεωμετρία αεροτομής.

Για στρωτή ροή, πέρα των συνθηκών ροής που έχουν σημειωθεί ($M=0.2$, $\alpha=4^\circ$), έχουμε αριθμό Reynolds $Re=3000$. Σε υπολογιστικό πλέγμα 26000 κόμβων η εφαρμογή της μεθόδου PGMRES(Jacobi) στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων έδωσε τα παρακάτω αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στον πίνακα 3.7. Στόχος είναι η κατανομή του συντελεστή 3.21 Σημειώνουμε ότι εδώ για κριτήριο σύγκλισης ορίστηκε το $\max(Residual) \leq -8.00$ αφού το πυκνό πλέγμα σε συνδυασμό με τη φύση της ροής δεν επέτρεψαν την περαιτέρω σύγκλιση στο πλαίσιο 'λογικού' υπολογιστικού χρόνου. Επιπλέον υπογραμμίζεται ότι η μέθοδος Jacobi δεν κατάφερε να 'πιάσει' το κριτήριο αυτό ενώ η σύγκλιση της, ακόμη και για μικρότερο κριτήριο ήταν χαρακτηριστικά αργή, για αυτό και δεν παρουσιάζονται αποτελέσματα, πέραν του διαγράμματος της πορείας σύγκλισης. Μόνο μετά από προσεκτική επιλογή του εμπλεκόμενου χρονικού όρου, δηλαδή του ψευδοχρονικού όρου που σχετίζεται με τους κύκλους υπολογισμού, η μέθοδος παρουσίασε 'βελτίωση', αλλά όχι ικανοποιητική για σύγκριση σύγκλιση. Συμπεραίνουμε άρα την υπεροχή της μεθόδου PGMRES(Jacobi), αφού χωρίς να μας απασχολήσει ο χρονικός όρος των εξισώσεων επιτεύχθηκε σύγκλιση.

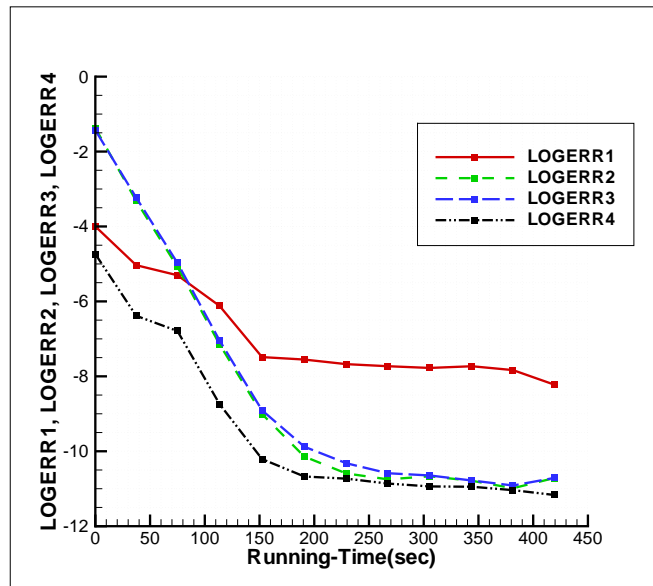


Σχήμα 3.21: Επιθυμητή κατανομή (στόχος) του συντελεστή πίεσης C_p στο περίγραμμα της αεροτομής

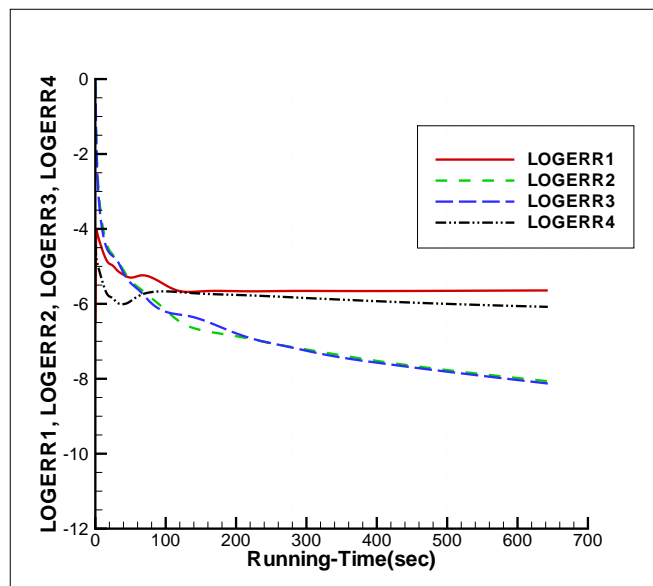
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	478.7	-8.02
35	12	419.1	-8.02
15	12	643.3	-8.00
30	8	2371.95	-8.00
35	8	2506.9	-8.08
15	8	Μη σύγκλιση	Μη σύγκλιση

Πίνακας 3.7: Υπολογιστικό Πλέγμα 26000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -8.00$

Όπως και στην περίπτωση της ατριβούς ροής ταχύτερη σύγκλιση της PGMRES(Jacobi) κατά την επίλυση των συζυγών εξισώσεων επιτυγχάνεται για διανυσματική βάση $m=35$ και $n_{pre}=12$ επαναλήψεις προσταθεροποίησης (περίπου). Η πορεία σύγκλισης της GMRES(Jacobi), καθώς και αυτή της μεθόδου Jacobi, φαίνονται στα σχήματα 3.22 και 3.23.



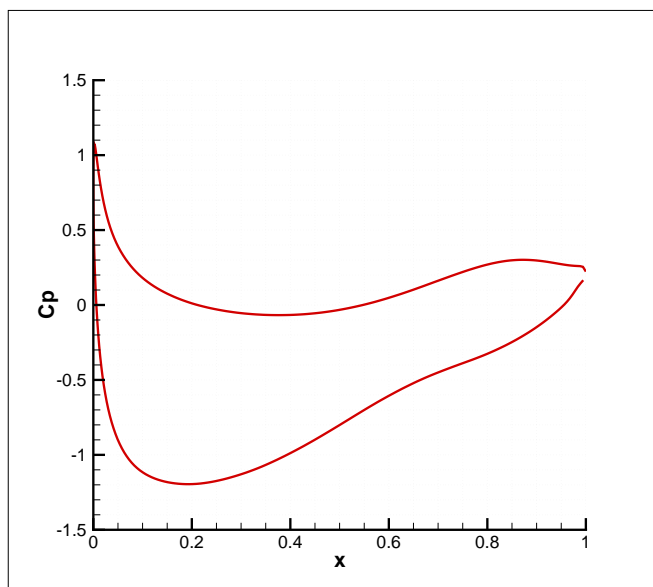
Σχήμα 3.22: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$



Σχήμα 3.23: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$

Για τυρβώδη ροή αριθμού Reynolds $Re = 10^6$ (και $M = 0.2$, $\alpha = 4^\circ$) σε υπολογιστικό πλέγμα 27000 κόμβων η εφαρμογή της μεθόδου PGMRES(Jacobi) στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων, κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό με στόχο δεδομένη κατανομή C_p γύρω από μεμονωμένη αεροτομή (σχήμα 3.24), έδωσε τους υπολογιστικούς χρόνους του πίνακα 3.8. Σημειώνουμε ότι εδώ, όπως και για τη στρωτή ροή, για κριτήριο σύγκλισης ορίσθηκε το $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.000$ αφού το πυκνό πλέγμα σε συνδυασμό με τη φύση της ροής δεν επέτρεψαν σύγκλιση σε μικρότερη τιμή υπολοίπου. Επιπλέον, όπως και στη στρωτή ροή, η μέθοδος Jacobi δεν κατάφερε να 'πιάσει' το κριτήριο.

Σημειώνουμε ότι

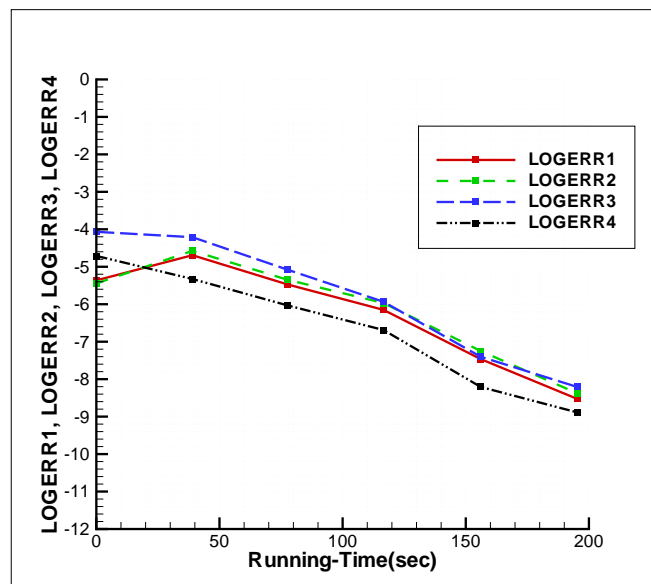


Σχήμα 3.24: Επιθυμητή κατανομή (στόχος) του συντελεστή πίεσης C_p στο περίγραμμα της αεροτομής

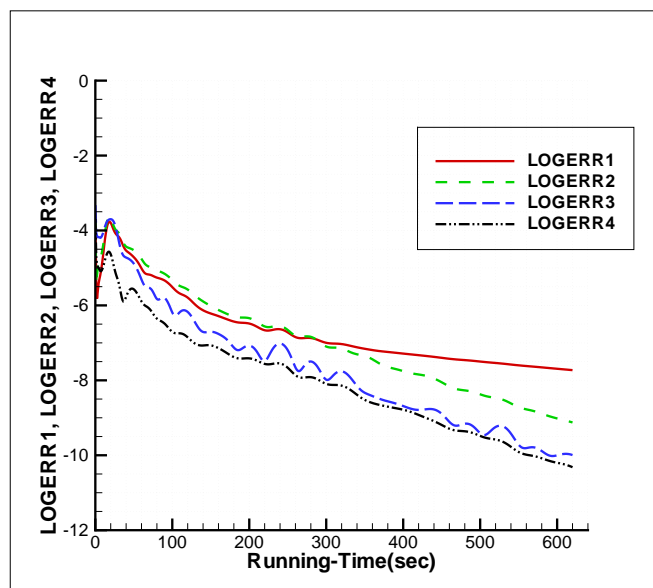
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	222.0	-8.68
35	12	195.2	-8.20
15	12	Μη σύγκλιση	Μη σύγκλιση
30	8	540.9	-8.46
35	8	270.8	-9.20
15	8	Μη σύγκλιση	Μη σύγκλιση

Πίνακας 3.8: Υπολογιστικό Πλέγμα 27000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -8.00$

Επισημαίνεται ότι όπου αναφέρεται περίπτωση μη σύγκλισης δεν είχαμε απόκλιση της μεθόδου αλλά αδυναμία να πιάσουμε την καθορισμένη τιμή $LOGERR$. Όπως και στις περιπτώσεις που προηγήθηκαν ο συνδυασμός $m = 35$, $n_{pre} = 12$ συγκλίνει σε συντομότερο υπολογιστικό χρόνο, ενώ η πορεία σύγκλισης αυτού παρουσιάζεται στο σχήμα 3.25.



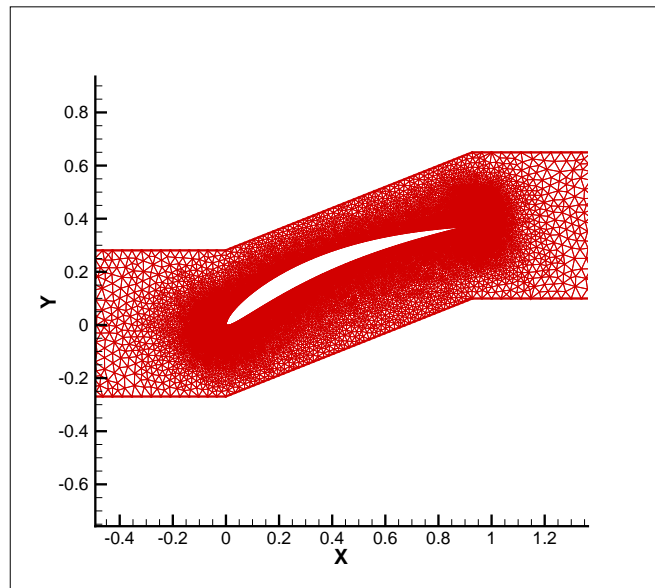
Σχήμα 3.25: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -8.00$



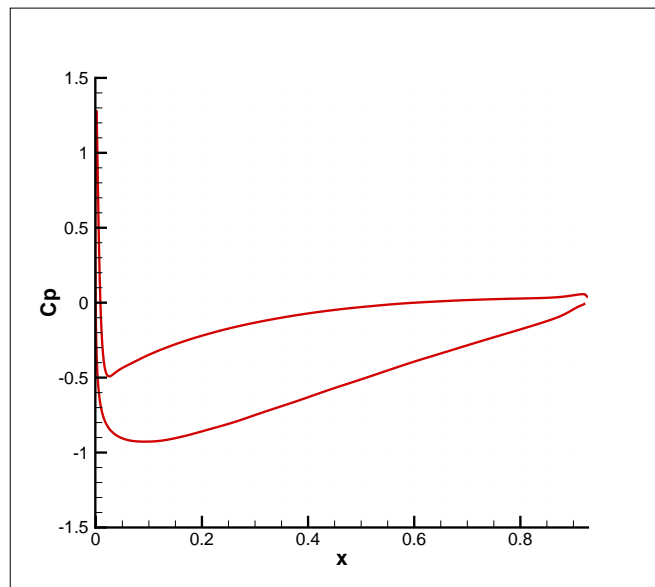
Σχήμα 3.26: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

3.4.4 Αντίστροφος Σχεδιασμός – Επίλυση Συζυγών Εξισώσεων με Στόχο Δεδομένη Πίεση σε Πτερύγωση Συμπιεστή

Στην παράγραφο αυτή εξετάζεται η συμπεριφορά της μεθόδου PGMRES(Jacobi) στην επίλυση των συζυγών εξισώσεων κατά τον αντίστροφο σχεδιασμό με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης σε πτερύγωση συμπιεστή γωνίας κλίσης 22° . Θεωρούμε τυρβώδη ροή αριθμού Reynolds $Re = 13 \times 10^6$, αριθμού Mach στην είσοδο $M = 0.15$ και γωνίας ειόδου $\alpha = 41^\circ$ ενώ το χρησιμοποιούμενο υπολογιστικό πλέγμα 3.27 είναι περίπου 29000 κόμβων. Η δεδομένη κατανομή πίεσης παρουσιάζεται μέσω του συντελεστή πίεσης στο σχήμα 3.28. Σημειώνουμε ότι στο σχήμα 3.28 ο άξονας του x βρίσκεται σε αντιστοιχία με αυτόν του σχήματος 3.27, αντιστοιχεί δηλαδή στην αξονική διεύθυνση του συμπιεστή (και όχι στην κατεύθυνση της χορδής).

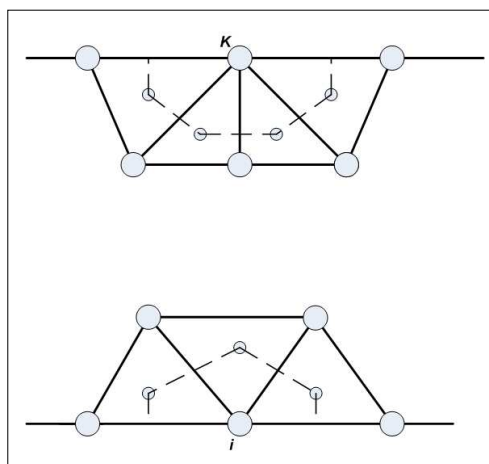


Σχήμα 3.27: Υπολογιστικό πλέγμα 29000 κόμβων σε διδιάστατη περύγωση συμπίεστη



Σχήμα 3.28: Επιθυμητή κατανομή (στόχος) του συντελεστή πίεσης C_p στο περίγραμμα της αεροτομής

Το υπολογιστικό χωρίο του σχήματος 3.27 έχει την τυπική μορφή χωρίου που χρησιμοποιείται σε περιοδικές ροές όπως αυτές που απαντώνται σε συμπιεστές και στροβίλους θερμικών στροβιλομηχανών. Η ιδιαιτερότητα τέτοιων χωρίων εντοπίζεται στους κόμβους του άνω και κάτω περιγράμματος στους οποίους η ροή είναι περιοδική. Σε αυτούς τους κόμβους η λύση των εξισώσεων πρέπει να είναι ίδια, εκφράζοντας έτσι την περιοδικότητα. Για αυτό, κατά την επίλυση σε αυτούς τους κόμβους, πέραν της συνεισφοράς των γειτονικών τους κόμβων πρέπει να λαμβάνεται υπόψη και αυτή των γειτονικών κόμβων του αντίστοιχου περιοδικού. Το παραπάνω γίνεται κατανοητό αν παρατηρήσουμε το σχήμα 3.29. Έστω ότι επιλύουμε στον περιοδικό κόμβο i , πέρα από τους γειτονικούς του κόμβους συνεισφέρουν οι γειτονικοί κόμβοι του k . Αντίστοιχα όταν επιλύσουμε στον k θα ληφθούν υπόψιν οι γειτονικοί κόμβοι του i . Με αυτόν τον τρόπο σχηματίζεται ο πεπερασμένος όγκος ισολογισμού, ο οποίος αποτελείται από τα κέντρα βάρους των τριγώνων. Υπογραμμίζεται ότι οι γειτονικοί κόμβοι του κόμβου επίλυσης που ανήκουν στο περιοδικό σύνορο προσμετρώνται μία μόνο φορά. Για την ακρίβεια προσμετρώνται δύο φορές αλλά κάθε φορά λαμβάνεται η μισή συνεισφορά τους.



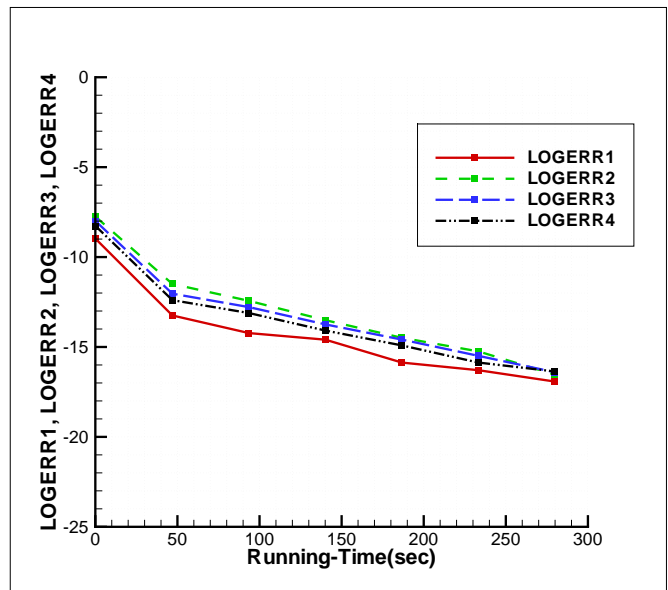
Σχήμα 3.29: Περιοδικοί κόμβοι υπολογιστικού πλέγματος

Η σύγκριση των μεθόδων επίλυσης PGMRES και Jacobi δίνει τον πίνακα 3.9.

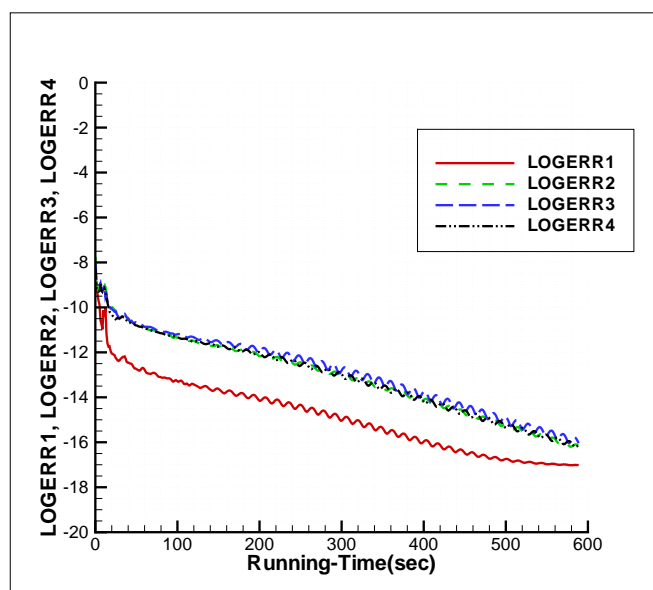
m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $max(LOGERR)$
30	12	588.6	-16.04	282.2	-16.00
35	12	588.6	-16.04	269.2	-16.36
15	12	588.6	-16.04	294.2	-16.08
30	8	627.9	-16.01	289.2	-16.16
35	8	627.9	-16.01	290.4	-16.50
15	8	627.9	-16.01	298.5	-16.12

Πίνακας 3.9: Υπολογιστικό Πλέγμα 29000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -16.00$

Όπως και στην περίπτωση της μεμονωμένης αεροτομής, έτσι και στη περύγωση συμπιεστή ο συνδυασμός $m = 35$, $n_{pre} = 12$ είναι ο αποδοτικότερος σε υπολογιστικό χρόνο. Σημειώνουμε ότι το κριτήριο τερματισμού ορίστηκε στο $max(LOGERR) = -16.00$. Η επιτάχυνση της επίλυσης με χρήση της μεθόδου PGMRES(Jacobi) είναι $S = 2.19$. Στα σχήματα 3.30 και 3.31 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης.



Σχήμα 3.30: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Jacobi), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -16.00$



Σχήμα 3.31: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -16.00$

3.5 Συγκριτική Ανάλυση Μεθόδων Προσταθεροποίησης

Στην ενότητα αυτή γίνεται σύγκριση μεθόδων επίλυσης των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από τη χρήση προσταθεροποίησης. Κριτήριο επιλογής της αποδοτικότερης μεθόδου είναι η ελαχιστοποίηση του απαιτούμενου, υπολογιστικού χρόνου σύγκλισης της μεθόδου PGMRES. Όπως σημειώθηκε και στο κεφάλαιο της θεωρητικής παρουσίασης της μεθόδου GMRES οι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν ήταν οι Jacobi, Runge-Kutta, Gauss-Seidel και Symmetric Gauss-Seidel. Έγινε δηλαδή, επίλυση με PGMRES(Jacobi), PGMRES(Runge-Kutta), PGMRES(Gauss-Seidel) και PGMRES(Symmetric Gauss-Seidel). Οι αριθμητικές εφαρμογές που ακολουθούν αφορούν την επίλυση των συζυγών εξισώσεων στον αντίστροφο σχεδιασμό μεμονωμένης αεροτομής με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης στο περίγραμμά της. Επιπλέον, θεωρήσαμε τυρβώδη ροή αριθμού Reynolds $Re = 10^6$, με αριθμό Mach της επί άπειρον ροής $M = 0.2$ και γωνία της επί άπειρον ροής $\alpha = 4^\circ$. Το υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε ήταν 27000 κόμβων.

3.5.1 Σύγκριση PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Runge–Kutta)

Στις εφαρμογές που εξετάστηκαν στο κεφάλαιο αυτό η χρήση της μεθόδου Runge–Kutta για την επίλυση των συστημάτων προσταθεροποίησης ήταν δαπανηρή από πλευράς υπολογιστικού χρόνου για αυτό και δεν παρουσιάζεται διεξοδικά. Χαρακτηριστικά για την επίλυση των συζυγών εξισώσεων, με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης, σε ατριβή ροή γύρω από μεμονωμένη αεροτομή σε υπολογιστικό, για κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -12.00$, ενώ (όπως έχει ήδη σημειωθεί) η PGMRES(Jacobi) συγκλίνει σε 14.9sec ενώ η PGMRES(Runge–Kutta) σε 151.4sec, η οποία αποτελεί μια σημαντικά μεγάλη διαφορά. Επιπλέον η εφαρμογή της στις συζυγείς εξισώσεις σε στρωτές και τυρβώδεις ροές είχε την ίδια συμπεριφορά με την ατριβή ροή, δηλαδή καθυστερούσε κατά περίπου μία τάξη μεγέθους τον υπολογιστικό χρόνο σύγκλισης σε σχέση με την εφαρμογή άλλων μεθόδων στην προσταθεροποίηση της PGMRES. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ενώ η Jacobi κάνει 12 επαναλήψεις στη Runge–Kutta έχουμε την εκάστοτε τάξη της μεθόδου, έτσι για την επιλεγείσα $4^{\text{η}}$ τάξη είχαμε 4 βήματα επίλυσης.

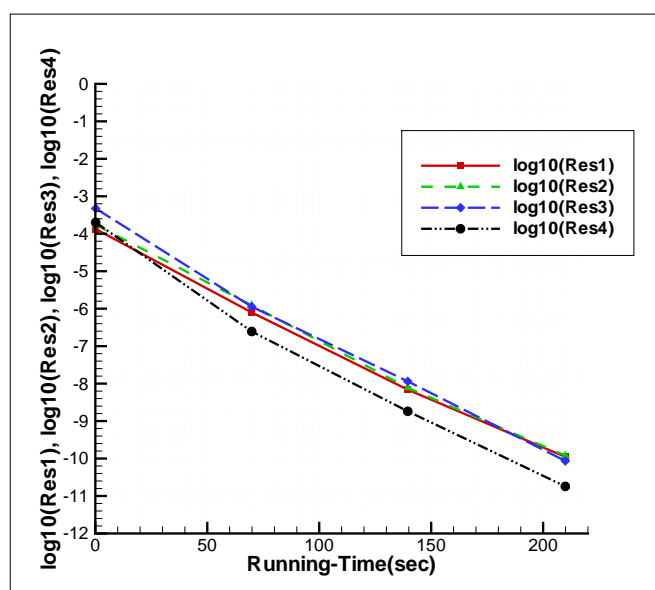
3.5.2 Σύγκριση PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Gauss–Seidel)

Τα αριθμητικά αποτελέσματα της επίλυσης των συζυγών εξισώσεων με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης γύρω από μεμονωμένη αεροτομή για τυρβώδη ροή με χρήση υπολογιστικού πλέγματος 27000 κόμβων, με την μέθοδο PGMRES(Jacobi) έχουν παρουσιασθεί σε προηγούμενη ενότητα. Τα αποτελέσματα της μεθόδου PGMRES(Gauss–Seidel) ακολουθούν στον πίνακα 3.10. Επομένως αναμένουμε να αποδίδει καλύτερα στην PGMRES. Επιπλέον η σύγκριση PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Gauss–Seidel) με Gauss–Seidel γίνεται για τον ίδιο αριθμό επαναλήψεων προσταθεροποίησης, δηλαδή για $n_{pre}^J = n_{pre}^{GS} = 12$ και $n_{pre}^J = n_{pre}^{GS} = 8$, ενώ παρουσιάζονται αποτελέσματα για τις ίδιες διανυσματικές βάσεις, $m = 30, 35, 15$.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος GMRES(Gauss–Seidel) (sec)	GMRES(Gauss–Seidel) $\max(\text{LOGERR})$
30	12	180.5	-8.52
35	12	209.8	-9.92
15	12	343.8	-8.69
30	8	185.9	-8.43
35	8	178.0	-8.76
15	8	365.7	-8.16

Πίνακας 3.10: Υπολογιστικό Πλέγμα 27000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

Από τον πίνακα 3.10 ο συνδυασμός $m = 35$, $n_{pre} = 12$ δείχνει να είναι ο αποδοτικότερος χωρίς όμως να είναι απόλυτα σαφές αφού αν και ο υπολογιστικός χρόνος είναι μεγαλύτερος από αυτόν άλλων συνδυασμών η σύγκλιση που επιτυγχάνεται είναι επίσης καλύτερη. Για σαφή συμπεράσματα θεωρούμε γραμμική μεταβολή ανάμεσα στα δύο σημεία του σχήματος 3.32, το οποίο δείχνει την πορεία σύγκλισης. Γραμμική παρεμβολή θεωρούμε στην τρίτη εξίσωση η οποία παρουσιάζει τη μικρότερη σύγκλιση στην περιοχή του κριτηρίου σύγκλισης.



Σχήμα 3.32: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Gauss-Seidel), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

Θεωρώντας γραμμική μεταβολή ο χρόνος σύγκλισης για κριτήριο $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$ είναι 142.5 sec . Επομένως, η χρήση της μεθόδου PGMRES(Gauss-Seidel), αντί για τη μέθοδο PGMRES(Jacobi) επιφέρει επιπλέον επιτάχυνση της επίλυσης με τη PGMRES ίση με $S = 1.36$. Εδώ ορίζουμε ως S τη ποσότητα

$$S = \frac{RT_{\text{PGMRES}(\text{Jacobi})}}{RT_{\text{PGMRES}(\text{Gauss-Seidel})}}$$

όπου $RT_{\text{PGMRES}(\text{Jacobi})}$ και $RT_{\text{PGMRES}(\text{Gauss-Seidel})}$ οι χρόνοι σύγκλισης των μεθόδων PGMRES(Jacobi) και PGMRES(Gauss-Seidel) αντίστοιχα.

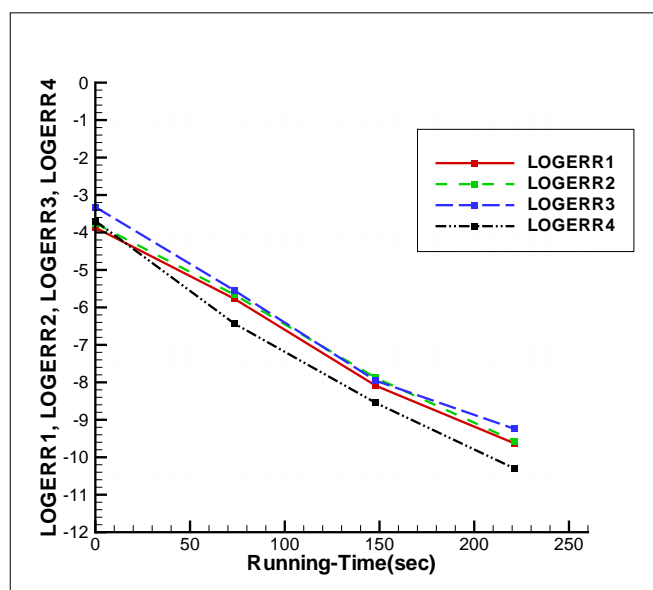
3.5.3 Σύγκριση PGMRES(Gauss-Seidel) και PGMRES(Symmetric Gauss-Seidel)

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε ότι στη PGMRES η χρήση της Gauss-Seidel αντί της Jacobi έχει ως αποτέλεσμα την επιτάχυνση της επίλυσης 1.38 φορές. Μια παραλλαγή της Gauss-Seidel αποτελεί η Symmetric Gauss-Seidel, η οποία όπως σημειώθηκε κατά τη θεωρητική ανάλυση κάνει σε ένα κύκλο επαναλήψεων διπλή σάρωση του υπολογιστικού πεδίου σε σχέση με τη συνήθη Gauss-Seidel (άρα και με τη Jacobi). Τα αριθμητικά αποτελέσματα της PGMRES(Symmetric Gauss-Seidel) βρίσκονται στον πίνακα 3.12. Υπογραμμίζεται ότι λόγω της διπλής σάρωσης οι επαναλήψεις προσαθεροποίησης είναι οι μισές των Gauss-Seidel και Jacobi. Δηλαδή, εφαρμόζουμε $n_{pre}^{SGS} = 6$ και $n_{pre}^{GS} = 4$.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος GMRES(Symmetric GS) (sec)	GMRES(Symmetric GS) $\max(\text{LOGERR})$
30	12	181.0	-8.43
35	12	221.4	-9.24
15	12	248.8	-8.70
30	8	211.4	-8.43
35	8	232.1	-8.98
15	8	463.3	-8.09

Πίνακας 3.11: Υπολογιστικό Πλέγμα 27000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

Όπως και πριν για σαφή συμπεράσματα θεωρούμε γραμμική μεταβολή ανάμεσα στα δύο σημεία του σχήματος 3.33, το οποίο δείχνει την πορεία σύγκλισης. Ζητούμενος είναι ο χρόνος σύγκλισης σε υπόλοιπο -8.2076 . Γραμμική παρεμβολή θεωρούμε στην δεύτερη εξίσωση η οποία παρουσιάζει τη μικρότερη σύγκλιση στην περιοχή του κριτηρίου σύγκλισης.



Σχήμα 3.33: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Symmetric Gauss–Seidel), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 6$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

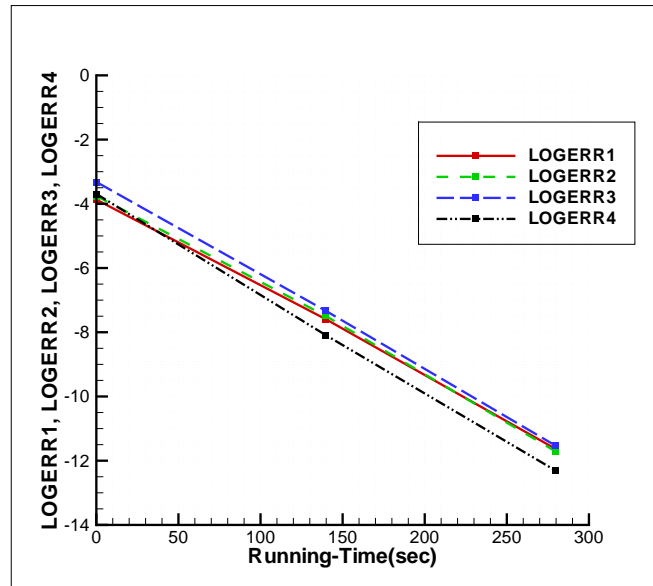
Θεωρώντας γραμμική μεταβολή ο χρόνος σύγκλισης για κριτήριο $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$ είναι 150.19sec . Επομένως, η χρήση της μεθόδου Symmetric Gauss–Seidel, αντί για τη μέθοδο Gauss–Seidel, για προσταθεροποίηση έχει της ίδιας τάξης υπολογιστικό χρόνο σύγκλισης. Ωστόσο αν διπλασιάσουμε τις επαναλήψεις αυτής η Symmetric Gauss–Seidel αποδίδει καλύτερα, γεγονός το οποίο δεν ισχύει για τις Gauss–Seidel και Jacobi. Τα αποτελέσματα για $n_{pre}^{SGS} = 12$ και $n_{pre}^{SGS} = 8$ ακολουθούν στο πίνακα.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος GMRES(Jacobi) (sec)	GMRES(Jacobi) $\max(\text{LOGERR})$
30	12	218.2	-9.78
35	12	279.6	-11.53
15	12	220.9	-8.70
30	8	526.9	-8.80
35	8	516.2	-8.71
15	8	Μη σύγκλιση	Μη σύγκλιση

Πίνακας 3.12: Υπολογιστικό Πλέγμα 27000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

Για γραμμική μεταβολή μεταξύ των επαναλήψεων και κριτήριο σύγκλισης -8.00 από το σχήμα 3.12 ο χρόνος σύγκλισης είναι 160.9sec , δηλαδή λίγο πιο αργός από αυτόν με $n_{pre}^{SGS} = 6$. Το αξιοσημείωτο σε αυτήν την περίπτωση είναι η σύγκλιση σε

μεγαλύτερο υπολοίπο που δεν επιτύγχανε ούτε η Jacobi ούτε η Gauss-Seidel. Επομένως, αν και δεν κερδίζουμε σε υπολογιστικό χρόνο για μικρά κριτήρια σύγκλισης, στην περίπτωση που θέλουμε μεγαλύτερη ακρίβεια λύσης προτείνεται η χρήση της Symmetric Gauss-Seidel για προσταθεροποίηση της PGMRES.



Σχήμα 3.34: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Symmetric Gauss-Seidel), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -8.00$

Κεφάλαιο 4

Εφαρμογή της Μεθόδου GMRES στη Βελτιστοποίηση Μορφής Εναλλάκτη Θερμότητας

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται χρήση της μεθόδου PGMRES στη βελτιστοποίηση, μέσω της συζυγούς μεθόδου, της γεωμετρίας των σωληνώσεων θερμού ρευστού εναλλάκτη θερμότητας με στόχο την εύρεση της διατομής αυτών που ελαχιστοποιεί τις απώλειες ολικής πίεσης του ψυχρού ρευστού (της βασικής ροής) που διέρχεται στον από αυτόν ενώ μεγιστοποιεί τη μεταφορά θερμότητας ανάμεσα στα δύο ρεύματα [18]. Η προς βελτιστοποίηση διατομή των σωληνώσεων παραμετροποιείται μέσω πολυωνύμων Bezier-Bernstein με τις μεταβλητές σχεδιασμού να είναι οι συντεταγμένες των σημείων ελέγχου [12]. Η μέθοδος PGMRES χρησιμοποιήθηκε τόσο στον **υπολογισμό του πεδίου ροής**, στην επίλυση δηλαδή του συστήματος στο οποίο καταλήγουμε μετά την διακριτοποίηση των εξισώσεων Navier–Stokes για αυμπίεστο ρευστό το οποίο είναι **μη-γραμμικό** (και υπόκειται σε γραμμικοποίηση), στην εξίσωση μεταφοράς θερμότητας που είναι γραμμική, όσο και στην επίλυση του συστήματος συζυγών εξισώσεων που προκύπτει μέσω της συνεχούς συζυγούς μεθόδου που χρησιμοποιήθηκε εδώ. Επισημαίνεται ότι οι εξισώσεις της ορμής και ενέργειας και η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας είναι μη-συζευγμένες με τη λύση των πρώτων να αποτελεί είσοδο για την εύρεση της λύσης της δεύτερης (decoupled εξισώσεις).

Παρόλο που το σύστημα που προκύπτει από τις εξισώσεις Navier–Stokes είναι μη-γραμμικό και θα έπρεπε να εφαρμοσθεί η μέθοδος GMRES για μη-γραμμικά συστήματα, λόγω έλλειψης χρόνου κατά την παρούσα διπλωματική εργασία, για την υλοποίηση αυτής έγινε χρήση της GMRES για γραμμικά συστήματα ώστε να εκτιμηθεί η συμπεριφορά της σε τέτοια συστήματα. Επιπλέον, σε αντίθεση με τις

εφαρμογές του προηγούμενου κεφαλαίου, εφαρμόζουμε τη συνεχή συζυγή τεχνική, η οποία όμως όπως και η διακριτή οδηγεί σε γραμμικά συστήματα [12].

Ακόμη, η εφαρμογή περιορίστηκε σε σύγκριση της PGMRES και της Jacobi που χρησιμοποιούσε ο υπάρχων κώδικας στο ΕΣΘ/ΕΜΠ [4], [12]. Δεν έγινε περαιτέρω διερεύνηση σχετικά με τις παραμέτρους της PGMRES αλλά χρησιμοποιήθηκαν τα συμπεράσματα του αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομής με στόχο συγκεκριμένη κατανομή πίεσης, δηλαδή εφαρμόζουμε PGMRES(Gauss-Seidel) με $m = 35$ και $n_{pre} = 12$ και Jacobi με $n = 12$.

Σημειώνεται ότι οι υπολογιστικοί χρόνοι οι οποίοι παρουσιάζονται στο παρόν κεφάλαιο αντιστοιχούν σε διαφορετικό υπολογιστή από ότι στις εφαρμογές του κεφαλαίου 3. Ο υπολογιστής που χρησιμοποιήθηκε είχε χαρακτηριστικά 8GB μνήμη RAM, επεξεργαστή Intel Xeon 2.66GHz και λειτουργικό σύστημα Unix.

4.1 Οι Εξισώσεις της Ροής

Στο παρόν κεφάλαιο θεωρούμε διδιάστατη στρωτή ροή ασυμπίεστου, συνεκτικού ρευστού εντός εναλλάκτη θερμότητας. Η ροή αυτή μοντελοποιείται μέσω των διδιάστατων εξισώσεων Navier-Stokes για ασυμπίεστο ρευστό οι οποίες εκφράζουν τη διατήρηση της συνέχειας και της ορμής. Οι εξισώσεις αυτές σε συντηρητική μορφή γράφονται [13], [15]

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}^{inv}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}^{inv}}{\partial y} - \frac{\partial \vec{F}^{vis}}{\partial x} - \frac{\partial \vec{G}^{vis}}{\partial y} = \vec{0} \quad (4.1)$$

όπου $\vec{U} = \left(\frac{p}{\rho}, u, v \right)^T$ το διάνυσμα των μεταβλητών της ροής. Επιπλέον ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, u και v οι καρτεσιανές συνιστώσες της ταχύτητας κατά x και y . Με F και G συμβολίζονται τα διανύσματα της ροής στις δύο συνιστώσες, ενώ με inv οι μη-συνεκτικοί όροι και με vis οι συνεκτικοί. Τα παραπάνω διανύσματα ορίζονται ως ακολούθως

$$\vec{F}^{inv} = \begin{bmatrix} \beta u \\ \frac{p}{\rho} + u^2 \\ uv \end{bmatrix}, \vec{G}^{inv} = \begin{bmatrix} \beta v \\ uv \\ \frac{p}{\rho} + u^2 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

και

$$\vec{F}^{vis} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix}, \vec{G}^{inv} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

όπου με β συμβολίζουμε το συντελεστή της τεχνητής συμπίεσότητας του ρευστού, η οποία συνδέει την εξίσωση της συνέχειας με τις εξισώσεις ορμής. Η εισαγωγή του συντελεστή β ορίζει τη μέθοδο της ψευδοσυμπίεσότητας [13], [15], [12]. Έχει διαστάσεις τετραγώνου ταχύτητας και παριστά τη ψευδοταχύτητα του ήχου. Χωρίς την εισαγωγή του συντελεστή αυτού οι εξισώσεις είναι μη-συζευγμένες (decoupled), δηλαδή η επίλυση της κάθε μίας γίνεται ανεξάρτητα από την επίλυση της άλλης. Σημειώνεται επίσης, ότι παίζει σημαντικό ρόλο στη σύγκλιση και στην ευστάθεια της επίλυσης των εξισώσεων 4.1. Επίσης όπως το σύστημα των εξισώσεων του συμπίεστου ρευστού, έτσι και αυτό του ασυμπίεστου 4.1 είναι μη-γραμμικό και block. Στην περίπτωση αυτή, όμως, το σύστημα που επιλύεται σε κάθε κόμβο είναι 3×3 .

Επιπλέον, σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} είναι οι συνιστώσες του τανυστή των συνεκτικών τάσεων οι οποίες ορίζονται ως

$$\sigma_{xx} = 2\nu \frac{\partial u}{\partial x}, \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \sigma_{yy} = 2\nu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (4.4)$$

όπου ν η κινηματική συνεκτικότητα του ρευστού και ν_t η τυρβώδης συνεκτικότητα. Στην παρούσα εφαρμογή θεωρούμε στρωτή ροή άρα είναι $\nu_t = 0$.

Εναλλακτικά, χρησιμοποιώντας την τανυστική γραφή, οι εξισώσεις 4.1 μπορούν να γραφούν στην ακόλουθη μορφή

$$R_{U,i} = v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] = 0, i = 1, 2 \quad (4.5)$$

και

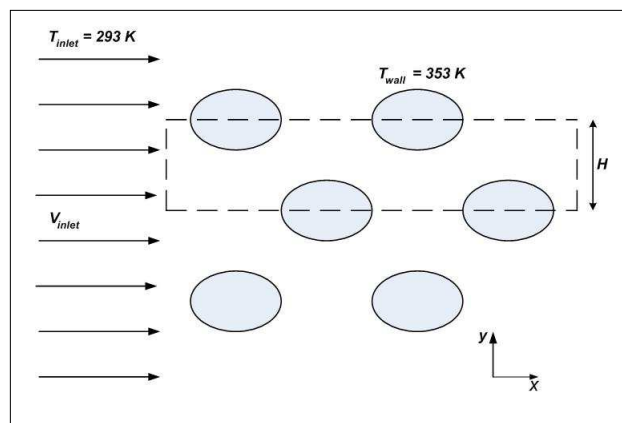
$$R_{U,3} = \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \quad (4.6)$$

όπου $v_1 = u$, $v_2 = v$, $x_1 = x$ και $x_2 = y$. Στην περίπτωση εμφάνισης επαναλαμβανόμενων δεικτών ακολουθείται η σύμβαση άθροισης του Einstein.

Όπως και στη περίπτωση του συμπίεστου ρευστού στο προηγούμενο κεφάλαιο, έτσι και στη παρούσα εφαρμογή στις εξισώσεις 4.1 έχουν παραλειφθεί οι όροι βαρύτητας, ενώ για το κλείσιμο αυτών θεωρούμε ισοτροπικό, νευτώνιο ρευστό. Ακόμη, θεωρούμε στρωτή ροή ρευστού οπότε δεν χρησιμοποιείται κάποιο μοντέλο τύρβης.

4.2 Περιγραφή του Προβλήματος Βελτιστοποίησης Εναλλάκτη Θερμότητας – Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων

Θεωρούμε διδιάστατο εναλλάκτη θερμότητας όπως αυτόν του σχήματος 4.1, [12] αυτός αποτελείται από δύο ρεύματα ρευστού ένα ψυχρό (κύρια ροή) και ένα θερμό (δευτερεύουσα ροή). Το θερμό ρευστό ρέει εντός σωληνώσεων ώστε να μεγιστοποιείται η επιφάνεια αλληλεπίδρασης θερμού και ψυχρού ρεύματος με αποτέλεσμα τη μεγαλύτερη εναλλαγή θερμότητας μεταξύ αυτών. Με αυτόν τον τρόπο επιτρέπεται πέραν της αυξημένης εναλλαγής θερμότητας, η βελτιστοποίηση του σχήματος των σωληνώσεων ώστε να έχουμε τις ελάχιστες απώλειες ολικής πίεσης. Η ροή στις σωληνώσεις δεν μας απασχολεί και θεωρούμε ότι τα τοιχώματα αυτών έχουν σταθερή θερμοκρασία ίση με $T_{wall} = 353K$. Στόχος είναι η εύρεση της γεωμετρίας της διατομής των σωληνώσεων που ελαχιστοποιεί την πτώση ολικής πίεσης ΔP_t του ρευστού της κύριας ροής ενώ ταυτόχρονα μεγιστοποιεί τη μεταφορά θερμότητας εντός του εναλλάκτη.



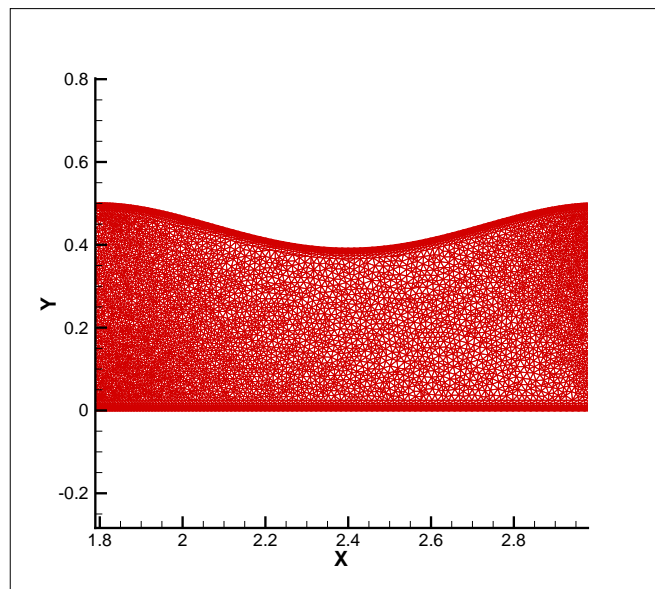
Σχήμα 4.1: Διδιάστατος Εναλλάκτης Θερμότητας

Για το ρεύμα ψυχρού ρευστού θεωρούμε θερμοκρασία εισόδου $T_{inlet} = 293K$, οριζόντια ταχύτητα εισόδου $u_{inlet} = 0.5m/s$ και μόνιμη στρωτή ροή αριθμού Reynolds $Re = 1000$ ενώ θεωρούμε έξοδο από τον εναλλάκτη σε ατμοσφαιρική πίεση. Επιπλέον η αριθμητική επίλυση του πεδίου και των συζυγών εξισώσεων περιορίζεται στο χώρο πάχους $H = 5mm$ που σημειώνεται στο σχήμα 4.2, αφού το πεδίο παρουσιάζει επαναληψιμότητα, και εκτείνεται αρκετά ανάντι και κατόντι των σωληνώσεων ώστε οι οριακές συνθήκες εισόδου και εξόδου να μην επηρεάζουν τη ροή του ψυχρού ρευστού ανάμεσά τους. Η επίλυση σε αυτό το χωρίο δίνει λύση που επαναλαμβάνεται

συμμετρικά σε όλον τον εναλλάκτη λόγω της συμμετρίας αυτού. Το πλέγμα που δημιουργούμε στο χωρίο είναι ένα μη-δομημένο πλέγμα τριγωνικών στοιχείων περίπου 40000 κόμβων και παρουσιάζεται στο σχήμα 4.2, ενώ μια λεπτομέρεια αυτού παρουσιάζεται στο 4.3.



Σχήμα 4.2: Υπολογιστικό πλέγμα 40000 κόμβων σε εναλλάκτη θερμότητας



Σχήμα 4.3: Λεπτομέρεια υπολογιστικού πλέγματος εναλλάκτη θερμότητας

Το πρόβλημα μεταφορά θερμότητας μέσω συναγωγής μεταξύ του ψυχρού ρεύματος και των τοιχωμάτων των σωλήνων μοντελοποιείται μέσω του νόμου Fourier [19]

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c_p u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (4.7)$$

ή

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (4.8)$$

ή ισοδύναμα

$$R_T = \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i T) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (4.9)$$

όπου ρ η πυκνότητα, c_p η θερμική αγωγιμότητα και k η ειδική θερμική αγωγιμότητα του ρευστού του ψυχρού ρεύματος. Ενώ α είναι η σταθερά θερμικής διάχυσης που ορίζεται μέσω της $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$. Η τιμή της σταθεράς αυτής για νερό (που θεωρήσαμε

ως ρευστό του ψυχρού ρεύματος) είναι $\alpha_{H_2O} = 0.139 \times 10^{-7} \frac{m^2}{sec}$, [19]. Η επίλυση της εξίσωσης της μεταφοράς θερμότητας ακολουθεί τον υπολογισμό του πεδίου ροής και γίνεται ανεξάρτητα από αυτόν. Αφού υπολογίσουμε το πεδίο ροής, οι υπολογισμένες συνιστώσες της ταχύτητας του ρευστού u_1 και u_2 χρησιμοποιούνται στην εξίσωση 4.9.

Για την επαυξημένη συνάρτηση στόχου έχουμε

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta \vec{b}} = \frac{\delta F}{\delta \vec{b}} + \int_{\Omega} q \frac{\partial R_{U,3}}{\partial \vec{b}} d\Omega + \int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_{U,i}}{\partial \vec{b}} d\Omega + \int_{\Omega} T_a \frac{\partial R_T}{\partial \vec{b}} d\Omega \quad (4.10)$$

όπου T_a είναι η συζυγής (adjoint) θερμοκρασία. Επιπλέον, η συνάρτηση στόχου F είναι

$$F = \omega_1 \int_s \left(p + \frac{1}{2} v^2 \right) v_i n_i ds + \omega_2 T \quad (4.11)$$

Σημειώνεται ότι n_i είναι τα κάθετα διανύσματα της επιφάνειας εισόδου και εξόδου, ενώ ω_1 και ω_2 είναι συντελεστές βαρύτητας για τους δύο στόχους της βελτιστοποίησης, της μεγιστοποίησης της μεταφοράς θερμότητας προς το ψυχρό ρεύμα ρευστού και της ελαχιστοποίησης των απωλειών ολικής πίεσης του ίδιου ρεύματος.

Οι συνεχείς συζυγείς εξισώσεις του προβλήματος που προκύπτουν από τις εξισώσεις τις ροής, την εξίσωση μεταφοράς θερμότητας και την επαυξημένη συνάρτηση στόχου είναι οι ακόλουθες (δεν παρουσιάζεται η διαδικασία παρά μόνο οι τελικές σχέσεις) [15], [12]. Σημειώνεται ότι ακολουθείται η τανυστική γραφή.

$$-\beta^2 \frac{\partial q}{\partial x_i} + v_j \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + T \frac{\partial T_a}{\partial x_i} = 0 \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.13)$$

και

$$u_i \frac{\partial T_a}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial^2 T_a}{\partial x_i^2} = 0 \quad (4.14)$$

όπου q η συζυγής ποσότητα της πίεσης p , u_i οι συζυγείς ποσότητες των ταχυτήτων v_i και T_a η συζυγής θερμοκρασία.

Όσον αφορά τις οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος, στην είσοδο του εναλλάκτη θερμότητας θα είναι

$$u_i n_i = -\omega_1 \frac{\partial F}{\partial p} \quad (4.15)$$

ή ισοδύναμα

$$u_i = \frac{1}{\beta} v_i \quad (4.16)$$

και

$$T_a = 0 \quad (4.17)$$

Στην έξοδο αυτού έχουμε

$$\begin{aligned} \beta q \vec{n}_1 + 2v_1 u_1 \vec{n}_1 + v_2 u_1 \vec{n}_2 + v_2 u_2 \vec{n}_1 + 2(\nu + \nu_t) \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \vec{n}_1 \\ + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (\nu + \nu_t) \vec{n}_2 = -\omega_1 \frac{\partial F}{\partial v_1} \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \beta q \vec{n}_2 + 2v_2 u_2 \vec{n}_2 + v_1 u_2 \vec{n}_1 + v_1 u_1 \vec{n}_2 + 2(\nu + \nu_t) \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \vec{n}_2 \\ + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (\nu + \nu_t) \vec{n}_1 = -\omega_2 \frac{\partial F}{\partial v_2} \end{aligned} \quad (4.19)$$

ή ισοδύναμα

$$\beta q n_i + u_j v_j n_i + u_i v_j n_j + (\nu + \nu_t) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} n_j + \omega_1 \frac{\partial F}{\partial v_i} + T_a T n_j = 0 \quad (4.20)$$

και

$$T_a u_i n_i + \alpha \frac{\partial T_a}{\partial x_i} n_i + \omega_2 = 0 \quad (4.21)$$

ενώ στα στερεά τοιχώματα των σωληνώσεων, για την ταχύτητα ισχύει η συνθήκη μη-ολίσθησης

$$\vec{u} = 0 \quad (4.22)$$

καθώς και η

$$T_a = 0 \quad (4.23)$$

Για τις συζυγείς εξισώσεις 4.12, 4.13 και 4.14 σημειώνουμε ότι οι 4.12, 4.13 είναι συζευγμένες (coupled) αλλά μη-συζευγμένες με τη 4.14, δηλαδή η επίλυση των πρώτων δύο τους γίνεται ταυτόχρονα ενώ η επίλυση της τρίτης (αν και βρίσκεται στον ίδιο κύκλο υπολογισμού) ακολουθεί χρησιμοποιώντας τα αποτελεσματα τους.

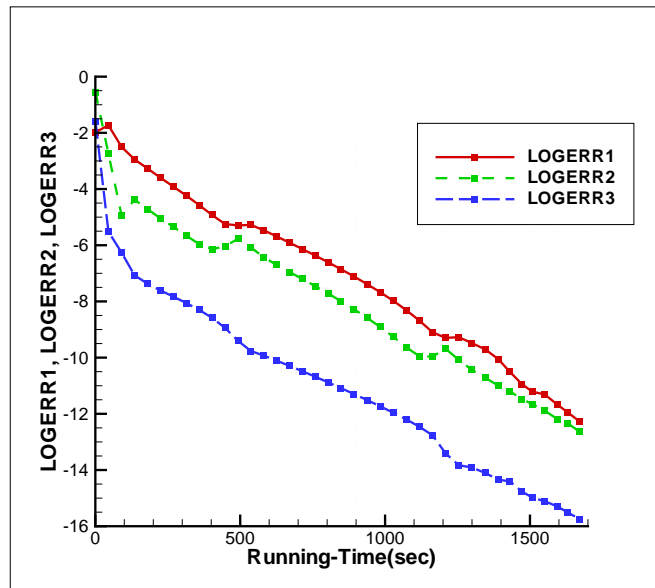
4.3 Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Gauss–Seidel) με τη Μέθοδο Jacobi στην Επίλυση του Πεδίου Ροής και της Εξίσωσης Μεταφοράς Θερμότητας

Στην παρούσα ενότητα γίνεται σύγκριση της μεθόδου PGMRES(Gauss–Seidel) και της μεθόδου Jacobi για την επίλυση των εξισώσεων στρωτής ροής ασυμπίεστου ρευστού εντός του εναλλάκτη θερμότητας για τα χαρακτηριστικά της ροής που σημειώθηκαν παραπάνω ($T_{inlet} = 293K$, $u_{inlet} = 0.5m/s$, $Re = 1000$), **(υπολογίζεται δηλαδή το πεδίο ροής)**. Η σύγκριση γίνεται ως προς τον αναγκαίο υπολογιστικό χρόνο σύγκλισης του πεδίου ενώ χρησιμοποιούνται τα συμπεράσματα του αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομής όσον αφορά τις παραμέτρους της PGMRES, έτσι επιλέγουμε για μέθοδο προσταθεροποίησης την Gauss–Seidel με επαναλήψεις $n_{pre} = 12$ και διανυσματική βάση $m = 35$. Ακόμη οι επαναλήψεις της μεθόδου Jacobi είναι $n = 12$.

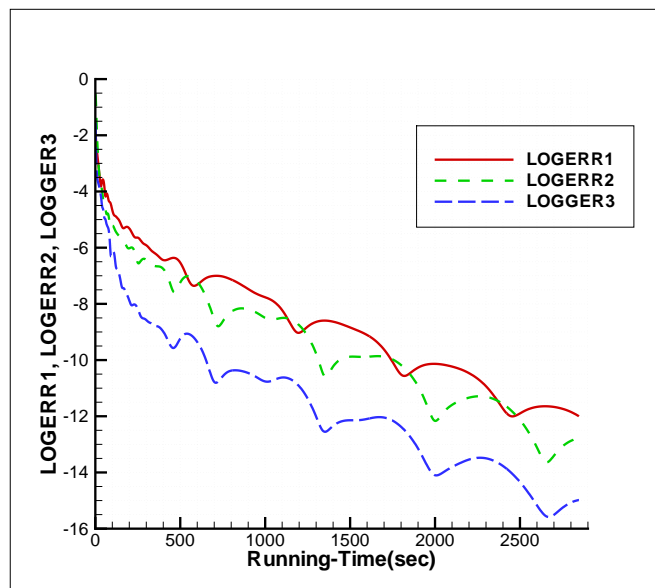
Στα σχήματα 4.4 και 4.5 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης του συστήματος των εξισώσεων ροής. Στον πίνακα 4.1 φαίνεται η επιτάχυνση της επίλυσης όταν αντί για τη μέθοδο Jacobi χρησιμοποιήσουμε τη PGMRES(Gauss–Seidel) είναι $S = 1.71$.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(GS) (sec)	GMRES(GS) $max(LOGERR)$
35	12	2846.9	-12.00	1670.2	-12.27

Πίνακας 4.1: Υπολογιστικό Πλέγμα 40000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -12.00$

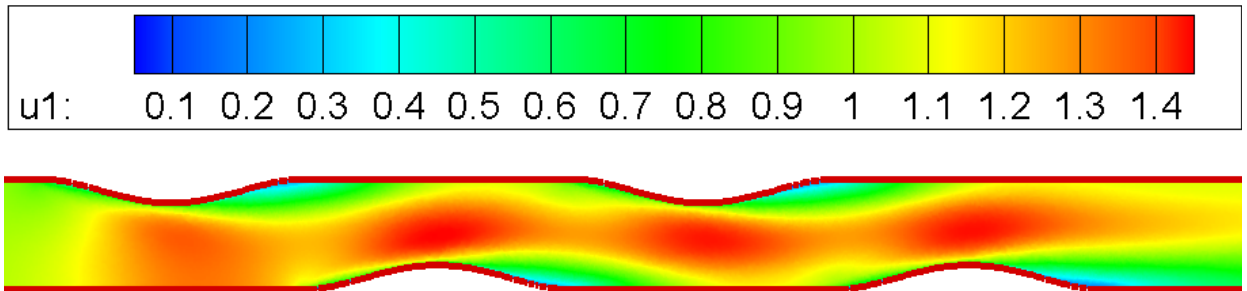


Σχήμα 4.4: Υπόλοιπο των εξισώσεων ροής σε εναλλάκτη θερμότητας. Μέθοδος PGMRES(Gauss-Seidel), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσταθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$

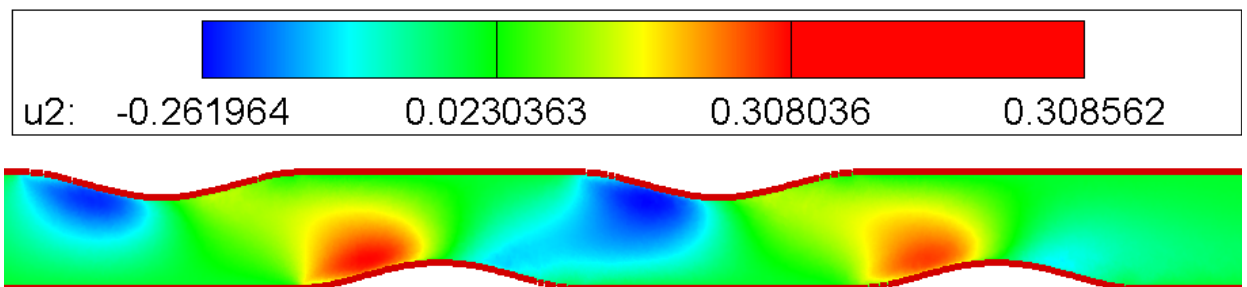


Σχήμα 4.5: Υπόλοιπο των εξισώσεων ροής σε εναλλάκτη θερμότητας. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις ανά κύκλο υπολογισμού $n = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -12.00$

Ακολουθούν τα πεδία ταχυτήτων και πίεσης που προκύπτουν στα σχήματα 4.6, 4.7 και 4.8.

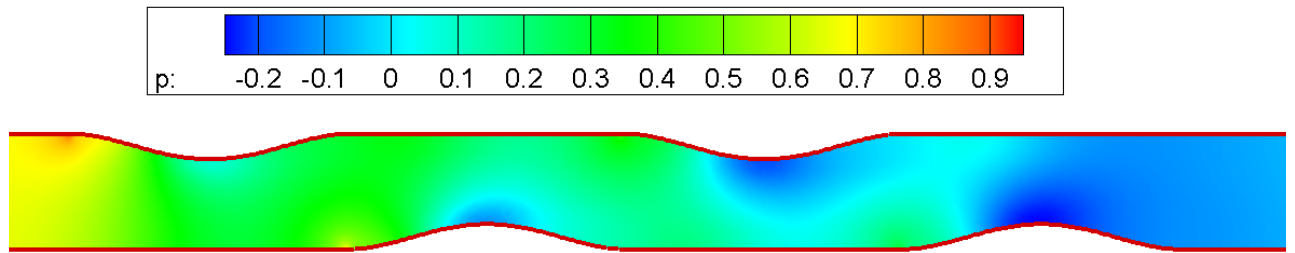


Σχήμα 4.6: Πεδίο ροής ασυμπίεστου ρευστού εντός εναλλάκτη θερμότητας. Ταχύτητα κατά x .



Σχήμα 4.7: Πεδίο ροής ασυμπίεστου ρευστού εντός εναλλάκτη θερμότητας. Ταχύτητα κατά y .

781. Εφαρμογή της Μεθόδου GMRES στη Βελτιστοποίηση Μορφής Εναλλάκτη Θερμότητας

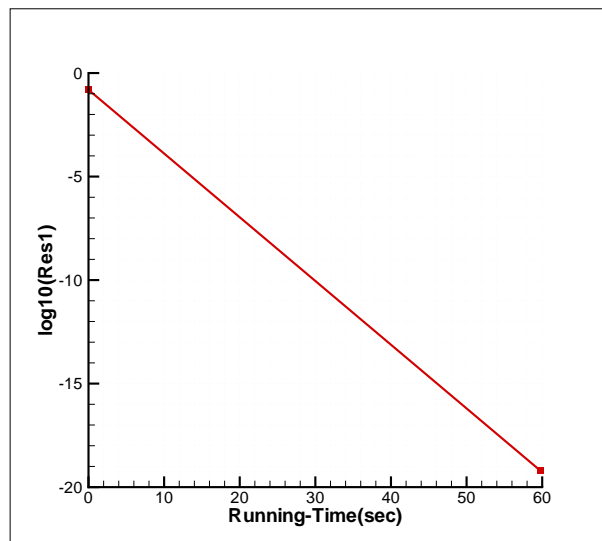


Σχήμα 4.8: Πεδίο ροής ασυμπίεστου ρευστού εντός εναλλάκτη θερμότητας. Ολική πίεση.

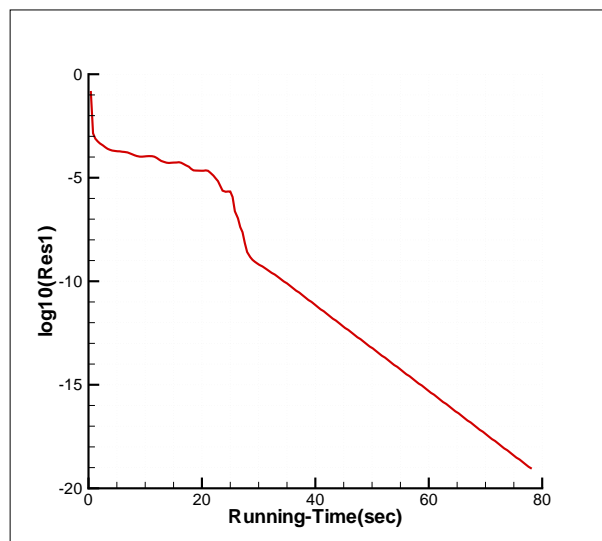
Στην **επίλυση της εξίσωσης της μεταφοράς θερμότητας** 4.8 προκύπτουν τα αποτελέσματα σύγκλισης του πίνακα 4.2 ενώ στα σχήματα 4.9 και 4.10 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης. Η επιτάχυνση της επίλυσης είναι $S = 1.31$.

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $max(LOGERR)$	Υπ. Χρόνος GMRES(GS) (sec)	GMRES(GS) $max(LOGERR)$
35	12	78.2	-19.05	59.8	-19.21

Πίνακας 4.2: Υπολογιστικό Πλέγμα 40000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $max(LOGERR) \leq -19.00$



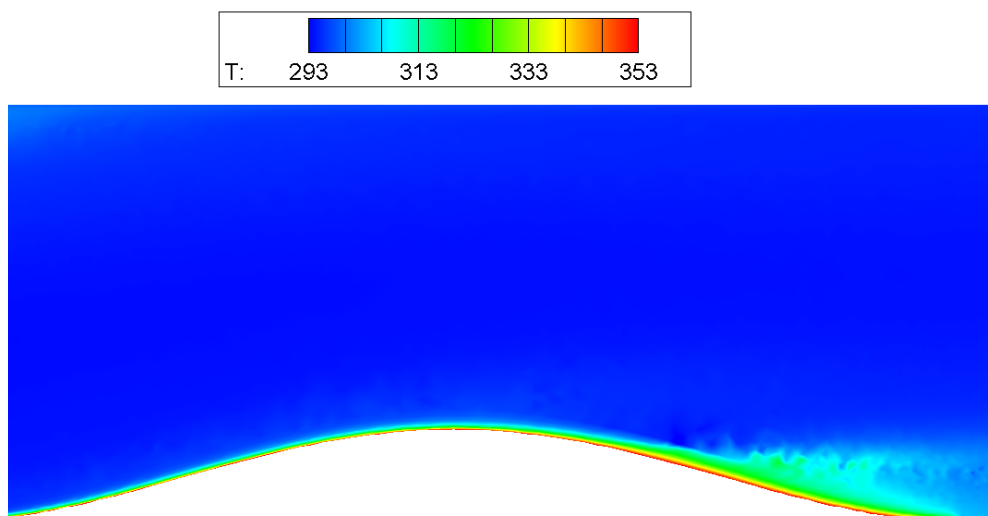
Σχήμα 4.9: Υπόλοιπο της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε εναλλάκτη. Μέθοδος PGMRES(Gauss-Seidel), βάση $m = 35$, επαναλήψεις προσαθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -19.00$



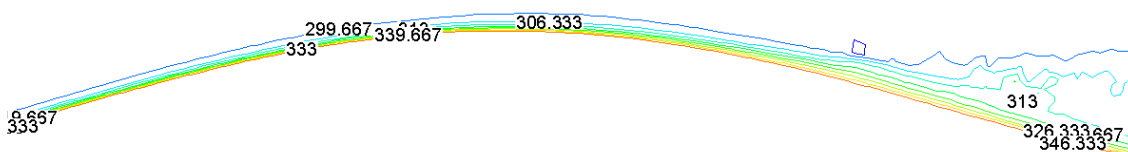
Σχήμα 4.10: Υπόλοιπο της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας σε εναλλάκτη. Μέθοδος Jacobi, επαναλήψεις προσαθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -19.00$

804. Εφαρμογή της Μεθόδου GMRES στη Βελτιστοποίηση Μορφής Εναλλάκτη Θερμότητας

Το πεδίο θερμοκρασιών γύρω από τις σωληνώσεις του εναλλάκτη παρουσιάζεται στο σχήμα 4.11, ενώ στο σχήμα 4.12 σημειώνονται οι ισοϋψείς της θερμοκρασίας. Η θερμοκρασιακή αλληλεπίδραση μεταξύ του ψυχρού ρεύματος ρευστού και των σωληνώσεων εντοπίζεται κοντά πολύ κοντά σε αυτές, το γεγονός αυτό οφείλεται στην επιλεγείσα τιμή της σταθεράς θερμικής αλληλεπίδρασης.



Σχήμα 4.11: Πεδίο θερμοκρασιών γύρω από σωλήνωση εναλλάκτη



Σχήμα 4.12: Ισοϋψείς θερμοκρασιών κοντά στη σωλήνωση εναλλάκτη

4.4 Σύγκριση της Μεθόδου PGMRES(Gauss-Seidel) με τη Μέθοδο Jacobi στην Επίλυση των Συνεχών Συζυγών Εξισώσεων

Όπως και στην περίπτωση του αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομής, που προηγήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, έτσι και στη βελτιστοποίηση του εναλλάκτη θερμότητας εφαρμόζουμε την μέθοδο PGMRES(Gauss-Seidel) με $m = 35$ και $n_{pre} = 12$ (δηλαδή την αποδοτικότερη PGMRES από όσες εξετάστηκαν) αντί της Jacobi στην **επίλυση των συζυγών εξισώσεων** (εδώ με στόχο την εύρεση της διατομής των σωληνώσεων που ελαχιστοποιεί τις απώλειες ολικής πίεσης ενώ μεγιστοποιεί τη μεταφορά θερμότητα) με σκοπό τον προσδιορισμό του υπολογιστικού κέρδους.

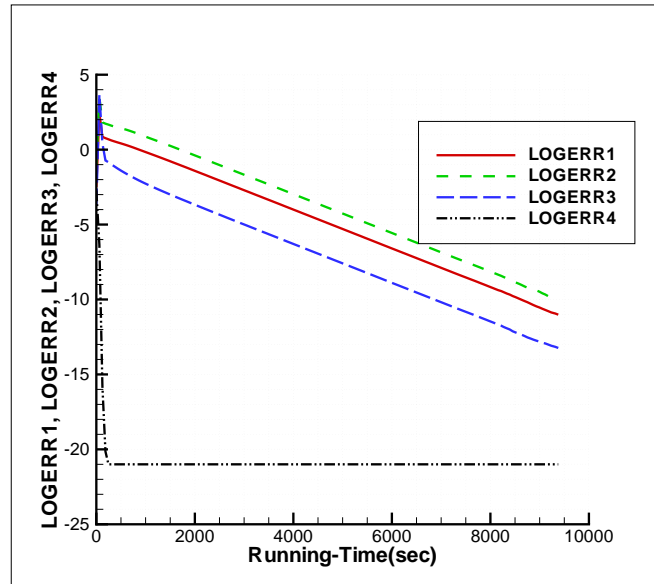
Στον πίνακα 4.3 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της επίλυσης για κριτήριο σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -10.00$. Όπως σημειώνεται η μέθοδος Jacobi δεν έπιασε το κριτήριο σύγκλισης σε αντίθεση με τη PGMRES(Gauss-Seidel)

m	n_{pre}	Υπ. Χρόνος Jacobi (sec)	Jacobi $\max(\text{LOGERR})$	Υπ. Χρόνος GMRES(GS) (sec)	GMRES(GS) $\max(\text{LOGERR})$
35	12	Μή σύγκλιση	-10.00	1390.8	-12.27

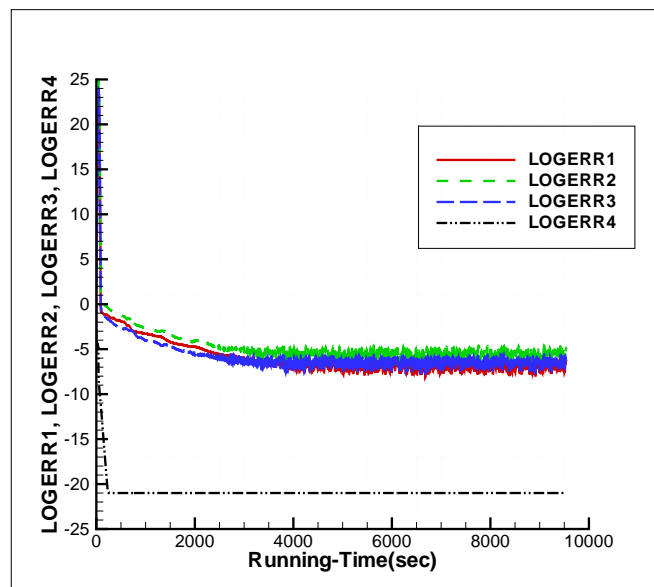
Πίνακας 4.3: Υπολογιστικό Πλέγμα 40000 κόμβων, Κριτήριο Σύγκλισης $\max(\text{LOGERR}) \leq -10.00$

Στα σχήματα 4.13 και 4.14 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης των δύο μεθόδων.

821. Εφαρμογή της Μεθόδου GMRES στη Βελτιστοποίηση Μορφής Εναλλάκτη Θερμότητας



Σχήμα 4.13: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος PGMRES(Gauss-Seidel), βάση $m = 35$, υποεπαναλήψεις προσαθεροποίησης $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -10.00$



Σχήμα 4.14: Υπόλοιπο των συζυγών εξισώσεων. Μέθοδος Jacobi, βάση $m = 35$, επαναλήψεις ανά κύκλο $n_{pre} = 12$. Κριτήριο σύγκλισης $\max (LOGERR) \leq -10.00$

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα

Βιβλιογραφικά η γραμμική παραλαγή της μεθόδου PGMRES προτείνεται για την επιτάχυνση της επίλυσης γραμμικών συστημάτων $A\vec{x} = \vec{b}$ που καταλήγουν σε μητρώα συντελεστών A τα οποία είναι μη-συμμετρικά. Στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν ο προσδιορισμός του υπολογιστικού κέρδους από την εφαρμογή της PGMRES καθώς και ο προσδιορισμός των αποδοτικότερων παραμέτρων αυτής, όπως είναι η βέλτιστη διάσταση της διανυσματικής βάσης, η μέθοδος προσταθεροποίησης καθώς και η τιμή επαναλήψεων προσταθεροποίησης.

Από την εφαρμογή της PGMRES στον αντίστροφο σχεδιασμό μεμονωμένης αεροτομής, αεροτομής συμπιεστή και στη βελτιστοποίηση εναλλάκτη θερμότητας (με στόχο δεδομένη κατανομή πίεσης και πτώση των απωλειών ολικής πίεσης αντίστοιχα) αλλά και τον υπολογισμό του πεδίου ροής στην περίπτωση του εναλλάκτη διαπιστώσαμε τα εξής:

1. Η τιμή της ορθοκανονικής διανυσματικής βάσης m επιρρεάζει την σύγκλιση μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων της μεθόδου PGMRES. Ειδικότερα, καθώς αυξάνει η m μεγαλώνει ο χρόνος υπολογισμού της βάσης καθώς και η σύγκλιση ανάμεσα στις επαναλήψεις. **Οι εφαρμογές έδειξαν ότι αποδοτικότερη, από θέμα υπολογιστικού χρόνου, είναι η επιλογή τιμής κοντά στην $m = 35$.** Αυτή είναι εντός των προτεινόμενων ορίων [2], [6], [9] τιμής διανυσματικής βάσης που προτείνεται $3 \leq m \leq 40$.
2. Στην εφαρμογή της μεθόδου GMRES με (προσταθεροποίηση ή όχι), στα προβλήματα που εξετάστηκαν, είχαμε μικρότερους υπολογιστικούς χρόνους σύγκλισης όταν στα διαγώνια στοιχεία του μητρώου των συντελεστών A (αυτά όπως έχει σημειωθεί δημιουργούν το μητρώο D) **δεν** λαμβάναμε υπόψη τη συνεισφορά του ψευδοχρονικού όρου (που εισάγει η επαναληπτική διαδικασία επί-

λυσης).

3. Η επιλεγείσα τιμή των επαναλήψεων προσαθεροποίησης n_{pre} έχουν το ίδιο αποτέλεσμα με την βάση m στην PGMRES. Δηλαδή αύξηση του αριθμού n_{pre} έχει ως αποτέλεσμα μεγαλύτερη σύγκλιση ανά επανάληψη της μεθόδου αυξάνοντας όμως και το χρόνο περάτωσης αυτής. **Αποδοτικότερη τιμή επαναλήψεων προσαθεροποίησης είναι γύρω στην $n_{pre} = 12$.**
 4. Σε όλες τις εφαρμογές που εξετάστηκαν, ανεξάρτητα από τις τιμές m , n_{pre} , και ανεξάρτητα από το πλήθος των υπολογιστικών κόμβων και το είδος της ροής και του στόχου των οποίων οι συζυγείς εξισώσεις επιλύθηκαν η PGMRES ήταν πάντα πιο γρήγορη της Jacobi.
 5. Η επιτάχυνση της επίλυσης των συζυγών εξισώσεων σε υπολογιστικό χρόνο ήταν $S_{min} \geq 1.92$. Το υπολογιστικό κέρδος διέφερε ανάλογα με το υπολογιστικό πλέγμα, τη γεωμετρία και το είδος της ροής και στόχου κατά την επίλυση των συζυγών εξισώσεων αντίστροφης σχεδίασης ή βελτιστοποίησης αλλά και από το κριτήριο σύγκλισης. Σημειώνουμε ότι για μεγαλύτερο πλέγμα, μεγαλύτερο κριτήριο σύγκλισης και πιο σύνθετη ροή το κέρδος S αυξάνει, ενώ σε περιπτώσεις αδυναμίας σύγκλισης με τον υπάρχοντα επιλύτη (Jacobi) η μέθοδος PGMRES έπιασε το κριτήριο σύγκλισης, έστω και σε μεγάλο χρόνο.
 6. Αποδοτικότερος προσαθεροποιητής, στα προβλήματα που εξετάστηκαν, είναι η μέθοδος Gauss-Seidel, έναντι των υπολοίπων που εξετάστηκαν, επιταχύνοντας επιπρόσθετα την PGMRES(Gauss-Seidel) έναντι της PGMRES(Jacobi) κατά $S = 1.36$.
 7. Η PGMRES(Symmetric Gauss-Seidel) είναι λίγο πιο αργή από την PGMRES(Gauss-Seidel), ωστόσο επιτρέπει την σύγκλιση σε μεγαλύτερη τιμή κριτηρίου σύγκλισης.
 8. Η PGMRES(Runge-Kutta) δεν παρουσίασε τόσο αποδοτική συμπεριφορά, ως προς το χρόνο σύγκλισης, όσο η PGMRES με τις άλλες μεθόδους προσαθεροποίησης.
 9. Η εφαρμογή της PGMRES αποδίδει και στην επίλυση του μη-γραμμικού συστήματος που προκύπτει από την διακριτοποίηση των εξισώσεων της ροής (στις οποίες βέβαια εφαρμόστηκε γραμμικοποίηση), με την επιτάχυνση της επίλυσης να είναι $S = 1.71$. Το γεγονός αυτό κάνει ακόμη πιο ενδιαφέρουσα μια
-

μελλοντική εφαρμογή της μεθόδου GMRES για μη-γραμμικά συστήματα, η οποία αναμένεται να επιταχύνει περισσότερο την επίλυση τέτοιων συστημάτων.

Επομένως καταλήγουμε στο γεγονός ότι αξίζει ,από τη σκοπιά του υπολογιστικού χρόνου, να αντικατασταθούν οι υπάρχοντες επιλύτες με τη μέθοδο PGMRES. Για αυτό προτείνεται η περαιτέρω εμβάθυνση σε θέματα που αφορούν την εφαρμογή της GMRES με βασικά σημεία :

- Μεταφορά του κώδικα επίλυσης της μεθόδου GMRES σε παράλληλους υπολογιστές για επίλυση προβλημάτων με αυξημένες ανάγκες υπολογιστικής ισχύος.
 - Υλοποίηση της μη-γραμμικής μεθόδου GMRES σε κώδικα για την επίλυση μη-γραμμικών συστημάτων, όπως αυτά που προκύπτουν από την διακριτοποίηση των εξισώσεων ροής.
-

Βιβλιογραφία

- [1] ***Iterative Methods for Sparse Linear Systems***, Yousef Saad, 2000.
- [2] ***Προχωρημένες Υπολογιστικές Τεχνικές και Αλγόριθμοι Επίλυσης - Η Μέθοδος GMRES***, Κ.Χ.Γιαννάκογλου, Πανεπιστημιακές Παραδόσεις Ε.Μ.Π., 2002.
- [3] ***Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική***, Κ.Χ.Γιαννάκογλου, Ε.Μ.Π., 2006.
- [4] ***Acceleration of a Navier-Stokes Equation Solver for Unstructured Grids Using Agglomeration Multigrid and Parallel Processing***, Ν.Κ.Λαμπροπούλου, Δ.Γ.Κουμπογιάννης, Κ.Κ.Γιαννακόγλου, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2004.
- [5] ***Continuous and Discrete Adjoint Approaches for Aerodynamic Shape Optimization with Low Mach Number Preconditioning***, V.G.Asouti, A.S.Zymaris, D.I.Papadimitriou, K.C.Giannakoglou, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2008.
- [6] ***A Simple Strategy for Varying the Restart Parameter in GMRES(m)***, A.H.Baker, E.R.Jessup, Tz.V.Kolev, Journal of Computational and Applied Mathematics 230, 2009.
- [7] ***GMRES Algorithm and Symmetric Gauss-Seidel Preconditioning Solver for 2-D Boltzmann Transport Equation***, A.Tizaoui, S.Akesbi, Springer Science-Business Media LLC 2008, 2008.
- [8] ***On the Convergence Behaviour of the Restarted GMRES Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems***, W.Joubert, Numerical Linear Algebra with Applications 1, 1994.
- [9] ***Deflated GMRES for Systems With Multiple Shifts and Multiple Right-Hand Sides***, D.Darnell, R.B.Morgan, W.Wilcox, Linear Algebra and its Applications 429, 2008.

- [10] **A New Computational GMRES Method**, H.S.Najafi, H.Zareamoghaddam, Applied Mathematics and Computation 199, 2008.
- [11] **Μέθοδοι Αεροδυναμικής Ανάλυσης και Σχεδιασμού για Ροές Υψηλών και Χαμηλών Ταχυτήτων σε Πολυεπεξεργαστικό Περιβάλλον**, Β.Γ.Ασούτη, Διδακτορική Διατριβή Ε.Μ.Π., 2009.
- [12] **Ανάλυση και Βελτιστοποίηση Σύνθετων Ρευστομηχανικών Διατάξεων με Χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής και Εξελικτικών Αλγορίθμων**, Ε.Α.Κοντολέοντος, Διδακτορική Διατριβή Ε.Μ.Π., Εν Εξελίξει.
- [13] **A Two-Dimensional Multiblock Incompressible Euler/Navier-Stokes Flow Solver**, F.Wilquem, G. Degrez, Technical Note 182 - Von Karman Institute, 1993.
- [14] **Συνεκτικές Ροές στις Στροβιλομηχανές**, Γ.Χ. Γιαννάκογλου, Ε.Μ.Π., 2004.
- [15] **Continuous Adjoint Approach to the Spallart-Allmaras Turbulent Model for Incompressible Flows**, A..S.Zymaris, D.I.Papadimitriou, K.C.Giannakoglou, C.Othmer, Computers and Fluids 38, 2009 .
- [16] **Αριθμητική Επίλυση των Εξισώσεων Navier-Stokes με Χρήση Μη Δομημένων Πλεγμάτων σε Περιβάλλον Παράλληλης Επεξεργασίας**, Δ.Κουμπογιάννης, Διδακτορική Διατριβή Ε.Μ.Π., 1998.
- [17] **Iterative Methods for Linear Systems**, K.A.Gallivan, Πανεπιστημιακές Παραδόσεις Florida State University.
- [18] **Multi-Objective Shape Optimization of a Heat Exchanger Using Parallel Genetic Algorithms**, R.Hilbert, G.Janiga, R.Baron, D.Thevenin, International Journal of Heat and Mass Transfer, 2006.
- [19] **Αρχές Μεταφοράς Θερμότητας και Μάζης**, Ε.Κακάτσιος, Εκδόσεις Συμεών, 2006.
-