



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ

Συζυγείς Μέθοδοι για το Στιβαρό Σχεδιασμό
Αεροδυναμικών Μορφών με Υπολογισμό
Τρίτων Παραγώγων. Εφαρμογή σε
Μονοδιάστατους Αγωγούς.

Διπλωματική Εργασία
του

Ευάγγελου Παπουτσή Κιαχαγιά

Επιβλέπων: Κ.Χ. Γιαννάκογλου
Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

Ιούλιος 2009

Συζυγείς Μέθοδοι για το Στιβαρό Σχεδιασμό Αεροδυναμικών
Μορφών με Υπολογισμό Τρίτων Παραγώγων. Εφαρμογή σε
Μονοδιάστατους Αγωγούς.

Διπλωματική εργασία
του

Ευάγγελου Παπουτσή Κιαχαγιά

Επιβλέπων: Κ.Χ. Γιαννάκογλου
Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

Ιούλιος 2009

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία επικεντρώνεται στην εύρεση νέων τρόπων, με μικρό υπολογιστικό κόστος, για τον υπολογισμό μέχρι και των 3ων παραγώγων συναρτήσεων - στόχων αεροδυναμικών μορφών, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, που καθορίζουν την αεροδυναμική μορφή, ως προς τις μεταβλητές που καθορίζουν τις συνθήκες του προβλήματος ροής (και θα αποκαλούνται εφεξής στιβαρές μεταβλητές, *robust variables*) καθώς και ως προς τους απαραίτητους συνδυασμούς των ανωτέρω μεταβλητών (μικτές παράγωγοι). Αυτές οι παράγωγοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον στιβαρό σχεδιασμό (*robust design*) αεροδυναμικών μορφών, δηλαδή το σχεδιασμό μορφών με ικανοποιητική απόδοση σε εύρος συνθηκών λειτουργίας.

Πιο συγκεκριμένα, στη λογική της ιδέας που διέπει το Six-Sigma Design, υιοθετείται συνάρτηση - στόχος που εκφράζει αφενός μεν την αεροδυναμική απόδοση στις ονομαστικές συνθήκες λειτουργίας, αφετέρου δε την απόκλιση της απόδοσης αυτής σε ενδεχόμενη αλλαγή των συνθηκών λειτουργίας (αλλαγή τιμών των στιβαρών μεταβλητών). Με βάση αυτά, υπολογίζονται οι απαραίτητες παράγωγοι πρώτης, δεύτερης και τρίτης τάξης αυτής της συνάρτησης.

Από αυτές, οι μεν πρώτες και δεύτερες, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, συμμετέχουν στη συνάρτηση - στόχο, ενώ οι παράγωγοι αυτών ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού υποστηρίζουν μια μέθοδο απότομης καθόδου για την επίλυση του προβλήματος στιβαρού σχεδιασμού.

Η εργασία εστιάζει κυρίως στην εύρεση του οικονομικότερου τρόπου υπολογισμού όλων των απαραίτητων παραγώγων. Γίνεται προγραμματισμός λογισμικού για το πρόβλημα ψευδο -1Δ ροής σε αγωγό, όπου και δοκιμάστηκε η προτεινόμενη μέθοδος με μια εικονική συνάρτηση - στόχο.

**Adjoint Methods for the Robust Design of Aerodynamic Shapes, based
on Third-Order Sensitivities. Application to 1D Ducts**

Diploma Thesis
by

Evaggelos Papoutsis Kiachagias

Supervisor: K.C. Giannakoglou
Associate Professor NTUA

July 2009

Abstract

This diploma thesis focuses on finding new ways, with low computational cost, for the calculation of up to third order sensitivity derivatives of aerodynamic shapes' objective functions, with respect to design variables (which determine the aerodynamic shape), and variables determining flow operation conditions (which will henceforth be referred to as robust variables) and with respect to the appropriate combinations of design and robust variables. These derivatives can be used to design aerodynamic shapes with good/optimal performance in a range of operational conditions (robust design).

In particular, an objective function based on the concept of Six Sigma Design is introduced, which not only depicts the aerodynamic performance in the design point, but also the variation in performance when the operation conditions are changed (i.e. for different values that the robust variables may take on). Then, the first, second and third order sensitivity derivatives of the objective function are computed.

First and second order derivatives, with respect to the robust variables, affect the objective function's value, whereas their derivatives, with respect to the design variables, support a steepest descent method for the solution of the robust design problem.

This thesis mainly focuses on finding the less expensive way for computing the necessary derivatives. Software is developed for the quasi-1D flow in ducts, where the suggested method is tested, using a simple objective function.

Ευχαριστίες

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

Στο σημείο αυτό δεν θα μπορούσα να παραλείψω τις θερμές ευχαριστίες μου προς τον Δρ. Δημήτρη Παπαδημητρίου για τις άμεσες και εύστοχες παρατηρήσεις του, καθώς και για το χρόνο που μου αφιέρωσε.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους υποψήφιους Διδάκτορες Γιάννη Καμπόλη , Θωμά Ζερβογιάννη και Αλέξανδρο Ζυμάρη για τη βοήθεια που μου προσέφεραν.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Στιβαρός Σχεδιασμός	1
1.2	Υπολογισμός Πρώτων Παραγώγων με τη Συζυγή Μέθοδο	3
1.3	Υπολογισμός Παραγώγων Μεγαλύτερης Τάξης	4
1.4	Προϋπάρχον Λογισμικό - Επέκταση και δημιουργία νέου	6
1.5	Η δομή της εργασίας	8
2	Αριθμητική Επίλυση Ψευδο - 1D Ροής σε Αγωγό.	11
2.1	Ευθύ 1D πρόβλημα	11
2.2	Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής	12
2.3	Επίλυση δ-διατύπωσης με ακρίβεια δεύτερης τάξης	16
2.4	Οριακές συνθήκες	27
2.5	Επιλύτης ευθέος προβλήματος	31
3	Υπολογισμός 1ης και 2ης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού	33
3.1	Εισαγωγικά Σχόλια	33
3.2	Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού	34
3.2.1	Εισαγωγή	34
3.2.2	Υπολογισμός 1ης παραγώγου με ευθεία διαφορίση	34
3.2.3	Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη συζυγή μέθοδο	38
3.2.4	Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών	40
3.3	Υπολογισμός Δεύτερης Παραγώγου ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού	41
3.3.1	Εισαγωγή	41
3.3.2	Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο DD - DD	42
3.3.3	Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο DD - AM	46
3.3.4	Συμβολή των οριακών συνθηκών στις τιμές των δεύτερων παραγώγων	48
3.3.5	Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών	52

4	Υπολογισμός 1ης παραγώγου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές	53
4.1	Εισαγωγικά Σχόλια	53
4.2	Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης	54
4.3	Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη συζυγή μέθοδο.	56
4.4	Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.	58
5	Υπολογισμός 2ης παραγώγου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές	59
5.1	Εισαγωγικά Σχόλια	59
5.2	Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο DD-DD	59
5.3	Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο DD-AM	62
5.4	Συνεισφορά των οριακών συνθηκών	64
5.5	Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών	66
6	Υπολογισμός της Δεύτερης, μικτής, παραγώγου	69
6.1	Εισαγωγικά Σχόλια	69
6.2	Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο DD-DD	69
6.3	Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο DD-AM	72
6.4	Συνεισφορά των οριακών συνθηκών	74
6.5	Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών	76
7	Υπολογισμός της τρίτης, μικτής, παραγώγου	77
7.1	Εισαγωγικά Σχόλια	77
7.2	Υπολογισμός της τρίτης παραγώγου	79
7.3	Εφαρμογή των εξισώσεων της τρίτης παραγώγου	87
7.4	Υπολογισμός της τρίτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών	91
7.5	Σχεδιασμός με τη μέθοδο απότομης καθόδου	93
7.6	Αλγόριθμος σχεδιασμού	93
8	Παρουσίαση Αποτελεσμάτων	95
8.1	Σχόλια	95
8.2	Πρώτη Παράγωγος ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού και τη Στιβαρή Μεταβλητή	96
8.3	Δεύτερη Παράγωγος ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού, τη Στιβαρή Μεταβλητή και τις Μικτές Μεταβλητές	98
8.4	Τρίτη, Μικτή, Παράγωγος	102
8.5	Στιβαρός Σχεδιασμός	107

9	Συμπεράσματα - Σχόλια	113
A'	Έκφραση 1ης παραγώγου για μη ισαπέχοντες κόμβους.	115
B'	Υπολογισμός μητρώων A^+, A^-	119

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

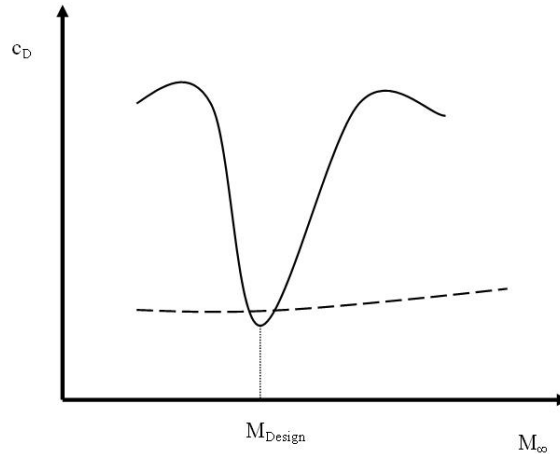
1.1 Στιβαρός Σχεδιασμός

Τον τελευταίο καιρό, υπάρχει έντονο ενδιαφέρον στο μηχανολογικό χώρο για το σχεδιασμό αεροδυναμικών μορφών που να αποδίδουν ικανοποιητικά, όχι μόνο στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας, αλλά σε ένα εύρος συνθηκών λειτουργίας. Η διαδικασία εύρεσης τέτοιων μορφών ονομάζεται στιβαρός σχεδιασμός (robust design).

Ο στιβαρός σχεδιασμός έχει χρησιμοποιηθεί σε διάφορους τύπους προβλημάτων. Ενδεικτικά αναφέρονται προβλήματα αεροδυναμικού σχεδιασμού αεροτομών [17], [18], [20], [21] αλλά και προβλήματα δομικού σχεδιασμού πτερυγών [19]. Η κύρια μέθοδος που χρησιμοποιείται για τη διατύπωση της συνάρτησης - στόχου του προβλήματος στιβαρού σχεδιασμού είναι η μέθοδος του Six Sigma Design. Γίνεται δηλαδή η παραδοχή της κανονικής κατανομής των μεταβλητών που καθορίζουν τις συνθήκες λειτουργίας (στιβαρές μεταβλητές - robust variables). Με αυτόν τον τρόπο εισάγεται η μεταβλητότητα της απόδοσης της αεροδυναμικής μορφής σε ενδεχόμενη μεταβολή των στιβαρών μεταβλητών. Μερικά παραδείγματα στιβαρών μεταβλητών είναι ο αριθμός Mach και η γωνία πρόσπτωσης σε αεροτομή. Έπειτα από τη διατύπωση της συνάρτησης - στόχου του προβλήματος στιβαρού σχεδιασμού, συνήθως χρησιμοποιείται κάποια στοχαστική μέθοδος (εξελικτικοί αλγόριθμοι [18], [20], [21], μέθοδος Monte Carlo [17], [19], νευρωνικά δίκτυα [17], μεταπρότυπα, Surrogate models [19]) για την ελαχιστοποίηση της. Αντίθετα, στην παρούσα διπλωματική εργασία, θα εφαρμοστεί αιτιοκρατική μέθοδος ελαχιστοποίησης με σκοπό την ελάττωση του υπολογιστικού κόστους.

Αν F συνάρτηση - στόχος κλασικού προβλήματος βελτιστοποίησης (λ.χ. ο συντελεστής απωλειών c_D ή ο λόγος του συντελεστή απωλειών προς τον συντελεστή άνωσης $\frac{c_D}{c_L}$, αν αναφερόμαστε σε αεροτομή, ή οι απώλειες πίεσης όταν αναφερόμαστε σε αγωγό), εισάγεται η τροποποιημένη συνάρτηση - στόχος \hat{F} (ή συνάρτηση - στόχος του προβλήματος στιβαρού σχεδιασμού) για την οποία ισχύει

$$\hat{F} = \hat{\mu}_F + k\hat{\sigma}_F \quad (1.1)$$



Σχήμα 1.1: Συντελεστής οπισθέλκουσας πτέρυγας, για κλασική βελτιστοποίηση (συνεχής γραμμή) και στιβαρό σχεδιασμό (διακεκομμένη γραμμή).

όπου k σταθερά, $\hat{\mu}_F$ η μέση εκτιμώμενη τιμή της συνάρτησης F και $\hat{\sigma}_F$ η μεταβλητότητα της F γύρω από τη μέση εκτιμώμενη τιμή της. Παρατηρούμε δηλαδή ότι η συνάρτηση \hat{F} εκφράζει την μέση απόδοση της F αλλά και τη μεταβλητότητά της σε ενδεχόμενη αλλαγή των στιβαρών μεταβλητών. Η επιλογή της \hat{F} έγινε με βάση την ιδέα του Six Sigma Design και τις προτάσεις της βιβλιογραφίας [17] για τα προβλήματα στιβαρού σχεδιασμού.

Οι εκφράσεις των μεγεθών $\hat{\mu}_F$, $\hat{\sigma}_F$ θα δοθούν στο Κεφάλαιο 7. Όπως θα γίνει εμφανές οι εκφράσεις αυτές, εξαρτώνται από τις τιμές των πρώτων και δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Συνεπώς, για να εφαρμοσθεί η μέθοδος της απότομης καθόδου για την επίλυση του προβλήματος στιβαρού σχεδιασμού, είναι απαραίτητος ο υπολογισμός των πρώτων και δεύτερων παραγώγων της F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, καθώς και ο υπολογισμός των παραγώγων τους ως προς τις μεταβλητές που ελέγχουν τη γεωμετρία της αεροδυναμικής μορφής (μεταβλητές σχεδιασμού). Οι παράγωγοι της συνάρτησης F ως προς τους συνδυασμούς των στιβαρών μεταβλητών και των μεταβλητών σχεδιασμού, θα ονομάζονται **μικτές** παράγωγοι και οι συνδυασμοί αυτών των μεταβλητών θα ονομάζονται **μικτές μεταβλητές**. Πιο συγκεκριμένα, οι μικτές παράγωγοι που απαιτούνται για την εφαρμογή της μεθόδου της απότομης καθόδου, είναι η μικτή δεύτερη παράγωγος της F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και τις μεταβλητές σχεδιασμού, και η μικτή τρίτη παράγωγος της F (δευτέρα ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και πρώτη ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού).

Μεγάλη έμφαση θα δοθεί στην εύρεση του οικονομικότερου τρόπου για τον υπολογισμό των ανωτέρω παραγώγων, μιας και λόγω της τάξης τους αλλά και του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού (σε πραγματικό πρόβλημα ενδέχεται να είναι και τριψήφιος αριθμός), το υπολογιστικό κόστος μπορεί να αυξηθεί πολύ.

1.2 Υπολογισμός Πρώτων Παραγώγων με τη Συζυγή Μέθοδο

Υπάρχουν πολλοί τρόποι υπολογισμού των παραγώγων, είτε για παράδειγμα με πεπερασμένες διαφορές είτε με τη θεωρία των μιγαδικών συναρτήσεων [6], [7]. Ωστόσο η ανάπτυξη νέων τεχνικών οι οποίες στηρίζονται στη θεωρία ελέγχου επιτρέπουν τον υπολογισμό των απαραίτητων παραγώγων με σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό κόστος (CPU cost), μιας και το κόστος υπολογισμού είναι πρακτικά ανεξάρτητο του αριθμού των μεταβλητών ως προς τις οποίες γίνεται η παραγωγή. Οι τεχνικές αυτές αποκαλούνται συζυγείς (adjoint).

Οι συζυγείς τεχνικές είναι δύο ειδών, η συνεχής συζυγής τεχνική (continuous adjoint method) και η διακριτή συζυγής τεχνική (discrete adjoint method) [2], [10], [11]. Κατά τη χρήση της συνεχούς συζυγούς τεχνικής, οι συζυγείς εξισώσεις διαμορφώνονται από τις αντίστοιχες εξισώσεις της ροής σε διαφορική μορφή και έπειτα διακριτοποιούνται προκειμένου να επιλυθούν αριθμητικά, ενώ ουσιαστικό είναι ότι η προκύπτουσα συζυγής εξίσωση δεν εξαρτάται από τη διακριτοποίηση του ευθέως προβλήματος [12], [13], [14], [15], [16]. Από την άλλη πλευρά, χρησιμοποιείται η διακριτή συζυγής διατύπωση, με βάση την οποία διακριτοποιούνται οι εξισώσεις ροής και στη συνέχεια διαμορφώνεται απευθείας το συζυγές πρόβλημα σε διακριτοποιημένη μορφή. Με αυτόν τον τρόπο γίνεται ξεκάθαρο ότι στη διακριτή συζυγή τεχνική, η βάση της όλης ανάπτυξης είναι οι διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής.

Ακολουθεί συνοπτική παρουσίαση της διακριτής συζυγούς μεθόδου, η οποία χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία. Η σχέση (1.2) δίνει την ολική παράγωγο της συνάρτησης F ως προς ένα διάνυσμα \vec{x} , το οποίο έστω ότι αποτελείται από N στοιχεία. Αν το μέγεθος \vec{x} επηρεάζει τη συνάρτηση F τόσο άμεσα, όσο και έμμεσα - επηρεάζοντας τα ροϊκά μεγέθη που συμβολίζονται με το διάνυσμα \vec{U} - τότε η ολική παράγωγος της F ως προς \vec{x} θα είναι

$$\frac{dF}{d\vec{x}} = \frac{\partial F}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{x}} \quad (1.2)$$

Οι εξισώσεις ροής μπορούν να γραφούν σε διανυσματική γραφή μέσω του τελεστή $\vec{R} = 0$. Λαμβάνοντας υπόψη την άμεση και έμμεση εξάρτηση της ροής από το μέγεθος \vec{x} έχουμε για την παράγωγο του \vec{R} ως προς \vec{x}

$$\frac{d\vec{R}}{d\vec{x}} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{x}} = 0 \quad (1.3)$$

Ο όρος $\frac{d\vec{U}}{d\vec{x}}$ μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση (1.3) και στη συνέχεια να αντικατασταθεί στη σχέση (1.2), από όπου και υπολογίζεται τελικά η ολική παράγωγος $\frac{dF}{d\vec{x}}$ (μέθοδος της ευθείας διαφόρισης - direct differentiation - DD). Ωστόσο, ο υπολογισμός του όρου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{x}}$ μέσω της (1.3) απαιτεί την επίλυση N συστημάτων. Το κόστος αυτό μπορεί να γίνει ιδιαίτερα μεγάλο σε διδιάστατα ή τριδιάστατα προβλήματα όπου ο αριθμός N μπορεί να είναι ένας μεγάλος διψήφιος ή και τριψήφιος αριθμός. Η λύση σε αυτό το πρόβλημα μπορεί να δοθεί χρησιμοποιώντας τη συζυγή μέθοδο (adjoint method - AM).

Σκοπός της συζυγούς μεθόδου είναι η παράκαμψη του υπολογιστικά ακριβού όρου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{x}}$. Για τον σκοπό αυτό εισάγεται η επαυξημένη συνάρτηση F_{aug} , η παράγωγος της οποίας ως προς τη μεταβλητή \vec{x} γράφεται

$$\frac{dF_{aug}}{d\vec{x}} = \frac{dF}{d\vec{x}} + \vec{\psi}^T \frac{d\vec{R}}{d\vec{x}} = \frac{dF}{d\vec{x}} \quad (1.4)$$

Αντικαθιστώντας τις (1.2) και (1.3) στη σχέση (1.4) και εκτελώντας τις πράξεις έχουμε

$$\frac{dF_{aug}}{d\vec{x}} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \frac{d\vec{U}}{d\vec{x}} + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{x}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{x}} \right) \quad (1.5)$$

Θέλοντας να αποφύγουμε τον ακριβό υπολογισμό του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{x}}$, μηδενίζουμε τον πολλαπλασιαστή του σχέση (1.5) και οδηγούμαστε στη διατύπωση της συζυγούς εξίσωσης (1.6), από την οποία και υπολογίζεται η συζυγής μεταβλητή $\vec{\psi}$.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \vec{\psi} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \quad (1.6)$$

Το κόστος επίλυσης της συζυγούς εξίσωσης (1.6) είναι μόλις ένα σύστημα και είναι **ανεξάρτητο** από το πλήθος των στοιχείων N του διανύσματος \vec{x} . Βλέπουμε συνεπώς, το σημαντικό πλεονέκτημα της συζυγούς μεθόδου, ιδιαίτερα όταν το πλήθος των μεταβλητών x είναι μεγάλο.

1.3 Υπολογισμός Παραγώγων Μεγαλύτερης Τάξης

Η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ένα σχήμα βελτιστοποίησης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου. Ωστόσο, η επιθυμία για ταχύτερη σύγκλιση οδήγησε στον υπολογισμό των δεύτερων παραγώγων (Hessian μητρώο) της συνάρτησης - στόχου. Ουσιαστικά υπάρχουν 4 τρόποι υπολογισμού της

δεύτερης παραγώγου, που είναι όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί της ευθείας διαφόρισης (υπολογισμός των παραγώγων $\frac{d\vec{U}}{dx}$ ή/και $\frac{d^2\vec{U}}{dx^2}$) και της συζυγούς τεχνικής (επίλυση των συζυγών εξισώσεων). Αρχικά λοιπόν, μπορεί να υπολογιστεί η πρώτη παράγωγος με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης και το Hessian μητρώο είτε με ευθεία διαφόριση είτε με τη συζυγή μέθοδο. Εναλλακτικά, μπορεί να υπολογιστεί με τη συζυγή μέθοδο η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου και η δεύτερη, είτε με ευθεία διαφόριση είτε με τη συζυγή τεχνική.

Με βάση την εμπειρία του ΕΘΣ/ΕΜΠ για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού [8], [9] και την ανάλυση που θα ακολουθήσει (Κεφάλαιο 3), αποδεικνύεται ότι ο οικονομικότερος τρόπος για την εύρεση του Hessian μητρώου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, είναι ο συνδυασμός της ευθείας διαφόρισης για την εύρεση της πρώτης παραγώγου και της συζυγούς τεχνικής για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου. Με βάση αυτή την εμπειρία, θα διερευνηθεί ο οικονομικότερος τρόπος υπολογισμού των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις στιβαρές και τις μικτές μεταβλητές. Επίσης θα αναζητηθεί ο οικονομικότερος τρόπος υπολογισμού των μικτών τρίτων παραγώγων.

1.4 Προϋπάρχον Λογισμικό - Επέκταση και δημιουργία νέου

Για τις ανάγκες της παρούσας διπλωματικής εργασίας, προσαρμόστηκαν και επεκτάθηκαν προϋπάρχοντες κώδικες. Συγκεκριμένα, προϋπήρχε [1] :

- Λογισμικό για παραμετροποίηση γεωμετρικών μορφών με χρήση πολυωνύμων Bezier-Bernstein.
- Λογισμικό για την επίλυση των Euler εξισώσεων ροής σε ψευδο - 1D αγωγό.
- Λογισμικό για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, με τη μέθοδο ευθείας διαφόρισης και τη διακριτή συζυγή μέθοδο.
- Λογισμικό για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, αφού πρώτα είχε υπολογιστεί η πρώτη παράγωγος με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης (μέθοδος DD-AM).

Το ανωτέρω λογισμικό επεκτάθηκε ώστε να υπολογιστούν οι παράγωγοι της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές και μικτές μεταβλητές, με τους εξής τρόπους:

- Υπολογίστηκε η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης, αφού είχε πρώτα υπολογιστεί και η πρώτη παράγωγος με την ίδια μέθοδο (μέθοδος DD-DD). Το συγκεκριμένο βήμα δεν είναι απαραίτητο για τον στιβαρό σχεδιασμό, πραγματοποιήθηκε όμως για την εξοικείωση με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.
- Υπολογίστηκε η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τις μεθόδους της ευθείας διαφόρισης και της συζυγούς τεχνικής.
- Υπολογίστηκε η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τις μεθόδους της ευθείας διαφόρισης - ευθείας διαφόρισης και της ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής. Η ανάπτυξη του λογισμικού βασίστηκε στην εμπειρία που υπήρχε για τον υπολογισμό του Hessian μητρώου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.
- Υπολογίστηκε η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μικτές μεταβλητές, με τη μεθόδου της ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής.
- Υπολογίστηκε η μικτή τρίτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου. Η παραγωγή ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού έγινε με τη συζυγή τεχνική, αφού πρώτα είχαν υπολογιστεί η πρώτη και δεύτερη παράγωγος της F , ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.

- Υπολογίσθηκε, τέλος, η πρώτη παράγωγος της τροποποιημένης συνάρτησης - στόχου \hat{F} , ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, και εντάχθηκε σε σχήμα βελτιστοποίησης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου.

Το ανωτέρω λογισμικό αναπτύχθηκε εισάγοντας ως συνάρτηση - στόχο το ολοκλήρωμα της πίεσης κατά μήκος ψευδο - 1Δ αγωγού. Έχουμε δηλαδή

$$F(\vec{U}, \vec{b}) = \int_{(L)} p(x)dx = \sum_{i=1}^{np} p_i \Delta x_i \quad (1.7)$$

Η συγκεκριμένη συνάρτηση - στόχος επιλέχθηκε κυρίως λόγω της απλότητάς της, μιας και όπως θα φανεί στο Κεφάλαιο 7, η εύρεση της τρίτης παραγωγού είναι αρκετά περίπλοκη. Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν είναι η διατύπωση και λύση ενός πραγματικού προβλήματος, αλλά η διερεύνηση των δυσκολιών που συναντώνται στον υπολογισμό των απαραίτητων παραγώγων που χρησιμοποιούνται στο στιβαρό σχεδιασμό. Τα συμπεράσματα που θα προκύψουν και η εμπειρία που θα αποκτηθεί, μπορούν να χρησιμοποιηθούν έπειτα σε ένα πραγματικό διδιάστατο ή τριδιάστατο πρόβλημα, το υπολογιστικό κόστος του οποίου δεν αφήνει ιδιαίτερα περιθώρια για πειραματισμούς. Ωστόσο, το ολοκλήρωμα της πίεσης συναντάται και σε πραγματικά προβλήματα, μιας και περιέχεται για παράδειγμα, στους συντελεστές άνωσης (c_L) και οπισθέλκουσας (c_D) αεροτομής.

1.5 Η δομή της εργασίας

Η παρούσα διπλωματική εργασία επικεντρώνεται στον υπολογισμό των πρώτων, δεύτερων και τρίτων παραγώγων μιας συνάρτησης F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τις στιβαρές μεταβλητές. Η δομή της εργασίας έχει ως εξής:

- **Κεφάλαιο 2**
Παρουσιάζεται αναλυτικά η επίλυση του ευθέως προβλήματος σε 1Δ αγωγό, χρησιμοποιώντας διακριτοποίηση δεύτερης τάξης ακρίβειας. Επιπλέον, περιγράφεται ο τρόπος επιβολής των οριακών συνθηκών που χρησιμοποιήθηκαν κατά την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής. Σημαντική προσθήκη αποτελεί η εισαγωγή εκφράσεων παραγώγων για μη ισαπέχοντες κόμβους.
- **Κεφάλαιο 3**
Μιας και το αντίστοιχο λογισμικό προϋπήρχε, παρουσιάζεται συνοπτικά, η εύρεση της πρώτης και δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Δίνεται έμφαση στη διερεύνηση της συνεισφοράς των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, στις τιμές της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$. Καταβάλλεται επίσης προσπάθεια για την ελάττωση των απαιτήσεων μνήμης.
- **Κεφάλαιο 4**
Παρουσιάζεται η εύρεση της πρώτης παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Αναπτύσσονται η συζυγής μέθοδος και η μέθοδος ευθείας διαφόρισης.
- **Κεφάλαιο 5**
Παρουσιάζεται η εύρεση της δεύτερης παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Χρησιμοποιούνται οι προσεγγίσεις με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης - ευθείας διαφόρισης και της ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής. Διερευνάται η συνεισφορά των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, στις τιμές της δεύτερης παραγώγου.
- **Κεφάλαιο 5**
Παρουσιάζεται η εύρεση της δεύτερης παραγώγου, ως προς τις μικτές μεταβλητές. Χρησιμοποιείται η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής και διερευνάται η συνεισφορά των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, στις τιμές της μικτής δεύτερης παραγώγου.
- **Κεφάλαιο 6**
Εισάγεται η έννοια της τροποποιημένης συνάρτησης \hat{F} και αναλύονται οι όροι που την αποτελούν. Παρουσιάζεται η εύρεση της τρίτης παραγώγου, ως προς τις μικτές μεταβλητές ($\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$) με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης - ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής. Τέλος, δίνεται ο αλγόριθμος σχεδιασμού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου, χρησιμοποιώντας την παράγωγο $\frac{d\hat{F}}{db_l}$.

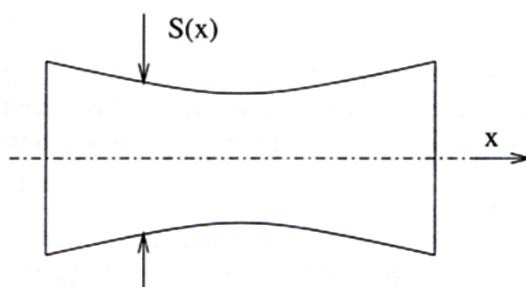
- Κεφάλαιο 7
Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμένων πρώτων, δεύτερων και τρίτων παραγώγων, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση - στόχο $F = \int p dx$ και ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$. Παρουσιάζονται επίσης τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης της συνάρτησης \hat{F} για διάφορες τιμές της σταθεράς k καθώς και το σχηματιζόμενο μέτωπο Pareto.
 - Κεφάλαιο 8
Στο τελευταίο Κεφάλαιο συνοψίζονται τα συμπεράσματα της παρούσας διπλωματικής εργασίας.
-

Κεφάλαιο 2

Αριθμητική Επίλυση Ψευδο - 1D Ροής σε Αγωγό.

2.1 Ευθύ 1D πρόβλημα

Η ενότητα αυτή ασχολείται με τον υπολογισμό της ατφιβούς, συμπιεστής, ψευδο-1D ροής μέσα σε αγωγό. Θεωρείται δηλαδή ότι τα χαρακτηριστικά της ροής μεταβάλλονται μόνο κατά την αξονική κατεύθυνση του αγωγού. Η διατύπωση ως προς τον επιλύτη της ροής βασίζεται στη θεωρία των υπερβολικών συστημάτων, εισάγοντας τον ψευδοχρόνο για χρονικά μόνιμες ροές με σκοπό την ενίσχυση της διαγώνιας κυριαρχίας.



Σχήμα 2.1: Ψεύδο - 1D ροή σε αγωγό.

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

ενώ ο δε στόχος - κατανομής πίεσης ορίζεται συνήθως κατά μήκος (τμήματος) του περιγράμματος της μόνο.

2.2 Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής

Για το 1D πρόβλημα διατυπώνονται οι εξισώσεις (Euler) διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας ως ([3])

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u S)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u S)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u^2 + p)S]}{\partial x} &= p \frac{dS}{dx} \\ \frac{\partial(\rho E S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u H S)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (2.1)$$

όπου ρ η πυκνότητα του ρευστού, u η ταχύτητα, E η ολική ενέργεια ανά μονάδα μάζας του ρευστού και H η ολική ενθαλπία, για τις οποίες ισχύουν οι χρήσιμες σχέσεις από την θερμοδυναμική των τελείων αερίων:

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (2.2)$$

$$E = H - \frac{p}{\rho} \quad (2.3)$$

$$\rho E = \frac{\rho c^2}{\gamma(\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (2.4)$$

$$p = (\gamma - 1) \rho e = (\gamma - 1) \left(\rho E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right) \quad (2.5)$$

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

Οι εξισώσεις της ροής (2.1) μπορούν να διατυπωθούν στην ακόλουθη μορφή (συντηρητική γραφή)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \rho u \\
\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \rho u^2 \\
\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u H)}{\partial x} &= -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \rho u H
\end{aligned} \tag{2.6}$$

ή ακολουθώντας την περισσότερο χρήσιμη διανυσματική γραφή:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = \vec{q} \tag{2.7}$$

όπου \vec{U} το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, \vec{f} το διάνυσμα της ατρισβούς ροής και \vec{q} το διάνυσμα των όρων πηγής που οφείλεται στη μεταβολή της διατομής S κατά μήκος του αγωγού, τα οποία δίνονται από τις σχέσεις

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ m \\ E_t \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

$$\vec{f} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m \\ (\gamma - 1)E_t + \frac{m^2}{\rho} \left(\frac{3-\gamma}{2}\right) \\ \frac{m}{\rho} \left[\gamma E_t - (\gamma - 1)\frac{m^2}{2\rho}\right] \end{bmatrix} \tag{2.9}$$

$$\vec{q} = -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{m}{\rho} \\ \frac{m^2}{\rho} \\ \frac{m}{\rho} \left[\gamma E_t - (\gamma - 1)\frac{m^2}{2\rho}\right] \end{bmatrix} \tag{2.10}$$

Οι εξισώσεις ροής (2.7), χρησιμοποιώντας τον κανόνα της αλυσιδωτής παραγώγισης, ξαναγράφονται ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} = \vec{q} \tag{2.11}$$

όπου A το Ιακωβιανό μητρώο των συντηρητικών μεταβλητών

$$A = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}u^2 & (3-\gamma)u & \gamma-1 \\ -\gamma u E + (\gamma-1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma-1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \tag{2.12}$$

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

Ωστόσο, μας ενδιαφέρει η χρονικά μόνιμη ροή, επομένως απαλείφοντας από την εξίσωση (2.11) το χρονικό όρο και προχωρώντας, στη συνέχεια, σε χωρική διακριτοποίηση θα έχουμε:

$$\vec{R}_i(\vec{U}, \vec{b}) = \left[A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right]_i \Delta x_i - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \quad , \forall i = 2, \dots, np - 1 \quad (2.13)$$

όπου με np συμβολίζουμε τον αριθμό των κόμβων του πλέγματος, ενώ το σύμβολο \vec{R} παριστάνει το υπόλοιπο (residual) της εξίσωσης ροής. Οι οριακές συνθήκες στην είσοδο και την έξοδο γράφονται αντίστοιχα στη συμβολική γραφή (αναλυτικότερα η παρουσίαση τους γίνεται στην ενότητα 2.4):

$$\vec{R}_1 = 0 \quad , \quad \vec{R}_{np} = 0 \quad (2.14)$$

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

Η επίλυση του προβλήματος της ροής γίνεται μέσω δέλτα-διατύπωσης (δ -formulation). Δηλαδή:

$$\left[I \frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right] \delta \vec{U} = -\vec{R} \quad (2.15)$$

όπου, ο ψευδο - χρονικός όρος εισάγεται (παρόλο που η ροή θεωρείται χρονικά μόνιμη) ώστε να εκμεταλλευτούμε τις ιδιότητες των υπερβολικών συστημάτων και να εφαρμοστούν οι τεχνικές χρονοπροέλασης (time-marching) για την επίλυση του πεδίου ροής. Επιπλέον, στην εξίσωση (2.15) τα εμπλεκόμενα διανύσματα είναι:

$$\vec{R} = \left[\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{np-1}, \vec{R}_{np} \right]^T \quad (2.16)$$

$$\delta \vec{U} = \left[\delta \vec{U}_1, \delta \vec{U}_2, \dots, \delta \vec{U}_{np-1}, \delta \vec{U}_{np} \right]^T \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_{np}} \\ \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_{np}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np}} \\ \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_3} & \cdots & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np}} \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

Κατά την επίλυση της διακριτοποιημένης εξίσωσης σε δ-διατύπωση, το δεξί μέλος είναι αυτό που καθορίζει την ακρίβεια. Οπότε μας ενδιαφέρει η διακριτοποίηση του \vec{R} να γίνει με ακρίβεια 2ης τάξης, ώστε να παραχθούν ικανοποιητικά αποτελέσματα. Ωστόσο, και το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ συναντάται στο δεξί μέλος των συζυγών εξισώσεων που θα παρουσιαστούν σε επόμενα κεφάλαια. Ενώ δηλαδή δεν είναι απαραίτητος ο υπολογισμός του με 2ης τάξης ακρίβεια για την επίλυση του προβλήματος της ροής, επιλέγεται αυτή η τάξη ακρίβειας ώστε να παραχθούν σωστότερα αποτελέσματα από τις συζυγείς εξισώσεις (Κεφάλαιο 3).

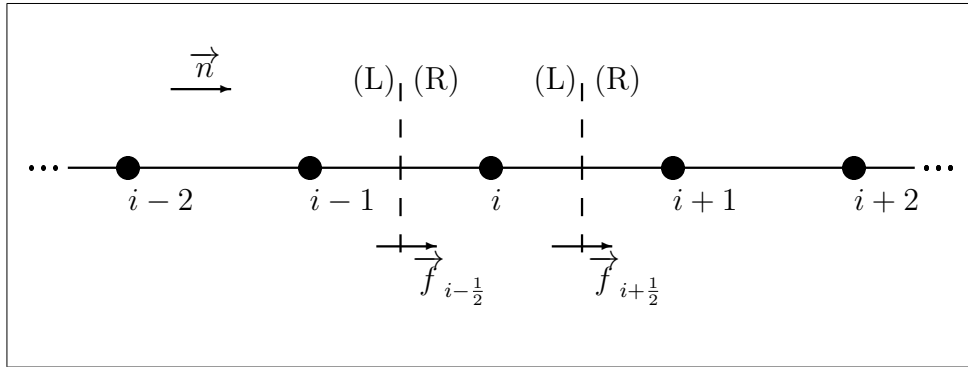
2.3 Επίλυση δ-διατύπωσης με ακρίβεια δεύτερης τάξης

Στην παρούσα ενότητα, θα παρουσιαστεί αναλυτικά η διακριτοποίηση του ευθέως προβλήματος (δηλαδή των εξισώσεων ροής) για δεύτερης τάξης ακρίβεια στους εσωτερικούς κόμβους. Αρχικά χρησιμοποιείται η μέθοδος διαχωρισμού των διανυμάτων ροής (Flux Vector Splitting ή FVS) με σχήμα προεκβολής MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws) για τη διακριτοποίηση του τελεστή ροής \vec{R} , χωρίς όμως να εφαρμοστεί συνάρτηση περιορισμού [5]. Στη συνέχεια, υπολογίζεται το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ με ακρίβεια δεύτερης τάξης, ως αποτέλεσμα της παραγωγίσισης του τελεστή της ροής \vec{R} που προκύπτει από τη μέθοδο FVS.

Μια διαφορετική από την (2.13), έκφραση του διακριτοποιημένου τελεστή της ροής είναι:

$$\vec{R}_i(\vec{U}, \vec{b}) = \left(\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \quad (2.19)$$

και χρησιμοποιώντας τη μέθοδο FVS δεύτερης τάξης ακρίβειας, έχουμε για τα διανύσματα της ροής



Σχήμα 2.2: Διακριτοποίηση δεύτερης τάξης ακρίβειας του διανύσματος της ατριοβούς ροής με τη μέθοδο FVS.

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = \vec{f}^- \left(\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R \right) + \vec{f}^+ \left(\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L \right) \quad (2.20)$$

$$\vec{f}_{i-\frac{1}{2}} = \vec{f}^- \left(\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R \right) + \vec{f}^+ \left(\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L \right) \quad (2.21)$$

$$\mu \in \vec{f}^-(\vec{U}) = A^- \vec{U} \quad , \quad \vec{f}^+(\vec{U}) = A^+ \vec{U} \quad (2.22)$$

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

$$\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L = \vec{U}_i + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i (x_{i+1} - x_i) \quad (2.23)$$

Εφαρμόζοντας κεντρικές διαφορές (2ης τάξης ακρίβεια) για μη ισαπέχοντα Δx (Παράρτημα Α') έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i = d_i^A \vec{U}_{i-1} + d_i^B \vec{U}_i + d_i^C \vec{U}_{i+1} \quad (2.24)$$

όπου ο κάτω δείκτης των συντελεστών d δηλώνει τον κόμβο του πλέγματος στον οποίο γίνεται η παραγωγή, ενώ ο πάνω δείκτης δηλώνει τον όρο τον οποίο πολλαπλασιάζει (σχέσεις (Α'.5), (Α'.6), (Α'.7))

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

$$\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R = \vec{U}_{i+1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i+1} (x_{i+1} - x_i) \quad (2.25)$$

και εφαρμόζοντας κεντρικές διαφορές (2ης τάξης ακρίβεια) θα έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i+1} = d_{i+1}^A \vec{U}_i + d_{i+1}^B \vec{U}_{i+1} + d_{i+1}^C \vec{U}_{i+2} \quad (2.26)$$

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

$$\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R = \vec{U}_i - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i (x_i - x_{i-1}) \quad (2.27)$$

όπου το $\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_i$ υπολογίζεται από τη σχέση (2.24), ενώ

$$\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L = \vec{U}_{i-1} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i-1} (x_i - x_{i-1}) \quad (2.28)$$

και εφαρμόζοντας κεντρικές διαφορές (2ης τάξης ακρίβεια) θα έχουμε:

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_{i-1} = d_{i-1}^A \vec{U}_{i-2} + d_{i-1}^B \vec{U}_{i-1} + d_{i-1}^C \vec{U}_i \quad (2.29)$$

Χρησιμοποιώντας τις ανωτέρω σχέσεις, η εξίσωση (2.20) μετασχηματίζεται σε

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = & f^- \left[\vec{U}_{i+1} - \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)(d_{i+1}^A \vec{U}_i + d_{i+1}^B \vec{U}_{i+1} + d_{i+1}^C \vec{U}_{i+2}) \right] \\ & + f^+ \left[\vec{U}_i + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)(d_i^A \vec{U}_{i-1} + d_i^B \vec{U}_i + d_i^C \vec{U}_{i+1}) \right] \end{aligned} \quad (2.30)$$

και μετά από πράξεις

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = & \left[\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^A A_{i+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{i-1} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^A A_{i+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^B \right) A_{i+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_i \\ & + \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^B \right) A_{i+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^C A_{i+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{i+1} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^C A_{i+\frac{1}{2}}^- \right] \vec{U}_{i+2} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Με τον ίδιο τρόπο, η σχέση (2.21) γράφεται

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i-\frac{1}{2}} = & \left[\frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^A A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{i-2} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^A A_{i-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^B \right) A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{i-1} \\ & + \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^B \right) A_{i-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^C A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_i \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^C A_{i-\frac{1}{2}}^- \right] \vec{U}_{i+1} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Αντικαθιστώντας στη σχέση (2.19) τις εκφράσεις των $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}$ και $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$ από τις σχέσεις (2.31) και (2.32) αντίστοιχα, προκύπτει μια εξίσωση της ακόλουθης μορφής, που θα ισχύει για $\forall i = 3 \dots np - 2$:

$$\begin{aligned} \vec{R}_i(\vec{U}, \vec{b}) &= \left[bbe f_i \vec{U}_{i-2} + be f_i \vec{U}_{i-1} + diag_i \vec{U}_i + aft_i \vec{U}_{i+1} + aaft_i \vec{U}_{i+2} \right] \\ &- \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \end{aligned} \quad (2.33)$$

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

Ο αναγνώστης παραπέμπεται στο Παράρτημα Β' για τον τρόπο εύρεσης των μητρώων A^+ , A^- που συναντώνται στις σχέσεις (2.31) και (2.32). Τα ροϊκά μεγέθη που εμφανίζονται στον υπολογισμό αυτών των μητρώων αντιστοιχούν στο μέσο διάνυσμα του εκάστοτε μεσόκομβου, είναι δηλαδή για τους $A_{i+\frac{1}{2}}^{+/-}$:

$$\vec{U}_{mid} = \frac{\vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^R + \vec{U}_{i+\frac{1}{2}}^L}{2} \quad (2.34)$$

ενώ αντίστοιχα, για τους $A_{i-\frac{1}{2}}^{+/-}$:

$$\vec{U}_{mid} = \frac{\vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^R + \vec{U}_{i-\frac{1}{2}}^L}{2} \quad (2.35)$$

Από τις σχέσεις (2.31) ως (2.35) μπορεί να υπολογισθεί ο τελεστής της ροής \vec{R} . Ωστόσο, για την επίλυση της ροής με δ-διατύπωση είναι απαραίτητη η προσέγγιση και της παραγώγου $\frac{d\vec{R}}{d\vec{U}}$. Διαφορίζοντας τη σχέση (2.33) ως προς τις κομβικές τιμές των \vec{U} και με την παραδοχή ότι

$$\frac{\partial A^+}{\partial \vec{U}} = 0, \quad \frac{\partial A^-}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (2.36)$$

έχουμε για τους κόμβους $i = 3 \dots np - 2$, τα ακόλουθα αποτελέσματα:

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-2}} = b b e f_i = -\frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^A A_{i-\frac{1}{2}}^+ \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i-1}} &= b e f_i \\ &= \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^A A_{i+\frac{1}{2}}^+ \\ &\quad - \left[-\frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^A A_{i-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^B\right) A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_i} &= d i a g_i - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \\ &= -\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^A A_{i+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^B\right) A_{i+\frac{1}{2}}^+ \\ &\quad - \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^B\right) A_{i-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_{i-1}^C A_{i-\frac{1}{2}}^+ \right] \\ &\quad - \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+1}} &= a f t_i \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^B\right) A_{i+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_i^C A_{i+\frac{1}{2}}^+ \\ &\quad + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})d_i^C A_{i-\frac{1}{2}}^- \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_{i+2}} = a a f t_i = -\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)d_{i+1}^C A_{i+\frac{1}{2}}^- \quad (2.41)$$

ενώ ισχύει:

$$\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j \neq i-2, i-1, i, i+1, i+2 \quad (2.42)$$

Τέλος, ο όρος $\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i}$, υπολογίζεται από παραγωγή της εξίσωσης (2.10). Έτσι έχουμε:

$$\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \vec{U}_i} = -\frac{1}{S_i} \left[\frac{dS}{dx} \right]_i \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_i \quad (2.43)$$

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

Αξίζει σε αυτό το σημείο να επισημανθεί ότι είναι δυνατό να υπολογισθεί ο τελεστής \vec{R} από τη σχέση

$$\vec{R}_i(\vec{U}, \vec{b}) = \left(\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{(i-1)+\frac{1}{2}} \right) - \vec{q}_i \Delta x_i = 0 \quad (2.44)$$

αντί της (2.19), αποφεύγοντας δηλαδή τον υπολογισμό του $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$. Ωστόσο εδώ για λόγους πληρότητας έγινε αναλυτική παρουσίαση.

Επίσης, αν οι οριακές συνθήκες $\vec{R}_1 = 0$ και $\vec{R}_{np} = 0$ είναι διακριτοποιημένες με δεύτερης τάξης ακρίβεια και παραγωγιστούν, όπως θα αποδειχθεί και αναλυτικά στην ενότητα (2.4), θα έχουμε:

$$\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad \forall j = 4, \dots, np \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad \forall j = 1, \dots, np - 3 \quad (2.46)$$

Επομένως μένει η απόδειξη των σχέσεων για τους ειδικούς κόμβους $i = 2$ και $i = np - 1$. Για τον κόμβο $i = 2$ δεν υπάρχει προ-προηγούμενος κόμβος, και έτσι η μορφή

του τελεστή της ροής θα είναι

$$\vec{R}_2(\vec{U}, \vec{b}) = \left[bef_2 \vec{U}_1 + diag_2 \vec{U}_2 + aft_2 \vec{U}_3 + aaft_2 \vec{U}_4 \right] - \vec{q}_2 \Delta x_2 = 0 \quad (2.47)$$

Εφαρμόζονται και πάλι οι σχέσεις (2.19) ως (2.22), καθώς και οι σχέσεις (2.23),(2.25), (2.27),(2.28) που δίνουν τα διανύσματα των συντηρητικών μεταβλητών. Ωστόσο δεν είναι δυνατή η χρήση κεντρικών διαφορών για τον υπολογισμό της παραγώγου $\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right)_1$.

Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα χρησιμοποιείται πρόσω παραγωγή 2ης τάξης ακρίβειας, σύμφωνα με τις σχέσεις (A'.12), (A'.13), (A'.14) και έχουμε

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x}\right)_1 = d_1^A \vec{U}_1 + d_1^B \vec{U}_2 + d_1^C \vec{U}_3 \quad (2.48)$$

Αντίστοιχα, στην εφαρμογή των σχέσεων για τον κόμβο $np-1$, το πρόβλημα της μη ύπαρξης του μεθεπόμενου κόμβου εμφανίζεται στον υπολογισμό της παραγωγού $\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x}\right)_{np}$ και αντιμετωπίζεται εφαρμόζοντας πίσω παραγωγή 2ης τάξης ακρίβειας, σύμφωνα με τις σχέσεις (A'.16), (A'.17), (A'.18)

$$\left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial x}\right)_{np} = d_{np}^A \vec{U}_{np} + d_{np}^B \vec{U}_{np-1} + d_{np}^C \vec{U}_{np-2} \quad (2.49)$$

οδηγώντας στη διατύπωση του τελεστή της ροής, στη μορφή

$$\begin{aligned} \vec{R}_{np-1} &= \left[bbe_{f_{np-1}} \vec{U}_{np-3} + be_{f_{np-1}} \vec{U}_{np-2} + diag_{np-1} \vec{U}_{np-1} + aft_{np-1} \vec{U}_{np} \right] \\ &- \vec{q}_{np-1} \Delta x_{np-1} = 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

Εφαρμόζοντας τις ανωτέρω εξισώσεις καταλήγουμε στις ακόλουθες εκφράσεις των παραγωγών

Κόμβος $i = 2$:

Η εξίσωση για το $\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}$ είναι η (2.31) και γραμμένη στο συγκεκριμένο κόμβο δίνει

$$\begin{aligned} \vec{f}_{2+\frac{1}{2}} &= \left[\frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_2^A A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_1 \\ &+ \left[-\frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_3^A A_{2+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_2^B \right) A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_2 \\ &+ \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_3^B \right) A_{2+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_2^C A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_3 \\ &+ \left[-\frac{1}{2}(x_3 - x_2) d_3^C A_{2+\frac{1}{2}}^- \right] \vec{U}_4 \end{aligned} \quad (2.51)$$

ενώ για το $\vec{f}_{2-\frac{1}{2}}$, χρησιμοποιώντας την σχέση (2.48) αντι της (2.29) καταλήγουμε

$$\begin{aligned}
\vec{f}_{2-\frac{1}{2}} &= \left[-\frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^A A_{2-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^A\right) A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_1 \\
&+ \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^B\right) A_{2-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^B A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_2 \\
&+ \left[-\frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^C A_{2-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^C A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_3
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Αντικαθιστώντας τις (2.51) και (2.52) στην (2.19) και παραγωγίζοντας ως προς \vec{U} έχουμε

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} &= bef_2 \\
&= \left[\frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_2^A A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \\
&- \left[-\frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^A A_{2-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^A\right) A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right]
\end{aligned} \tag{2.53}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} &= diag_2 - \frac{\partial \vec{q}_2}{\partial \vec{U}_2} \Delta x_2 \\
&= \left[-\frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_3^A A_{2+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_2^B\right) A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \\
&- \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^B\right) A_{2-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^A A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right] \\
&- \frac{\partial \vec{q}_2}{\partial \vec{U}_2} \Delta x_2
\end{aligned} \tag{2.54}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} &= aft_2 \\
&= \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_3^B\right) A_{2+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_2^C A_{2+\frac{1}{2}}^+ \right] \\
&- \left[-\frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_2^C A_{2-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_2 - x_1)d_1^C A_{2-\frac{1}{2}}^+ \right]
\end{aligned} \tag{2.55}$$

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_4} = aaf t_2 = -\frac{1}{2}(x_3 - x_2)d_3^C A_{2+\frac{1}{2}}^- \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_j} = 0 \quad , \quad j > 4 \quad (2.57)$$

Κόμβος $np - 1$:

Για το $\vec{f}_{(np-1)+\frac{1}{2}}$, χρησιμοποιώντας την σχέση (2.49) αντί της (2.26) έχουμε

$$\begin{aligned} \vec{f}_{(np-1)+\frac{1}{2}} = & \left[-\frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^C A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^A A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np-2} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^B A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^B \right) A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np-1} \\ & + \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^A \right) A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^C A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np} \end{aligned} \quad (2.58)$$

ενώ το $\vec{f}_{i-\frac{1}{2}}$ δίνεται από τη σχέση (2.32), και για το συγκεκριμένο i δίνει

$$\begin{aligned} \vec{f}_{(np-1)-\frac{1}{2}} = & \left[\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^A A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np-3} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^A A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^B \right) A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np-2} \\ & + \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^B \right) A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^C A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \right] \vec{U}_{np-1} \\ & + \left[-\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^C A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- \right] \vec{U}_{np} \end{aligned} \quad (2.59)$$

Αντικαθιστώντας τις (2.58) και (2.59) στην (2.19) και παραγωγίζοντας ως προς \vec{U} έχουμε

$$\frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-3}} = b b e f_{np-1} = -\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^A A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-2}} &= b e f_{np-1} \\ &= \left[-\frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^C A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^A A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \\ &\quad - \left[-\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^A A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^B \right) A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \right] \end{aligned} \quad (2.61)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-1}} &= \text{diag}_{np-1} - \frac{\partial \vec{q}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-1}} \Delta x_{np-1} \\ &= \left[-\frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^B A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \left(1 + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^B \right) A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \\ &\quad - \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^B \right) A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-2}^C A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^+ \right] \\ &\quad - \frac{\partial \vec{q}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-1}} \Delta x_{np-1} \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np}} &= a f t_{np-1} \\ &= \left[\left(1 - \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np}^A \right) A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^- + \frac{1}{2}(x_{np} - x_{np-1})d_{np-1}^C A_{(np-1)+\frac{1}{2}}^+ \right] \\ &\quad - \left[-\frac{1}{2}(x_{np-1} - x_{np-2})d_{np-1}^C A_{(np-1)-\frac{1}{2}}^- \right] \end{aligned} \quad (2.63)$$

Συμπερασματικά, το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι πενταδιαγώνιο, με κάθε στοιχείο του να αποτελείται από ένα πίνακα 3×3 . Η μορφή του μητρώου δίνεται παρακάτω:

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_2}{\partial \vec{U}_4} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_1} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_4} & \frac{\partial \vec{R}_3}{\partial \vec{U}_5} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_2} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_3} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_4} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_5} & \frac{\partial \vec{R}_4}{\partial \vec{U}_6} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-3}} & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-2}} & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np-1}} & \frac{\partial \vec{R}_{np-1}}{\partial \vec{U}_{np}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np-2}} & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np-1}} & \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np}} \end{bmatrix}$$

2.4 Οριακές συνθήκες

Σκοπός της παρούσας ενότητας, είναι η περιγραφή του τρόπου επιβολής των οριακών συνθηκών στο πρόβλημα της ροής και η παραγωγή τους ως προς τις μεταβλητές της ροής. Για υποχημητική ροή, οι οριακές συνθήκες στην είσοδο:

$$p_{t1} = const_1 \quad (2.64)$$

$$T_{t1} = const_2 \quad (2.65)$$

$$\left(\frac{dp}{dx}\right)_1 = 0 \quad (2.66)$$

ενώ για την έξοδο:

$$p_{np} = \frac{p_{t1}}{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}} = const_3 \quad (2.67)$$

$$\left(\frac{d\rho}{dx}\right)_{np} = 0 \quad (2.68)$$

$$\left(\frac{d(\rho u)}{dx}\right)_{np} = 0 \quad (2.69)$$

Όπως είναι εμφανές από τις παραπάνω εξισώσεις, στην είσοδο καθορίζονται από το χρήστη σταθερές τιμές στα ολικά θερμοδυναμικά μεγέθη της ροής (p_t, T_t), ενώ στην έξοδο έχουμε σταθερή τιμή της στατικής πίεσης, η οποία καθορίζεται από τον αριθμό $M_{is(out)}$ και την ολική πίεση την είσοδο, μιας και πρόκειται για ισεντροπική ροή (εξισώσεις Euler). Επιπλέον, επειδή η μορφολογία του αγωγού που αντιμετωπίζεται, στο πλαίσιο της διπλωματικής αυτής, διαθέτει σταθερής διατομής S τμήματα στην είσοδο και την έξοδο, επιβάλλονται οριακές συνθήκες τύπου Neumann για τη στατική πίεση (είσοδος) καθώς και για την πυκνότητα και τη ταχύτητα (έξοδος). Πιο αναλυτικά, για την είσοδο ισχύει $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$, ενώ για την έξοδο $\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0$. Η διακριτοποίηση των Neumann οριακών συνθηκών γίνεται με μονόπλευρες εκφράσεις, σύμφωνα με το Παράρτημα Α'

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν συνοπτικά να γραφούν μέσω του τελεστή ροής. Πιο συγκεκριμένα για τον πρώτο κόμβο θα έχουμε

$$\vec{R}_1 = [p_{t1} - const_1, T_{t1} - const_2, d_1^A p_1 + d_1^B p_2 + d_1^C p_3] \quad (2.70)$$

ενώ για τον τελευταίο κόμβο θα έχουμε

$$\vec{R}_{np} = [p_{np} - const_3, d_{np}^C \rho_{np-2} + d_{np}^B \rho_{np-1} + d_{np}^C \rho_{np}, d_{np}^C (\rho u)_{np-2} + d_{np}^B (\rho u)_{np-1} + d_{np}^A (\rho u)_{np}] \quad (2.71)$$

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

Πιο αναλυτικά, χρησιμοποιώντας τη δέλτα-διατύπωση, έχουμε για τον πρώτο και τον τελευταίο κόμβο τις εξής εξισώσεις, που προκύπτουν ύστερα από πράξεις πινάκων (σχέση (2.15) αγνοώντας τον ψευδο-χρονικό όρο):

$$\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_{np-1}} \delta \vec{U}_{np-1} + \frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_{np}} \delta \vec{U}_{np} = -\vec{R}_1 \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + \dots + \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np-1}} \delta \vec{U}_{np-1} + \frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_{np}} \delta \vec{U}_{np} = -\vec{R}_{np} \quad (2.73)$$

Ωστόσο, όπως είναι φανερό από την (2.70), στην είσοδο υπάρχουν μεγέθη που εξαρτώνται από τις μεταβλητές της ροής μόνο των τριών πρώτων κόμβων. Αντίστοιχα από την (2.71) γίνεται φανερό ότι υπάρχει εξάρτηση μόνο από τους τρεις τελευταίους κόμβους. Δηλαδή, μας ενδιαφέρει να υπολογιστούν μόνο οι όροι $\frac{\partial \vec{R}_1}{\partial \vec{U}_j}$ για $j = 1, 2, 3$ και $\frac{\partial \vec{R}_{np}}{\partial \vec{U}_j}$ για $j = np - 2, np - 1, np$ ενώ οι μερικές παράγωγοι ως προς τα υπόλοιπα διανύσματα της ροής είναι μηδενικές.

Κατά τον υπολογισμό των παραπάνω μερικών παραγώγων, χρήσιμες είναι οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\begin{aligned} p &= (\gamma - 1) \left[\rho E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right] = (\gamma - 1) \left[E_t - \frac{1}{2} \frac{m^2}{\rho} \right] \\ \frac{\partial p}{\partial \rho} &= \frac{\gamma - 1}{2} u^2 \\ \frac{\partial p}{\partial m} &= -(\gamma - 1) u \\ \frac{\partial p}{\partial E_t} &= \gamma - 1 \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$\begin{aligned}
T &= \frac{p}{\rho R} = \frac{\gamma - 1}{R} \left[\frac{E_t}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{m^2}{\rho^2} \right] \\
\frac{\partial T}{\partial \rho} &= \frac{\gamma - 1}{R} \left[-\frac{E}{\rho} + \frac{u^2}{\rho} \right] \\
\frac{\partial T}{\partial m} &= -\frac{\gamma - 1}{R} \frac{u}{\rho} \\
\frac{\partial T}{\partial E_t} &= \frac{\gamma - 1}{\rho R}
\end{aligned} \tag{2.75}$$

$$\begin{aligned}
T_t &= T + \frac{u^2}{2cp} = \frac{p}{\rho R} + \frac{u^2}{2cp} = \frac{p}{\rho R} + \frac{\gamma - 1}{2\gamma R} \frac{m^2}{\rho^2} \\
\frac{\partial T_t}{\partial \rho} &= -\frac{\gamma - 1}{R} \frac{E}{\rho} + \frac{(\gamma - 1)^2}{\gamma R} \frac{u^2}{\rho} \\
\frac{\partial T_t}{\partial m} &= -\frac{(\gamma - 1)^2}{\gamma R} \frac{u}{\rho} \\
\frac{\partial T_t}{\partial E_t} &= \frac{\gamma - 1}{\rho R}
\end{aligned} \tag{2.76}$$

$$\begin{aligned}
p_t &= p \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \\
\frac{\partial p_t}{\partial \rho} &= \frac{\partial p}{\partial \rho} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + p \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial \rho} T - T_t \frac{\partial T}{\partial \rho}}{T^2} \\
\frac{\partial p_t}{\partial m} &= \frac{\partial p}{\partial m} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + p \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial m} T - T_t \frac{\partial T}{\partial m}}{T^2} \\
\frac{\partial p_t}{\partial E_t} &= \frac{\partial p}{\partial E_t} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + p \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial E_t} T - T_t \frac{\partial T}{\partial E_t}}{T^2}
\end{aligned} \tag{2.77}$$

Αν ο τελεστής του υπολοίπου της ροής γραφεί στη μορφή $\vec{R}_1 = [R_1^1, R_1^2, R_1^3]$ τότε έχουμε

$$\frac{\partial R_1^1}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 = -R_1^1 \Rightarrow \left[\frac{\partial p_t}{\partial \rho}, \frac{\partial p_t}{\partial m}, \frac{\partial p_t}{\partial E_t} \right]_1 \delta \vec{U}_1 = -[p_t - const_1]_1 \tag{2.78}$$

$$\text{και : } \frac{\partial R_1^1}{\partial \vec{U}_2} = \frac{\partial R_1^1}{\partial \vec{U}_3} = [0, 0, 0]$$

$$\frac{\partial R_1^2}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 = -R_1^2 \Rightarrow \left[\frac{\partial T_t}{\partial \rho}, \frac{\partial T_t}{\partial m}, \frac{\partial T_t}{\partial E_t} \right]_1 \delta \vec{U}_1 = -[T_t - const_2]_1 \quad (2.79)$$

$$\text{και : } \frac{\partial R_1^2}{\partial \vec{U}_2} = \frac{\partial R_1^2}{\partial \vec{U}_3} = [0, 0, 0]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_1^3}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + \frac{\partial R_1^3}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + \frac{\partial R_1^3}{\partial \vec{U}_3} \delta \vec{U}_3 &= -R_1^3 \Rightarrow \\ d_1^A \frac{\partial p_1}{\partial \vec{U}_1} \delta \vec{U}_1 + d_1^B \frac{\partial p_2}{\partial \vec{U}_2} \delta \vec{U}_2 + d_1^C \frac{\partial p_3}{\partial \vec{U}_3} \delta \vec{U}_3 &= -(d_1^A p_1 + d_1^B p_2 + d_1^C p_3) \Rightarrow \end{aligned} \quad (2.80)$$

Ανάλογη είναι και η διαδικασία που ακολουθείται για τις οριακές συνθήκες στην έξοδο του αγωγού. Υπενθυμίζεται ότι όσον αφορά τον τελεστή ροής του τελευταίου κόμβου έχουμε $\vec{R}_{np} = [R_{np}^1, R_{np}^2, R_{np}^3]$. Επομένως:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{np}^1}{\partial \vec{U}_{np}} \delta \vec{U}_{np} &= -R_{np}^1 \Rightarrow \\ (\gamma - 1) \left[\frac{1}{2} u^2, -u, 1 \right]_{np} \delta \vec{U}_{np} &= -[p - const_3]_{np} \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\text{και } \frac{\partial R_{np}^1}{\partial \vec{U}_{np-1}} = \frac{\partial R_{np}^1}{\partial \vec{U}_{np-2}} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{np}^2}{\partial \vec{U}_{np-2}} \delta \vec{U}_{np-2} + \frac{\partial R_{np}^2}{\partial \vec{U}_{np-1}} \delta \vec{U}_{np-1} + \frac{\partial R_{np}^2}{\partial \vec{U}_{np}} \delta \vec{U}_{np} &= -R_{np}^2 \Rightarrow \\ [d_{np}^C, 0, 0] \delta \vec{U}_{np-2} + [d_{np}^B, 0, 0] \delta \vec{U}_{np-1} + [d_{np}^A, 0, 0] \delta \vec{U}_{np} &= \\ - (d_{np}^C \rho_{np-2} + d_{np}^B \rho_{np-1} + d_{np}^A \rho_{np}) & \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{np}^3}{\partial \vec{U}_{np-2}} \delta \vec{U}_{np-2} + \frac{\partial R_{np}^3}{\partial \vec{U}_{np-1}} \delta \vec{U}_{np-1} + \frac{\partial R_{np}^3}{\partial \vec{U}_{np}} \delta \vec{U}_{np} &= -R_{np}^3 \Rightarrow \\ [0, d_{np}^C, 0] \delta \vec{U}_{np-2} + [0, d_{np}^B, 0] \delta \vec{U}_{np-1} + [0, d_{np}^A, 0] \delta \vec{U}_{np} &= \\ - [d_{np}^C (\rho u)_{np-2} + d_{np}^B (\rho u)_{np-1} + d_{np}^A (\rho u)_{np}] & \end{aligned} \quad (2.83)$$

2.5 Επιλύτης ευθέος προβλήματος

Όπως ήδη τονίστηκε παραπάνω, σκοπός του ευθέος προβλήματος είναι η επίλυση της εξίσωσης (2.15) με την τεχνική της χρονοπροέλασης. Σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν, ο τελεστής ροής \vec{R} και η παράγωγος του ως προς το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ διακριτοποιούνται με 2ης τάξης ακρίβεια έπειτα από ολοκλήρωση σε όγκους αναφοράς.

Η διακριτοποίηση αυτή οδηγεί σε πενταδιαγώνιο σύστημα, κάθε στοιχείου του οποίου είναι 3×3 μητρώο (μπλοκ). Η επίλυση του μπλοκ-πενταδιαγώνιου συστήματος γίνεται χρησιμοποιώντας τον τροποποιημένο αλγόριθμο Thomas, ο οποίος μπορεί να διαχειρίζεται, αντί για βαθμωτά μεγέθη, υποπίνακες 3×3 . Αυτό επιτυγχάνεται με διάσπαση των υποπινάκων με διάσταση 3×3 σε πάνω και κάτω τριδιαγώνια μητρώα. (παραγοντοποίηση LU).

Άρα δημιουργείται ένας επαναληπτικός αλγόριθμος με επαναλήψεις ή ορθότερα ψευδο-χρονικά βήματα, όπου για κάθε ψευδοχρονική στιγμή οι διακριτοποιημένες εξισώσεις επιλύονται επακριβώς. Η ακριβής επίλυση ανά ψευδο-χρονικό βήμα, αποτελεί πλεονέκτημα του $1 - D$ προβλήματος.

Ο επαναληπτικός αλγόριθμος επίλυσης του προβλήματος της ροής δίνεται παρακάτω :

- Βήμα 1:
Γίνεται αρχικοποίηση του διανύσματος των συντηρητικών μεταβλητών της ροής, \vec{U} , για κάθε κόμβο του πλέγματος. Για την αρχικοποίηση, η ροή μπορεί να θεωρηθεί ισοεντροπική και ασυμπίεστη και άρα να δοθούν αρχικές τιμές στις κομβικές τιμές του \vec{U} .
- Βήμα 2:
Με το υπάρχον διάνυσμα \vec{U} υπολογίζεται το μητρώο του υπολοίπου \vec{R} , όπως παρουσιάστηκε στις ενότητες 2.3 και 2.4. Έπειτα αθροίζονται όλα τα στοιχεία του \vec{R} (Residual) και το αποτέλεσμα συγκρίνεται με το κριτήριο σύγκλισης που έχει δώσει ο χρήστης. Αν το αποτέλεσμα είναι ικανοποιητικό, ο αλγόριθμος σταματά εδώ. (Η τιμή του κριτηρίου σύγκλισης είναι ιδιαίτερα μικρή, μιας και θεωρητικά, όταν ο αλγόριθμος συγκλίνει έχουμε $\vec{R} = 0$).
- Βήμα 3:
Υπολογίζεται το μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ με δεύτερης τάξης ακρίβεια, σύμφωνα με τις ενότητες 2.3 και 2.4.
- Βήμα 4:
Χρησιμοποιώντας τον τροποποιημένο αλγόριθμο του Thomas, λύνεται το πενταδιαγώνιο σύστημα (2.15) με ψευδοχρονικό όρο, η τιμή του οποίου καθορίζεται από το χρήστη, και υπολογίζεται το μητρώο $\delta \vec{U}$.

- Βήμα 5:
Γίνεται η ανανέωση του διανύσματος των συντηρητικών μεταβλητών σύμφωνα με τη σχέση $\vec{U}^{k+1} = \vec{U}^k + \delta\vec{U}^k$, όπου k η επανάληψη του αλγόριθμου.
 - Βήμα 6:
Επιστροφή στο Βήμα 2.
-

Κεφάλαιο 3

Υπολογισμός 1ης και 2ης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού

3.1 Εισαγωγικά Σχόλια

Στο κεφάλαιο αυτό επιχειρείται μια σύντομη παρουσίαση των μεθόδων υπολογισμού της πρώτης και δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Πρέπει να αναφερθεί ότι ένα μεγάλο μέρος του αντίστοιχου κώδικα προϋπήρχε από προηγούμενες διπλωματικές εργασίες [1]. Σκοπός της ένταξης του αντίστοιχου κεφαλαίου στην παρούσα διπλωματική εργασία ήταν η εξοικείωση με τις διάφορες μεθόδους βελτιστοποίησης και η απόκτηση εμπειρίας η οποία χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση των παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τις οριακές συνθήκες, κάτι που αποτελεί και τον κύριο σκοπό της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Στο παρόν κεφάλαιο έγιναν οι εξής βελτιώσεις σε σχέση με το προϋπάρχον στο ΕΘΣ/ΕΜΠ λογισμικό:

- Χρήση δεύτερης τάξης ακρίβειας για όλες τις διακριτοποιημένες εκφράσεις.
- Χρήση εκφράσεων πεπερασμένων διαφορών για μη - ισαπέχοντες κόμβους.
- Εύρεση παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής και διερεύνηση της συνεισφοράς τους στις τιμές των παραγώγων της συνάρτησης στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.
- Μείωση των απαιτήσεων μνήμης.

3.2 Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού

3.2.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο θα αναπτυχθούν τρεις μέθοδοι υπολογισμού της πρώτης παραγώγου. Οι μέθοδοι και το υπολογιστικό κόστος της κάθε μιας (σε αντίστοιχες επιλύσεις των εξισώσεων ροής) φαίνονται στον ακόλουθο πίνακα, με N τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού. Η απόδειξη για το κόστος των μεθόδων γίνεται στις ενότητες που παρουσιάζεται η εκάστοτε μέθοδος.

Μέθοδος	Υπολογιστικό κόστος
Διακριτή Συζυγής (Discrete Adjoint)	2
Ευθεία Διαφόριση (Direct Differentiation)	$N + 1$
Πεπερασμένες Διαφορές (Finite Differences)	$2N + 1$

Πίνακας 3.1: Υπολογιστικό κόστος εύρεσης της τιμής της συνάρτησης F καθώς και της πρώτης παραγώγου της.

Από τα παραπάνω είναι εμφανές ότι η συζυγής μέθοδος είναι σαφώς ταχύτερη των άλλων δυο. Ωστόσο είναι χρήσιμη η ανάπτυξη της μεθόδου ευθείας διαφόρισης μιας και θα χρησιμοποιηθεί για την εύρεση της δεύτερης και της μικτής τρίτης παραγώγου σε επόμενο κεφάλαιο. Επίσης η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών παρά το μεγάλο υπολογιστικό της κόστος, είναι εύκολη στον προγραμματισμό και μπορεί να λειτουργήσει ως μια αξιόπιστη βάση σύγκρισης για τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από τις άλλες δυο μεθόδους.

3.2.2 Υπολογισμός 1ης παραγώγου με ευθεία διαφόριση

Όπως είναι γνωστό από το Κεφάλαιο 1, η F εξαρτάται από δύο διανύσματα μεταβλητών, αφενός μεν από αυτό που καθορίζει τη μορφή του αγωγού (\vec{b}), αφετέρου δε από το διαμορφούμενο πεδίο ροής (\vec{U}). Άρα η μεταβολή της σχέσης (1.7) θα υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο:

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

Συνεπώς, η πρώτη παράγωγος προκύπτει από τη σχέση:

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

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

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = \int p(x) \frac{\partial(dx)}{\partial \vec{b}} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} = \int \frac{\partial p}{\partial \vec{U}} dx \Rightarrow$$

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}_i} = \frac{\partial p}{\partial \vec{U}_i} \Delta x_i \quad (3.3)$$

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

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

Ωστόσο, εδώ $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = 0$ (σχέση 3.2), μιας και επιλέχθηκε σταθερή κατανομή κόμβων στον άξονα x για όλα τα βήματα της βελτιστοποίησης.

Επομένως, για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης (direct differentiation), απαιτείται ο υπολογισμός της παραγώγου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, που είναι ένα μητρώο $np \times N$, όπου N ο αριθμός των σημείων ελέγχου της γεωμετρίας και np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

Όπως και με τη συνάρτηση F , ο τελεστής ροής \vec{R} εξαρτάται από τα διανύσματα \vec{b} και \vec{U} , οπότε η συνολική μεταβολή ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού θα είναι

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

Η σχέση (3.5) προκύπτει από την απαίτηση ικανοποίησης των εξισώσεων της ροής έπειτα από τη μεταβολή της γεωμετρίας κατά $d\vec{b}$. Έτσι έχουμε $\vec{R} + \frac{d\vec{R}}{d\vec{b}} d\vec{b} = 0$. Όμως αφού $\vec{R} = 0$ πρέπει και $\frac{d\vec{R}}{d\vec{b}} = 0$.

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

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right] \left[\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \right] = - \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right] \quad (3.6)$$

όπου ο όρος $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ έχει υπολογιστεί από το κεφάλαιο 1. Επομένως αρκεί να υπολογιστεί ο όρος $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί για τον τελεστή ροής \vec{R} ισχύει η σχέση (2.13). Διαφορίζοντας ως προς \vec{b} έχουμε

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]_i = - \left[\frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}} \right]_i \Delta x_i$$

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]_i = \frac{\partial}{\partial \vec{b}} \left(\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right)_i \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_i \Delta x_i$$

και τελικά

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right]_i = \left[\frac{1}{S} \frac{d}{d\vec{b}} \left(\frac{dS}{dx} \right) - \frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{d\vec{b}} \right]_i \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_i \Delta x_i, \quad \forall i = 1, \dots, np \quad (3.7)$$

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

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial R_1}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial R_1}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial R_1}{\partial b_N} \right] \\ \left[\frac{\partial R_2}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial R_2}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial R_2}{\partial b_N} \right] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[\frac{\partial R_{np}}{\partial b_1} \right] & \left[\frac{\partial R_{np}}{\partial b_2} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial R_{np}}{\partial b_N} \right] \end{bmatrix}$$

Ωστόσο, από τη σχέση (3.7) κρίνεται απαραίτητο να αναφερθούν κάποιες γενικές σχέσεις που προκύπτουν από τη παραμετροποίηση της γεωμετρίας του αγωγού. Στην παρούσα εργασία, η παραμετροποίηση έγινε με πολυώνυμο Bezier, αν και μπορεί εύκολα να γενικευτεί σε άλλους τρόπους παραμετροποίησης [2]. Γνωρίζουμε ότι:

$$S(t) = \sum_{i=1}^N B_i(t) b_i \quad (3.8)$$

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

$$B_i(t) = [m_{i,0}, m_{i,1}, \dots, m_{i,N}] \begin{bmatrix} t^0 \\ t^1 \\ \vdots \\ t^N \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

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

$$m_{i,j} = (-1)^{j-1} \binom{N}{j} \binom{j}{i} \quad (3.10)$$

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

Άρα από την έκφραση (3.8) προκύπτει ότι:

$$\frac{dS(t)}{dx} = \sum_{a=1}^N \frac{dB_a(t)}{dx} b_a, \quad \frac{dS(t)}{db_a} = B_a(t), \quad \frac{d}{db_a} \left[\frac{dS(t)}{dx} \right] = \frac{dB_a(t)}{dx} \quad (3.11)$$

Επομένως, γνωρίζοντας το $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ από την επίλυση του ροϊκού προβλήματος (2.15) και χρησιμοποιώντας την σχέση (3.7) υπολογίζεται το $\frac{d\vec{U}}{db}$ με την επίλυση συστήματος εξισώσεων (σχέση 3.6) πενταδιαγώνιας μορφής (δεύτερης τάξης ακρίβεια μητρώο $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$). Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3.2 έως 3.4) υπολογίζεται η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου (σχέση 3.1). Σημειώνεται ότι η ευθεία διαφόριση δίνει "ακριβείς παραγώγους" με την έννοια ότι αυτές είναι **απόλυτα συμβατές** με την ακρίβεια διακριτοποίησης των εξισώσεων ροής. Με απλά λόγια, οποιοδήποτε αριθμητικό σφάλμα εμφανίζεται στην επίλυση των εξισώσεων ροής, το ίδιο σφάλμα μεταφέρεται και στις παραγώγους. Επειδή όμως θεωρείται αποδεκτή η επίλυση του πεδίου ροής θεωρούνται "ακριβείς" (ορθότερα συμβατές) και οι παράγωγοι από την ευθεία διαφόριση.

Το υπολογιστικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου σε ένα βήμα βελτιστοποίησης μπορεί να υπολογισθεί από τα επόμενα:

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

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}_{(np \times np)} \begin{bmatrix} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \end{bmatrix}_{(np \times N)} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \end{bmatrix}_{(np \times N)} \quad (3.12)$$

Στη συνέχεια από το παραπάνω μητρώο και τη σχέση 3.1 υπολογίζεται η ολική παράγωγος. Βλέπουμε συνεπώς πως το συνολικό κόστος για την εφαρμογή της μεθόδου είναι N λύσεις συστημάτων $np \times np$ για τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ (σχέση 3.12) και μια λύση συστήματος $np \times np$ για τις εξισώσεις ροής (σχέση 2.7)

3.2.3 Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη συζυγή μέθοδο

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

Κεντρική ιδέα της συζυγούς τεχνικής είναι η επαύξηση της συνάρτησης - στόχου με μια κατάλληλη ποσότητα με σκοπό την αποφυγή υπολογισμού του όρου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, ο οποίος έχει και το μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Η επαυξημένη συνάρτηση ορίζεται ως:

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

όπου $\vec{\psi}$ είναι το διάνυσμα των συζυγών μεταβλητών. Παρατηρούμε ότι $\frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} = \frac{dF}{d\vec{b}}$ μιας και $\frac{d\vec{R}}{d\vec{b}} = 0$ από (σχέση 3.5). Αντικαθιστώντας τις $\frac{dF}{d\vec{b}}$ και $\frac{d\vec{R}}{d\vec{b}}$ από τις σχέσεις (3.1) και (3.5) αντίστοιχα έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} &= \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \right) + \vec{\psi}^T \left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \right) \Rightarrow \\ \frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} &= \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Όπως τονίσθηκε προηγουμένως σκοπός είναι η αποφυγή εύρεσης του υπολογιστικά ακριβούς όρου $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$. Αυτό επιτυγχάνεται θέτοντας τον πολλαπλασιαστή αυτού του όρου στην εξίσωση (3.13) ίσο με το μηδέν. Έτσι οδηγούμαστε στη διατύπωση της συζυγούς εξίσωσης από την οποία και υπολογίζεται η συζυγής μεταβλητή:

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (3.14)$$

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

$$\frac{dF_{aug}}{d\vec{b}} = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} + \vec{\psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (3.15)$$

ενώ το πεδίο των $\vec{\psi}$, το οποίο ονομάζεται πλέον πεδίο των συζυγών μεταβλητών, προκύπτει από τη λύση της συζυγούς εξίσωσης (3.14):

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \vec{\psi} = - \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (3.16)$$

η οποία είναι γραμμική ως προς $\vec{\psi}$, αφού το μητρώο $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T$ δεν συναρτάται του $\vec{\psi}$.

Το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου προκύπτει από την εξίσωση (3.16) :

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]_{(np \times np)}^T \vec{\psi}_{(np \times M)} = - \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]_{(np \times M)}^T \quad (3.17)$$

όπου M ο αριθμός των στόχων της βελτιστοποίησης (στην περίπτωση μας $M = 1$). Συνεπώς το συνολικό κόστος της μεθόδου ανά βήμα βελτιστοποίησης είναι M συστήματα $np \times np$ για τη συζυγή εξίσωση (3.17) συν ένα σύστημα $np \times np$ για την επίλυση

των εξισώσεων της ροής (2.7). Στην περίπτωση μας λοιπόν απαιτούνται δυο λύσεις συστημάτων $np \times np$. Συγκρίνοντας το κόστος αυτό με το κόστος της μεθόδου ευθείας διαφόρισης παρατηρούμε το μεγάλο πλεονέκτημα της συζυγούς μεθόδου: το κόστος εκτέλεσης της μεθόδου είναι πρακτικά **ανεξάρτητο** από τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού. Αν λάβουμε επίσης υπόψη ότι στα προβλήματα αεροδυναμικής ο αριθμός των στόχων (λ.χ. $M = 1 \div 3$) είναι πολύ μικρότερος του αριθμού των σημείων σχεδιασμού έχουμε μια ξεκάθαρη υπεροχή της συζυγούς μεθόδου.

3.2.4 Υπολογισμός 1ης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται μια σύντομη περιγραφή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών. Όπως έχει αναφερθεί η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών έχει μεγάλο υπολογιστικό κόστος αλλά είναι εύκολη στον προγραμματισμό, κάτι που την καθιστά μια καλή βάση σύγκρισης των αποτελεσμάτων που έχουν προκύψει είτε με την συζυγή μέθοδο είτε με την μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.

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

$$\frac{dF}{db_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i - \epsilon, \dots, b_N)}{2\epsilon} \quad (3.18)$$

όπου ϵ σταθερά μικρής τιμής, που καθορίζει ο χρήστης. Η εξίσωση (4.12) πρέπει να εφαρμοστεί N φορές (για τις N τιμές του δείκτη i) για κάθε βήμα της βελτιστοποίησης. Έτσι, το υπολογιστικό κόστος εύρεσης του μητρώου της ολικής παραγώγου είναι $2N$ συστήματα $np \times np$, των εξισώσεων ροής (2.7). Πέρα από το μεγάλο υπολογιστικό κόστος της μεθόδου ένα επιπλέον μειονέκτημα είναι η ευαισθησία του αποτελέσματος στη τιμή της ποσότητας ϵ .

3.3 Υπολογισμός Δεύτερης Παραγώγου ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού

3.3.1 Εισαγωγή

Στην προηγούμενη ενότητα, παρουσιάστηκε ο υπολογισμός της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης στόχου και αναφέρθηκαν τα πλεονεκτήματα της διακριτής συζυγούς μεθόδου έναντι των άλλων, από πλευράς υπολογιστικού κόστους.

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

Ωστόσο, στην παρούσα διπλωματική εργασία, θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στη μέθοδο ευθείας διαφορίσης για τον υπολογισμό των δεύτερων παραγώγων, έχοντας γνωστή την πρώτη παράγωγο επίσης από την μέθοδο της ευθείας διαφορίσης. Η μέθοδος αυτή, παρουσιάζεται εκτενέστερα μιας και εφαρμόζεται για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου των μεταβλητών της ροής, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές ($\frac{d^2 U}{dc_i dc_j}$), όρος που συναντάται στον υπολογισμό της τρίτης (μικτής) παραγώγου ($\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$), όπως θα γίνει εμφανές στο Κεφάλαιο 7. Ωστόσο πρέπει να τονισθεί ότι αν σκοπός είναι η εύρεση μόνο της δεύτερης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, τότε η οικονομικότερη, από πλευράς υπολογιστικού κόστους, μέθοδος, προκύπτει υπολογίζοντας την $\frac{dF}{db_i}$ με ευθεία διαφορίση και στη συνέχεια την $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ με τη συζυγή μέθοδο. Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστούν μόνο οι δυο αυτές μέθοδοι (μαζί με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών, για την επαλήθευση των αποτελεσμάτων), λόγω της αυξημένης σημασίας τους. Για λεπτομέρειες γύρω από τις άλλες δυο μεθόδους που δεν παρουσιάζονται εδώ, ο αναγνώστης παραπέμπεται στη βιβλιογραφία [1]

Για διευκόλυνση του αναγνώστη, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.2 οι συντομογραφίες που θα χρησιμοποιούνται στη συνέχεια:

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

Πίνακας 3.2: Συντομογραφίες των μεθόδων που εφαρμόζονται για την εύρεση του Hessian μητρώου.

Στον Πίνακα 3.3 περιγράφεται η εκάστοτε μέθοδος, καθώς και το υπολογιστικό της κόστος, σε ισοδύναμες επιλύσεις των εξισώσεων ροής, με N τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού.

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

Πίνακας 3.3: Μέθοδοι υπολογισμού του Hessian μητρώου και το υπολογιστικό κόστος τους, σε ισοδύναμες επιλύσεις των εξισώσεων ροής.

3.3.2 Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο DD - DD

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

Πιο αναλυτικά, η δεύτερη παράγωγος, υιοθετώντας τη τανυστική γραφή, προκύπτει διαφορίζοντας την (3.1):

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{db_i db_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \\ &+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} \end{aligned} \quad (3.19)$$

όπου υπενθυμίζεται ότι $i, j \in [1, N]$, όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού. Επίσης έχουμε $k, m, n \in [1, 3]$ και $a, d, e \in [1, np]$ όπου np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

Ωστόσο, λαμβάνοντας υπόψη τη συνάρτηση - στόχο που χρησιμοποιείται στην παρούσα διπλωματική εργασία (η οποία είναι ανεξάρτητη της διατομής S που ελέγχουν οι μεταβλητές σχεδιασμού \vec{b}) και την επιλογή μας για σταθερή κατανομή κόμβων στο $1D$ πλέγμα, ισχύει $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = 0$. Επιπλέον, υπενθυμίζεται ότι το μητρώο $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ είναι γνωστό από την ενότητα 3.2.3. Επομένως, θα έχουμε:

$$\frac{d^2 F}{db_i db_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} \quad (3.20)$$

Ο όρος $\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}}$ δίνεται από τις σχέσεις (3.3) και (3.4), ενώ παραγωγίζοντας ξανά, την (3.4) ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές έχουμε

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} = \frac{\partial^2 p}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} \Delta x_d = (\gamma - 1) \begin{bmatrix} -\frac{u^2}{\rho} & \frac{u}{\rho} & 0 \\ \frac{u}{\rho} & -\frac{1}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_d \Delta x_d \quad (3.21)$$

ενώ για $d \neq e$ ισχύει $\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} = 0$.

Ο μόνος άγνωστος, προς το παρόν, όρος στη σχέση (3.20) είναι πλέον ο $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$. Δι-αφορίζοντας τη σχέση (3.5) προκύπτει η σχέση:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n,a}}{db_i db_j} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Αναλυτικά για τον κάθε όρο έχουμε:

Για τον όρο $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j}$, διαφορίζοντας την (2.33) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού b , έχουμε :

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} = Q_{ij} \Delta x_a \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_a \quad (3.23)$$

όπου $Q_{ij} = \frac{d}{db_i db_j} \left(\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right)$ ισούται με:

$$Q_{ij} = \left[-\frac{1}{S_a^2} \frac{d}{db_j} \left(\frac{dS}{dx} \right)_a \frac{dS_a}{db_i} - \frac{1}{S_a^2} \frac{d}{db_i} \left(\frac{dS}{dx} \right)_a \frac{dS_a}{db_j} + \frac{2}{S_a^3} \frac{dS_a}{db_j} \frac{dS_a}{db_i} \left(\frac{dS}{dx} \right)_a \right] \quad (3.24)$$

Στη συνέχεια, όσον αφορά τον όρο $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}}$, με βάση τη σχέση (2.42) και την παραδοχή (2.36), για $a \neq d$ το $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} = 0$ για τα εσωτερικά σημεία του πλέγματος, ενώ για $a = d$ προκύπτει (παρалаίεται για λόγους απλότητας ο δείκτης του κόμβου):

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} = \frac{\partial}{\partial b_i} \left(\frac{\partial R_n}{\partial U_k} \right) = -\frac{\partial}{\partial b_i} \left(\frac{\partial q_n}{\partial U_k} \right) \Delta x_a \quad (3.25)$$

Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη την έκφραση (2.43), η παραπάνω σχέση θα γίνει:

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial b_i \partial U_k} = - \left[\frac{d}{db_i} \left(-\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right)_a \right] W = \left[-\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{db_i} + \frac{1}{S} \frac{d}{db_i} \frac{dS}{dx} \right]_a W_a \quad (3.26)$$

ενώ για το $W_a = \frac{\partial}{\partial U_n} [\rho u, \rho u^2, u(\rho E + p)]^T$ έχουμε :

$$W_a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_a \Delta x_a \quad (3.27)$$

Με την ίδια λογική, ο όρος $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j}$ για $a \neq d$ ισούται με 0 ενώ για $a = d$ θα έχω (παραλείπεται και εδώ ο δείκτης του κόμβου) :

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial b_j} = \left[-\frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{db_j} + \frac{1}{S} \frac{d}{db_j} \frac{dS}{dx} \right]_a W_a \quad (3.28)$$

όπου W_a γνωστό από τη σχέση (3.27).

Όσον αφορά τον όρο $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$, λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (2.42) καθώς και την παραδοχή (2.36), προκύπτει ότι για $a \neq d, e$ ισούται με 0, ενώ για $a = d = e$ έχουμε (παραλείπεται ο δείκτης του κόμβου):

$$\frac{\partial^2 R_n}{\partial U_k \partial U_m} = -\frac{\partial^2 q_n}{\partial U_k \partial U_m} \Delta x_a \quad (3.29)$$

Επομένως, σύμφωνα με τη σχέση (2.43) θα έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_k \partial U_m} = \left[\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \right]_a \frac{\partial}{\partial U_m} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_a \Delta x_a \quad (3.30)$$

όπου

$$\frac{\partial}{\partial U_m} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{3}{2}(\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix}_a =$$

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{2u^2}{\rho} & -\frac{2u}{\rho} & 0 \\ -\frac{2u}{\rho} & \frac{2}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{(2\gamma Eu) - 3u^3(\gamma - 1)}{\rho} & \frac{3u^2(\gamma - 1) - \gamma E}{\rho} & -\frac{\gamma u}{\rho} \\ \frac{3u^2(\gamma - 1) - \gamma E}{\rho} & -\frac{3u(\gamma - 1)}{\rho} & \frac{\gamma}{\rho} \\ -\frac{\gamma u}{\rho} & \frac{\gamma}{\rho} & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}_a \quad (3.31)$$

Η εξίσωση (3.22) ξαναγράφεται στη μορφή

$$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} = -\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \quad (3.32)$$

με μόνο άγνωστο τον όρο $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$, μιας και ο όρος $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ έχει υπολογιστεί από το κεφάλαιο 2, ενώ οι όροι του δεξιού μέλους δίνονται από τις εξισώσεις (3.23) ως (7.40). Για np κόμβους η επίλυση της (3.32) ισοδυναμεί, με την επίλυση N^2 συστημάτων $np \times np$, ή εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι το μητρώο $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$ είναι συμμετρικό, με $\frac{N(N+1)}{2}$ συστήματα. Σε αυτά πρέπει να προστεθούν και τα N συστήματα που πρέπει να επιλυθούν για την εύρεση της πρώτης παραγώγου με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.

Έπειτα από την επίλυση της (3.32) και την αντικατάσταση του όρου $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$ στην (3.20), έχουμε τον υπολογισμό της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, που είναι και το ζητούμενο.

3.3.3 Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο DD - AM

Στην ενότητα 3.3.2 παρουσιάστηκε η εύρεση της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τη μέθοδο DD-DD. Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστεί ο υπολογισμός του συγκεκριμένου μητρώου με τη μέθοδο DD-AM, έχοντας υπολογίσει δηλαδή την $\frac{dF}{db_i}$ με ευθεία διαφόριση και στη συνέχεια εφαρμόζοντας την συζυγή τεχνική για την $\frac{d^2F}{db_i db_j}$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η συνάρτηση - στόχος εξαρτάται από τα διανύσματα \vec{b} , $\vec{U}(\vec{b})$, επομένως η δεύτερη παράγωγος της, αναλύεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{d^2F}{db_i db_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \\ &+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} \end{aligned} \quad (3.33)$$

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

$$\frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} = \frac{d^2 F}{db_i db_j} + \Psi_{n,a} \frac{d^2 R_{n,a}}{db_i db_j} \quad (3.34)$$

όπου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ δίδεται από την (3.33), ενώ για το $\frac{d^2 R_{n,a}}{db_i db_j}$ έχουμε τη σχέση (3.22). Εκτελώντας τις πράξεις έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} \\ &+ \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \\ &+ \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} + \left(\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j} \end{aligned} \quad (3.35)$$

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

$$\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} = 0 \Rightarrow \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \Psi_{n,a} = -\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \quad (3.36)$$

όπου $\Psi_{n,a}$ είναι ένα διάνυσμα με 3 συνιστώσες στον κόμβο a . Δηλαδή, $\Psi_{n,a} = [\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3]_a$. Επιπλέον, υπενθυμίζεται ότι $i, j \in [1, N]$ όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού, $k, m, n \in [1, 3]$, καθώς και $a, d, e \in [1, np]$ όπου np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

Επομένως, για να υπολογιστεί το $\Psi_{n,a}$ πρέπει απλά να επιλυθεί η εξίσωση (3.36) η οποία είναι σύστημα πενταδιαγώνιας μορφής (δεύτερης τάξης ακρίβεια), δηλαδή για np κόμβους, πρόκειται για μια επίλυση συστήματος $np \times np$. Έχουμε δηλαδή ένα σύστημα, που το υπολογιστικό κόστος επίλυσης του, είναι ανεξάρτητο του αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού. Αξίζει επίσης να αναφερθεί ότι η συζυγής εξίσωση που προκύπτει από το συγκεκριμένο πρόβλημα, ταυτίζεται με τη συζυγή εξίσωση που συναντάται στον υπολογισμό της $\frac{dF}{db}$ με τη συζυγή μέθοδο. Αυτό μπορεί να επαληθευτεί συγκρίνοντας τις σχέσεις (3.16) και (3.36).

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, έχοντας υπολογίσει το $\Psi_{n,a}$, το μητρώο $\frac{d\vec{U}}{db}$ (επίλυση σχέσης (3.6)) και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$, η σχέση (3.35) απλοποιείται στην:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{db_i db_j} &= \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \\ &+ \left[\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \right] \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Όλοι οι όροι που συναντώνται στη σχέση (3.37) έχουν υπολογισθεί είτε στην παρούσα ενότητα, είτε στην ενότητα 3.3.2.

Παρατηρούμε δηλαδή ότι το υπολογιστικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου DD-AM για τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, είναι μια επιπλέον των N εξισώσεων που απαιτούνται για τον υπολογισμό της $\frac{dF}{db}$ με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης. Οι συνολικά $N + 1$ εξισώσεις δείχνουν ένα σαφές πλεονέκτημα της DD-AM μεθόδου, έναντι στις $N + \frac{N(N+1)}{2}$ εξισώσεις της DD-DD, ειδικά αν αναλογιστούμε ότι σε πολύπλοκα αεροδυναμικά προβλήματα ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού είναι ένας μεγάλος διψήφιος ή και τριψήφιος αριθμός.

3.3.4 Συμβολή των οριακών συνθηκών στις τιμές των δεύτερων παραγώγων

Ένα από τα καινούργια στοιχεία που παρουσιάζονται στην παρούσα διπλωματική εργασία, είναι η διερεύνηση της συμβολής στις τιμές των δεύτερων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, των δεύτερων παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών της ροής. Οι οριακές συνθήκες, ο τρόπος γραφής τους με βάση τον τελεστή της ροής \vec{R} , καθώς και η εύρεση των πρώτων παραγώγων τους ως προς το διάνυσμα \vec{U} , δίνονται στην ενότητα 2.4. Στην παρούσα ενότητα θα υπολογιστούν οι δεύτερες παράγωγοι των οριακών συνθηκών και θα διερευνηθεί η συμβολή τους στη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

Για τη διατύπωση των δεύτερων παραγώγων των οριακών συνθηκών, χρήσιμες είναι οι παρακάτω σχέσεις:

Για τη στατική πίεση, όπως δίνεται και από τη σχέση (3.21), έχουμε

$$\frac{\partial^2 p_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} = \frac{\gamma - 1}{\rho} \begin{bmatrix} -u^2 & u & 0 \\ u & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_d \quad (3.38)$$

ενώ $\frac{\partial^2 p_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} = 0$ για $d \neq e$.

Παραγωγίζοντας τη σχέση (2.75) ως προς το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, έχουμε για τη στατική θερμοκρασία, στον κόμβο d

$$\frac{\partial^2 T_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\gamma - 1}{R} \begin{bmatrix} 2E - 3u^2 & 2u & -1 \\ 2u & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}_d \quad (3.39)$$

ενώ $\frac{\partial^2 T_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} = 0$ για $d \neq e$.

Αντίστοιχα, παραγωγίζοντας τη σχέση (2.76) ως προς το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, έχουμε για την ολική θερμοκρασία T_t στον κόμβο d

$$\frac{\partial^2 (T_t)_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\gamma - 1}{\gamma R} \begin{bmatrix} 2\gamma E - 3(\gamma - 1)u^2 & 2(\gamma - 1)u & -\gamma \\ 2(\gamma - 1)u & -(\gamma - 1) & 0 \\ -\gamma & 0 & 0 \end{bmatrix}_d \quad (3.40)$$

ενώ $\frac{\partial^2 (T_t)_d}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} = 0$ για $d \neq e$.

Για την ολική πίεση p_t στον κόμβο d , έχουμε την παράγωγο

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2(p_t)_d}{\partial U_{k,d}\partial U_{m,d}} &= \frac{\partial^2 p}{\partial U_{k,d}\partial U_{m,d}} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \\
&+ \frac{\partial p}{\partial U_{k,d}} \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial U_{m,d}} T - T_t \frac{\partial T}{\partial U_{m,d}}}{T^2} \\
&+ \frac{\partial p}{\partial U_{m,d}} \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial U_{k,d}} T - T_t \frac{\partial T}{\partial U_{k,d}}}{T^2} \\
&+ p \frac{\gamma}{(\gamma-1)^2} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{2-\gamma}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial U_{k,d}} T - T_t \frac{\partial T}{\partial U_{k,d}}}{T^2} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial U_{m,d}} T - T_t \frac{\partial T}{\partial U_{m,d}}}{T^2} \\
&+ p \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \frac{\frac{\partial^2 T_t}{\partial U_{k,d}\partial U_{m,d}} T + \frac{\partial T_t}{\partial U_{k,d}} \frac{\partial T}{\partial U_{m,d}} - \frac{\partial T_t}{\partial U_{m,d}} \frac{\partial T}{\partial U_{k,d}} - \frac{\partial^2 T}{\partial U_{k,d}\partial U_{m,d}} T}{T^2} \\
&- p \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{T_t}{T}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} 2 \frac{\partial T}{\partial U_{m,d}} \frac{\frac{\partial T_t}{\partial U_{k,d}} T - T_t \frac{\partial T}{\partial U_{k,d}}}{T^3}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

ενώ $\frac{\partial^2(p_t)_d}{\partial U_{k,d}\partial U_{m,e}} = 0$ για $d \neq e$.

Έπειτα από τις ανωτέρω βοηθητικές σχέσεις και λαμβάνοντας υπόψη τις εκφράσεις των οριακών συνθηκών από τη σχέση (2.70), έχουμε για τις παραγώγους των οριακών συνθηκών στην είσοδο:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 p_{t1}}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} \\
\frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 T_{t1}}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} \\
\frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} &= d_1^A \frac{\partial^2 p_1}{\partial U_{k,1}\partial U_{m,1}} \\
\frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2}\partial U_{m,2}} &= d_1^B \frac{\partial^2 p_2}{\partial U_{k,2}\partial U_{m,2}} \\
\frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3}\partial U_{m,3}} &= d_1^C \frac{\partial^2 p_3}{\partial U_{k,3}\partial U_{m,3}}
\end{aligned} \tag{3.42}$$

ενώ από την (2.71) για την έξοδο:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np}\partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 p_{np}}{\partial U_{k,np}\partial U_{m,np}} \\
\frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np}\partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-1}\partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-2}\partial U_{m,np-2}} = 0 \\
\frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np}\partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-1}\partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-2}\partial U_{m,np-2}} = 0
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Καμία από τις οριακές συνθήκες δεν εξαρτάται από τις μεταβλητές σχεδιασμού. Συνεπώς έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} = \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} = \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} = 0 \quad , \quad a = 1, np \quad (3.44)$$

Άρα, για τη μέθοδο DD-AM, η συνεισφορά των οριακών συνθηκών (boundary conditions, bc) σε κάθε στοιχείο του μητρώου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, δίνεται από την ακόλουθη ποσότητα:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2 F}{db_i db_j} \right]_{bc} &= \Psi_{1,1} \frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{db_i} \frac{dU_{m,1}}{db_j} + \Psi_{2,1} \frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{db_i} \frac{dU_{m,1}}{db_j} \\ &+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{db_i} \frac{dU_{m,1}}{db_j} + \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} \frac{dU_{k,2}}{db_i} \frac{dU_{m,2}}{db_j} \\ &+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}} \frac{dU_{k,3}}{db_i} \frac{dU_{m,3}}{db_j} + \Psi_{1,np} \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} \frac{dU_{k,np}}{db_i} \frac{dU_{m,np}}{db_j} \end{aligned} \quad (3.45)$$

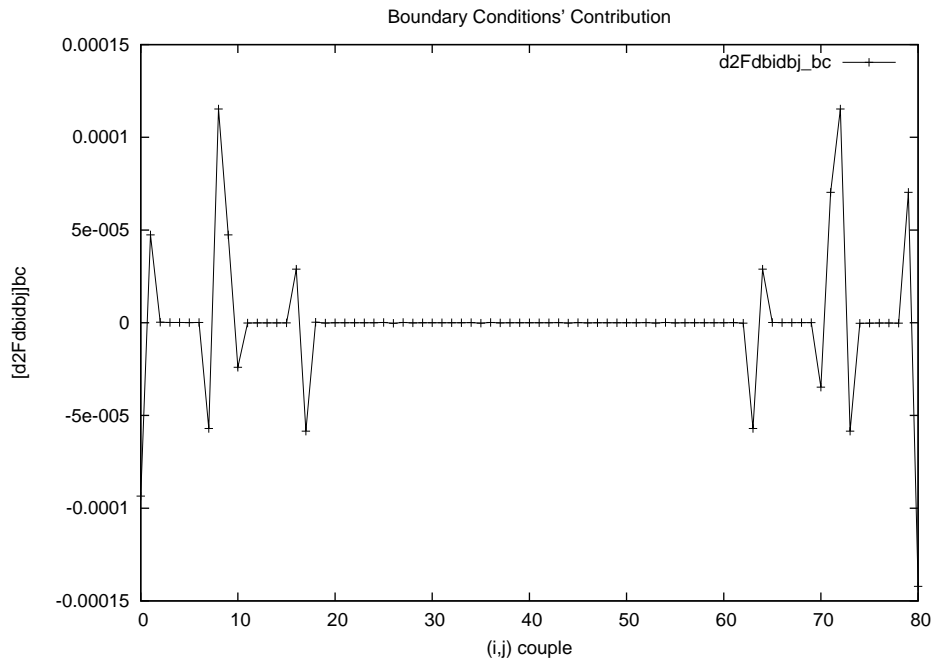
Προγραμματίζοντας τον παραπάνω όρο σε συγκλίνοντα αγωγό με 11 μεταβλητές σχεδιασμού και εκτυπώνοντας τα αποτελέσματα για $i, j \neq 1, 11$, έχουμε το Σχήμα 3.1.

Ο λόγος που δεν υπολογίζονται οι τιμές των παραγώγων της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, για τα πρώτα και τελευταία σημεία σχεδιασμού, είναι η επιθυμία διατήρησης σταθερής διατομής εισόδου και εξόδου. Συνεπώς το πρώτο και N -ιοστό σημείο ελέγχου της γεωμετρίας παραμένουν αμετάβλητα.

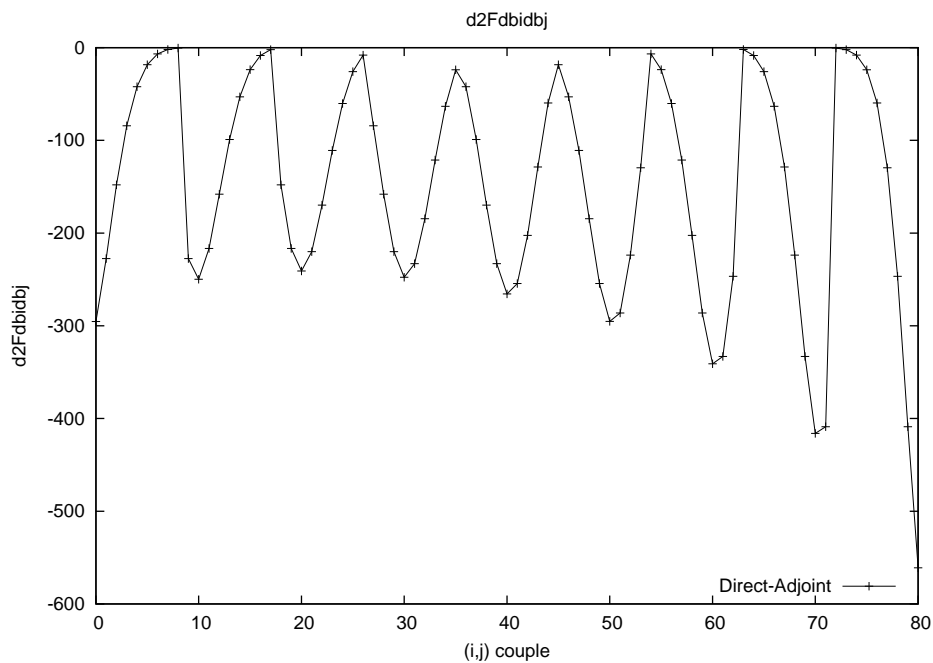
Για τον ίδιο αγωγό οι συνολικές τιμές των παραγώγων $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, υπολογισμένες με τη μέθοδο DD-AM, δίνονται από το Σχήμα 3.2.

Ο λόγος της παρουσίασης της συνεισφοράς των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, στην $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, με τη μέθοδο DD-AM, είναι η απευθείας εξάρτηση των μεγεθών $\left[\frac{d^2 F}{db_i db_j} \right]_{bc}$, $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, που εμφανίζεται μέσω των σχέσεων (3.37) και (3.45). Αντίστοιχα, για την μέθοδο DD-DD, με την παραγωγή των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής, θα είχαμε αλλαγή του όρου $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$ ο οποίος προκύπτει από τη σχέση (3.32), η οποία με τη σειρά της, επηρεάζεται από τις τιμές του όρου $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$ στους οριακούς κόμβους.

Σε κάθε περίπτωση, συγκρίνοντας τα σχήματα 3.1 και 3.2, παρατηρούμε ότι η συνεισφορά των δεύτερων παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές (σχέση (3.45)), στις τιμές των παραγώγων $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ είναι πρακτικά αμελητέα. Συνεπώς, είναι δυνατή η παράλειψη των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές της ροής χωρίς ουσιαστική αλλαγή στις τιμές της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$.



Σχήμα 3.1: Οριζόντιος άξονας: ζεύγος (i,j) μεταβλητών σχεδιασμού $[(11-2) \times (11-2) = 81$ τιμές]. Κατακόρυφος άξονας: Συνεισφορά οριακών συνθηκών στη τιμή $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$. Οι τιμές αντιστοιχούν στην αρχική γεωμετρία του αγωγού.



Σχήμα 3.2: Οριζόντιος άξονας: ζεύγος (i,j) μεταβλητών σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$. Οι τιμές αντιστοιχούν στην αρχική γεωμετρία του αγωγού.

3.3.5 Υπολογισμός 2ων παραγώγων με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών

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

Οι σχέσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται είναι οι εξής:

$$\frac{d^2 F}{db_i db_j} = \frac{F(b_i + \epsilon, b_j + \epsilon) + F(b_i - \epsilon, b_j - \epsilon) - F(b_i + \epsilon, b_j - \epsilon) - F(b_i - \epsilon, b_j + \epsilon)}{4\epsilon^2} \quad (3.46)$$

ενώ για $i = j$ ισχύει:

$$\frac{d^2 F}{db_i^2} = \frac{F(b_i + \epsilon) - 2F(b_i) + F(b_i - \epsilon)}{\epsilon^2} \quad (3.47)$$

Το μητρώο των δεύτερων παραγώγων είναι συμμετρικό. Συνεπώς, για τον υπολογισμό του άνω τριγωνικού υποπίνακα, απαιτούνται $4 \frac{N^2 - N}{2} = 2N(N - 1)$ υπολογισμοί της συνάρτησης - στόχου, που αντιστοιχούν σε ίδιο πλήθος επιλύσεων της ροής, ανα βήμα βελτιστοποίησης. Για τους όρους της κύριας διαγωνίου, απαιτούνται $3N$ επιλύσεις της ροής, αν και για λόγους οικονομίας τα συγκεκριμένα στοιχεία μπορούν να υπολογιστούν μαζί με τις πεπερασμένες διαφορές για την πρώτη παράγωγο, μειώνοντας το κόστος σε N επιλύσεις ανά βήμα βελτιστοποίησης. (Υπενθυμίζεται ότι οι όροι $F(b_i + \epsilon)$ και $F(b_i - \epsilon)$ υπάρχουν και στον τύπο υπολογισμού της πρώτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, συνεπώς δεν απαιτείται εκ νέου ο υπολογισμός τους). Το συνολικό υπολογιστικό κόστος είναι συνεπώς $N(2N - 1)$ επιλύσεις της ροής ανά βήμα βελτιστοποίησης, αριθμός πολύ μεγάλος ακόμα και για μονοδιάστατο πρόβλημα.

Στο πλαίσιο της διπλωματικής αυτής, η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών χρησιμεύει ως μέσο σύγκρισης για τις τιμές των παραγώγων δεύτερης τάξης, που υπολογίστηκαν με τις μεθόδους DD-DD και DD-AM, μιας και παρά το υπολογιστικό της κόστος, είναι εύκολη στον προγραμματισμό.

Τέλος διευκρινίζεται ότι προτού χρησιμοποιηθούν οι πεπερασμένες διαφορές είχε προηγηθεί διερεύνηση ως προς τη τιμή του ϵ , έτσι ώστε οι υπολογισμένες παράγωγοι να είναι ανεξάρτητες της ποσότητας αυτής. Η δεύτερη παράγωγος είναι πολύ ευαίσθητη στη τιμή της σταθεράς ϵ , μιας και αυτή είναι ιδιαίτερα μικρής τιμής και βρίσκεται στον παρονομαστή, υψωμένη στο τετράγωνο.

Κεφάλαιο 4

Υπολογισμός 1ης παραγώγου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές

4.1 Εισαγωγικά Σχόλια

Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστεί η εύρεση της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Ως στιβαρές μεταβλητές μπορούν να θεωρηθούν κάποιες από τις οριακές συνθήκες του προβλήματος, όπως η ολική πίεση και η ολική θερμοκρασία στην είσοδο, ή ο αριθμός $M_{is(out)}$ που καθορίζει τη τιμή της στατικής πίεσης στην έξοδο του αγωγού, όπως παρουσιάστηκε στην ενότητα 2.4. Θα παρουσιαστούν οι γενικές εξισώσεις και θα γίνει εφαρμογή, χρησιμοποιώντας μια μόνο στιβαρή μεταβλητή, αυτή του $M_{is(out)}$. Συνεπώς, για την εφαρμογή αυτή, προκύπτει μια βαθμωτή τιμή της πρώτης παραγώγου, αντί για μητρώο. Οι παράγωγοι της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές μπορούν να έχουν μεγάλη φυσική και πρακτική σημασία, καθώς μας δείχνουν τη συμπεριφορά του προβλήματος που εξετάζουμε στην αλλαγή των οριακών συνθηκών. Για παράδειγμα σε ένα διδιάστατο πρόβλημα πτερύγωσης συμπίεστη, μπορούμε να δούμε τη συμπεριφορά των συντελεστών άνωσης και οπισθέλκουσας στην αλλαγή του αριθμού Mach της ροής. Στο 1Δ πρόβλημα που εξετάζουμε η φυσική και κυρίως η πρακτική σημασία είναι εμφανώς μικρότερης αξίας. Ωστόσο σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν είναι η εφαρμογή της μεθόδου σε πραγματικό πρόβλημα, αλλά η διερεύνηση της σημαντικότητας των όρων που εμφανίζονται στις εξισώσεις και η απόκτηση εμπειρίας που θα χρησιμεύσει σε πρακτικές εφαρμογές στο μέλλον (π.χ. σε διδιάστατα ή τριδιάστατα πλέγματα).

Οι τιμές των πρώτων παραγώγων της συνάρτησης - στόχου, θα υπολογιστούν και εδώ με τη μέθοδο της ευθείας διαφοράς, της συζυγούς τεχνικής και τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Ιδιαίτερη σημασία έχει για τη συνέχεια η μέθοδος της ευθείας διαφοράς, μιας και θα χρησιμοποιηθεί για την εύρεση της τρίτης, μικτής, παραγώγου σε επόμενο κεφάλαιο.

4.2 Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστούν οι γενικές εξισώσεις εύρεσης της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και θα γίνει εφαρμογή για το μέγεθος $M_{is(out)}$.

Η μεταβολή των οριακών συνθηκών επηρεάζει την τιμή της συνάρτησης στόχου με δυο τρόπους, αφενός άμεσα και αφετέρου μεταβάλλοντας την τιμή του διανύσματος των συντηρητικών μεταβλητών, \vec{U} , δηλαδή τις τιμές της πυκνότητας, της ταχύτητας και της πίεσης του ρευστού σε κάθε κόμβο. Λαμβάνοντας τα παραπάνω υπόψη, η παράγωγος της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, μπορεί να γραφεί

$$\frac{dF}{dc_i} = \frac{\partial F}{\partial c_i} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \quad (4.1)$$

με $i \in [1, M]$, όπου M ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών, $k \in [1, 3]$ (για το 1Δ πρόβλημα) και $a, d \in [1, np]$ με np τον αριθμό των κόμβων του πλέγματος.

Ο τελεστής της ροής \vec{R} , έχει επίσης διπλή εξάρτηση από τις στιβαρές μεταβλητές, η οποία περιγράφεται από τη σχέση

$$\frac{dR_{n,a}}{dc_i} = \frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i} + \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} = 0 \quad (4.2)$$

Η τιμή της $\frac{dR_{n,a}}{dc_i} = 0$ προκύπτει από την απαίτηση για ικανοποίηση των εξισώσεων ροής και μετά από οποιαδήποτε μεταβολή των οριακών συνθηκών. Έχουμε δηλαδή

$$R_{n,a} + \frac{dR_{n,a}}{dc_i} dc_i = 0 \quad (4.3)$$

και αφού $R_{n,a} = 0$, έχουμε και $\frac{dR_{n,a}}{dc_i} = 0$.

Η σχέση (4.2) ξαναγράφεται στη μορφή

$$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} = -\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i} \quad (4.4)$$

από την οποία γνωρίζοντας τον όρο $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ μέσω του κεφαλαίου 2 και υπολογίζοντας τον όρο $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i}$ ανάλογα με την επιλογή των στιβαρών μεταβλητών που έχει γίνει, μπορεί να υπολογισθεί η μεταβολή των μεταβλητών της ροής λόγω της μεταβολής των οριακών συνθηκών, δηλαδή ο όρος $\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$. Ο υπολογισμός αυτός αντιστοιχεί στην επίλυση M συστημάτων $np \times np$.

Στη συνέχεια, αντικαθιστώντας τον όρο $\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$ στη σχέση (4.1), και υπολογίζοντας τον όρο $\frac{\partial F}{\partial c_i}$ ανάλογα με τη συνάρτηση - στόχο, έχουμε την τιμή της $\frac{dF}{dc_i}$, που είναι και ο σκοπός μας.

Εφαρμόζοντας την παραπάνω διαδικασία χρησιμοποιώντας ως στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$, έχουμε για κάθε ένα από τους όρους που εμφανίζονται στις εξισώσεις:

Ο όρος $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i}$ δηλώνει την απευθείας εξάρτηση του τελεστή της ροής από τον αριθμό $M_{is(out)}$. Ο δείκτης i έχει εδώ τιμή 1, γι' αυτό και από εδώ και κάτω θα παραλείπεται.

Η μοναδική έκφραση του τελεστή της ροής στην οποία περιλαμβάνεται ο αριθμός $M_{is(out)}$, είναι αυτή που αφορά στη στατική πίεση στην έξοδο του αγωγού όπως δίνεται από τη σχέση (2.70), η οποία για λόγους πληρότητας δίνεται και εδώ:

$$R_{1,np} = p_{np} [U_{k,np}] - const_3 [M_{is(out)}] = p_{np} - \frac{p_{t1}}{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}^2)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}} \quad (4.5)$$

Έχουμε δηλαδή για τον όρο $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c} = 0$, εκτός από

$$\frac{\partial R_{1,np}}{\partial c} = \frac{\gamma p_{t1} M_{is(out)}}{(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}^2)^{\frac{2\gamma-1}{\gamma-1}}} \quad (4.6)$$

Η συνάρτηση - στόχος $F = \int p dx$ δεν εξαρτάται άμεσα από τον αριθμό $M_{is(out)}$. Πρέπει να τονισθεί ότι η στατική πίεση στην έξοδο, p_{np} , εξαρτάται μόνο από τις μεταβλητές της ροής και η τιμή της ταυτίζεται με την $const_3$ μόνο όταν έχει συγκλίνει ο αλγόριθμος επίλυσης της ροής, χωρίς αυτό να σημαίνει απευθείας εξάρτηση από τον $M_{is(out)}$. Συνεπώς έχουμε

$$\frac{\partial F}{\partial c} = 0 \quad (4.7)$$

Ο όρος $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ αναλύεται εκτενώς στο κεφάλαιο 2 ενώ ο όρος $\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}}$ δίνεται από τη σχέση (3.3). Συνεπώς, όλοι οι όροι που περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της $\frac{dF}{dc}$ είναι γνωστοί.

Στην περίπτωση μας, έχουμε $M = 1$, συνεπώς απαιτείται μια μόνο επίλυση συστήματος $np \times np$ για τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{dU_{k,d}}{dc}$.

4.3 Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη συζυγή μέθοδο.

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται ο τρόπος υπολογισμού της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης F , ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη συζυγή μέθοδο. Η μέθοδος είναι ίδια με αυτή που αναπτύσσεται για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης F , ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού (ενότητα 3.2.3), γι' αυτό και παρουσιάζεται συνοπτικά.

Η επαυξημένη συνάρτηση ορίζεται ως :

$$\frac{dF_{aug}}{dc_i} = \frac{dF}{dc_i} + \psi_{n,a} \frac{dR_{n,a}}{dc_i} \quad (4.8)$$

και αντικαθιστώντας σε αυτή τις εκφράσεις των $\frac{dF}{dc_i}$ και $\frac{dR_{n,a}}{dc_i}$ από τις σχέσεις (4.1) και (4.2) αντίστοιχα, έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{dF_{aug}}{dc_i} &= \frac{\partial F}{\partial c_i} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\ &= \frac{\partial F}{\partial c_i} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i} + \left(\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right) \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Σκοπός της συζυγούς τεχνικής είναι η αποφυγή υπολογισμού του όρου $\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$ λόγω του σχετικά μεγάλου υπολογιστικού κόστους του. Συνεπώς, μηδενίζεται ο πολλαπλασιαστής του στη σχέση (4.9), οδηγώντας στη διατύπωση της συζυγούς εξίσωσης:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} &= 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \psi_{n,a} &= -\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Παρατηρούμε ότι η συζυγής εξίσωση, είναι ίδια με αυτές που εμφανίζονται στο συζυγές πρόβλημα εύρεσης της πρώτης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, όπως και στο πρόβλημα εύρεσης της δεύτερης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τη μέθοδο DD-AM.(σχέσεις (3.16) και (3.36) αντίστοιχα)

Το κόστος επίλυσης της (4.10),για μια συνάρτηση - στόχο, είναι ένα σύστημα $np \times np$, ανεξάρτητα από τον αριθμό των στιβαρών μεταβλητών.

Η σχέση (4.9) απλοποιείται στην

$$\frac{dF_{aug}}{dc_i} = \frac{\partial F}{\partial c_i} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial c_i} \quad (4.11)$$

και αντικαθιστώντας τη συζυγή μεταβλητή $\psi_{n,a}$, η οποία υπολογίζεται από τη (4.10), έχουμε τον υπολογισμό των $\frac{dF}{dc_i}$.

Αν θεωρήσουμε τον αριθμό $M_{is(out)}$ ως τη μόνη στιβαρή μεταβλητή, όλα τα μεγέθη που συναντώνται στον υπολογισμό της $\frac{dF}{dc_i}$ έχουν αναπτυχθεί σε προηγούμενες ενότητες. Συγκεκριμένα οι όροι $\frac{\partial F}{\partial c}$, $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c}$, $\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}}$ δίνονται από τις σχέσεις (4.7), (4.6) και (3.3) αντίστοιχα, ενώ ο όρος $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ αναπτύσσεται εκτενώς στο κεφάλαιο 2.

Αξίζει να σημειωθεί ότι για τη συγκεκριμένη περίπτωση, το υπολογιστικό κόστος εύρεσης της $\frac{dF}{dc}$, είναι ίδιο για τη μέθοδο ευθείας διαφορίσης και τη συζυγή τεχνική (επίλυση ενός συστήματος $np \times np$).

4.4 Υπολογισμός Πρώτης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται ο τρόπος εύρεσης της πρώτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται κυρίως για επαλήθευση των αποτελεσμάτων που παράγονται από τις δυο προηγούμενες μεθόδους.

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

$$\frac{dF}{dc_i} = \frac{F(c_1, c_2, \dots, c_i + \epsilon, \dots, c_M) - F(c_1, c_2, \dots, c_i - \epsilon, \dots, c_M)}{2\epsilon} \quad (4.12)$$

Εφαρμόζοντας την παραπάνω σχέση για μια στιβαρή μεταβλητή, τον αριθμό $M_{is(out)}$ έχουμε

$$\frac{dF}{dc} = \frac{F(M_{is(out)} + \epsilon) - F(M_{is(out)} - \epsilon)}{2\epsilon} \quad (4.13)$$

όπου ϵ σταθερά, ιδιαίτερα μικρής τιμής, που καθορίζει ο χρήστης. Στη γενική περίπτωση απαιτούνται $2M$ επιλύσεις των εξισώσεων της ροής για τον υπολογισμό του μητρώου της πρώτης παραγώγου. Στο παράδειγμά μας, απαιτούνται 2 επιλύσεις. Όπως και κάθε φορά που εφαρμόζεται κάποιο σχήμα πεπερασμένων διαφορών, πρέπει να γίνει παραμετρική ανάλυση έτσι ώστε οι τιμές των παραγώγων να είναι ανεξάρτητες του ϵ .

Κεφάλαιο 5

Υπολογισμός 2ης παραγώγου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές

5.1 Εισαγωγικά Σχόλια

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε η γενική παρουσίαση εύρεσης της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και παρουσιάστηκε μια εφαρμογή, θεωρώντας ως στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$. Στο παρόν κεφάλαιο θα ακολουθηθεί παρόμοια διαδικασία για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Όπως και στο αντίστοιχο κεφάλαιο που αφορά στην εύρεση της δεύτερης παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, θα παρουσιαστούν οι μέθοδοι ευθείας διαφόρισης - ευθείας διαφόρισης (DD-DD) και ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής (DD-AM) για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου. Επίσης θα ελεγχθεί η συνεισφορά των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, στο πρόβλημα και θα παρουσιαστεί η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών για τον έλεγχο των αποτελεσμάτων.

5.2 Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου , ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο DD-DD

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης (σχέση (4.1)), θα υπολογιστεί η δεύτερη παράγωγος, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, χρησιμοποιώντας την ίδια τεχνική. Η συνάρτηση - στόχος εξαρτάται με δυο τρόπους από τις στιβαρές μεταβλητές, αφενός απευθείας και αφετέρου μέσω της μεταβολής των χαρακτηριστικών της ροής λόγω της μεταβολής των στιβαρών μεταβλητών. Έχοντας υπόψη αυτή τη διπλή εξάρτηση και διαφορίζοντας την (4.1), έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ &+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \end{aligned} \quad (5.1)$$

με $i, j \in [1, M]$, όπου M ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών, $k, m, n \in [1, 3]$ και $a, d, e \in [1, np]$, όπου np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

Αναλογιζόμενοι, ότι και ο τελεστής της ροής \vec{R} εξαρτάται με δυο τρόπους από τις στιβαρές μεταβλητές έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i dc_j} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} = 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Η σχέση (5.2) ξαναγράφεται στη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} &= - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\ &- \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \end{aligned} \quad (5.3)$$

από την οποία, με γνωστούς τους όρους του δεξιού μέλους (υπολογίζονται ανάλογα με τις στιβαρές μεταβλητές που επιλέγονται), υπολογίζεται η μεταβολή των χαρακτηριστικών της ροής, $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$. Ο υπολογισμός αυτός συνίσταται στη λύση M^2 συστημάτων $np \times np$, ή αν εκμεταλλευτούμε το γεγονός ότι πρόκειται για συμμετρικό μητρώο, στη λύση $\frac{M(M+1)}{2}$ συστημάτων. Στο συνολικό κόστος της μεθόδου πρέπει να προστεθούν και οι M επιλύσεις που απαιτούνται για τον υπολογισμό του $\frac{\partial U_{k,d}}{\partial c_i}$. Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών είναι σχεδόν πάντα μικρός (λ.χ. $M = 1 \div 4$), το κόστος υπολογισμού δεν είναι ιδιαίτερα μεγάλο.

Έπειτα, αντικαθιστώντας το $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ στη σχέση (5.1) και υπολογίζοντας τους όρους των μερικών παραγώγων της συνάρτησης - στόχου F , έχουμε το τελικό αποτέλεσμα για την ολική παράγωγο $\frac{d^2 F}{dc_i dc_j}$.

Ακολουθούν οι εκφράσεις των όρων που περιλαμβάνονται στην ανωτέρω διαδικασία, θεωρώντας ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$ (η διάσταση του διανύσματος των στιβαρών μεταβλητών είναι $M = 1$, γι' αυτό και θα παραλείπονται οι δείκτες i, j).

Από τη σχέση (4.6) έχουμε ότι η μοναδική, μη μηδενική τιμή του όρου $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial c}$, είναι η $\frac{\partial R_{1,np}}{\partial c}$. Παραγωγίζοντας εκ νέου ως προς τον αριθμό $M_{is(out)}$ έχουμε, $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial^2 c} = 0$, εκτός από

$$\frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial c^2} = \gamma p_{t1} \frac{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} - (2\gamma - 1) M_{is(out)}}{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}\right)^{\frac{3\gamma-2}{\gamma-1}}} \quad (5.4)$$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η μοναδική τιμή του τελεστή της ροής, R , που εμφανίζει άμεση εξάρτηση από τον αριθμό $M_{is(out)}$ είναι η :

$$R_{1,np} = p_{np} [U_{k,np}] - const_3 [M_{is(out)}] = p_{np} - \frac{p_{t1}}{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{is(out)}^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}} \quad (5.5)$$

Ωστόσο, όπως είναι φανερό, ο πρώτος όρος εξαρτάται μόνο από τις μεταβλητές τις ροής και ο δεύτερος μόνο από τη στιβαρή μεταβλητή. Συνεπώς, για τις μικτές παραγώγους θα έχουμε

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} = \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} = 0 \quad (5.6)$$

Ο όρος $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$, δίνεται, για τα εσωτερικά σημεία, από τη σχέση (3.30), ενώ ο $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ αναλύεται εκτενώς στο κεφάλαιο 2. Με αυτά τα μητρώα γνωστά, είναι δυνατή η εύρεση του $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc^2}$ από την απλοποιημένη μορφή της σχέσης (5.3):

$$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc^2} = -\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c^2} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,e}}{dc} \quad (5.7)$$

Αντικαθιστώντας έπειτα το συγκεκριμένο όρο στη σχέση (5.1) και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{\partial F}{\partial c} = 0$, είναι δυνατός ο υπολογισμός της $\frac{d^2 F}{dc^2}$, λαμβάνοντας την τιμή της $\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$ από τη σχέση (3.21). Για λόγους πληρότητας δίνεται η σχέση υπολογισμού της δεύτερης παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, στη συγκεκριμένη περίπτωση

$$\frac{d^2 F}{dc^2} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,d}}{dc} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc^2} \quad (5.8)$$

5.3 Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο DD-AM

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστεί συνοπτικά ο τρόπος εύρεσης της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, εφαρμόζοντας τη συζυγή τεχνική, αφού πρώτα έχει βρεθεί η πρώτη παράγωγος με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης.

Εισάγοντας και εδώ την επαυξημένη συνάρτηση έχουμε:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{dc_i dc_j} = \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} + \Psi_{n,a} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i dc_j} \quad (5.9)$$

και αντικαθιστώντας τις εκφράσεις των $\frac{d^2 F}{dc_i dc_j}$ και $\frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i dc_j}$ από τις σχέσεις (5.1) και (5.2) αντίστοιχα, έχουμε για την δεύτερη παράγωγο:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{dc_i dc_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \\ &+ \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ &+ \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \left(\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Μηδενίζοντας τον πολλαπλασιαστή του όρου $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ ώστε να αποφύγουμε το μεγάλο υπολογιστικό του κόστος, οδηγούμαστε στη διατύπωση της συζυγούς εξίσωσης.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} &= 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \psi_{n,a} &= -\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Παρατηρούμε και εδώ ότι η συζυγής εξίσωση είναι ίδια με όλες τις συζυγείς εξισώσεις που έχουν αναφερθεί μέχρι τώρα (για την εύρεση της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τις στιβαρές μεταβλητές, καθώς και για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου της F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού). Συνεπώς, το υπολογιστικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου DD-AM είναι M επιλύσεις συστημάτων για τον υπολογισμό του $\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$, +1 για την επίλυση της συζυγούς εξίσωσης.

Εφαρμόζοντας την μέθοδο DD-AM για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης $F = \int p dx$ ως προς τον αριθμό $M_{is(out)}$ και λαμβάνοντας υπόψη όσα έχουν

αναφερθεί στην προηγούμενη ενότητα για τους όρους που συναντώνται στις εξισώσεις, έχουμε:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{dc^2} = \Psi_{1,np} \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial c^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,d}}{dc} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,e}}{dc} \quad (5.12)$$

Συγκρίνοντας το υπολογιστικό κόστος των δύο μεθόδων για τη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου $M = 1$, έχουμε $CPU_{DD-DD} = M + \frac{M(M+1)}{2} = 2$ και $CPU_{DD-AM} = M + 1 = 2$. Βλέπουμε δηλαδή ότι λόγω του μικρού αριθμού των στιβαρών μεταβλητών, η μέθοδος DD-AM δεν έχει πλέον το ξεκάθαρο πλεονέκτημα που είχε στον υπολογισμό των παραγώγων ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. (Στη συγκεκριμένη περίπτωση το υπολογιστικό κόστος είναι ακριβώς το ίδιο, αλλά το συμπέρασμα μπορεί να γενικευθεί μιας και ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών είναι σχεδόν πάντα μικρός.)

5.4 Συνεισφορά των οριακών συνθηκών

Στην παρούσα ενότητα θα διερευνηθεί η συνεισφορά των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής, \vec{U} , στη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου F , ως προς τη στιβαρή μεταβλητή, $M_{is(out)}$. Από την ανάλυση που έγινε στην ενότητα 3.3.4, είχε εξαχθεί το συμπέρασμα ότι οι αντίστοιχοι όροι είναι ελάχιστης σημασίας για την δεύτερη παράγωγο της F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

Η ανάλυση που προηγήθηκε στην ανωτέρω ενότητα έδωσε τα ακόλουθα αποτελέσματα για τις παραγώγους των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής:

Οριακές συνθήκες εισόδου.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 p_{t1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 T_{t1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= d_1^A \frac{\partial^2 p_1}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} &= d_1^B \frac{\partial^2 p_2}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}} &= d_1^C \frac{\partial^2 p_3}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

Οριακές συνθήκες εξόδου.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 p_{np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} \\
 \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-1} \partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-2} \partial U_{m,np-2}} = 0 \\
 \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-1} \partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-2} \partial U_{m,np-2}} = 0
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Οι δεύτερες μερικές παράγωγοι των μεγεθών p_t, T_t, p ως προς τις μεταβλητές της ροής, δίνονται από τις σχέσεις (3.41), (3.40) και (3.38) αντίστοιχα.

Για τη μέθοδο DD-AM, η συνεισφορά των οριακών συνθηκών στη τιμή της $\frac{d^2 F}{dc^2}$ δίνεται από τον όρο

$$\begin{aligned}
\left[\frac{d^2 F}{dc^2} \right]_{bc} &= \Psi_{1,1} \frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} \frac{dU_{m,1}}{dc} + \Psi_{2,1} \frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} \frac{dU_{m,1}}{dc} \\
&+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} \frac{dU_{m,1}}{dc} + \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} \frac{dU_{k,2}}{dc} \frac{dU_{m,2}}{dc} \\
&+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}} \frac{dU_{k,3}}{dc} \frac{dU_{m,3}}{dc} + \Psi_{1,np} \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} \frac{dU_{k,np}}{dc} \frac{dU_{m,np}}{dc}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Πρέπει σε αυτό το σημείο να τονισθεί ότι στις οριακές συνθήκες ανήκει και ο όρος $\Psi_{1,np} \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial c^2}$, ο οποίος όμως έχει αναγραφεί ήδη στη σχέση (5.12), γι' αυτό και δεν αναφέρεται στη σχέση (5.15).

Για τη μέθοδο DD-DD, οι όροι των εξισώσεων (5.13) και (5.14) συμπεριλαμβάνονται στην εξίσωση (5.7), επηρεάζοντας την τιμή του όρου $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc^2}$, ο οποίος με τη σειρά του μεταβάλλει την τιμή της $\frac{d^2 F}{dc^2}$.

Προγραμματίζοντας τις δύο μεθόδους, με τους όρους των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής και στη συνέχεια χωρίς, έχουμε τα ακόλουθα αποτελέσματα (πρόκειται για τον ίδιο αγωγό που παρουσιάζεται και στην ενότητα 3.3.4):

Μέθοδος	Με παραγώγους Ο.Σ.	Χωρίς παραγώγους Ο.Σ.	Διαφορά %
DD-DD	-338418.26	-432817.95	21.81%
DD-AM	-338418.25	-432817.95	21.81%

Πίνακας 5.1: Τιμές της $\frac{d^2 F}{dc^2}$ με τις μεθόδους DD-DD, DD-AM με και χωρίς τις παραγώγους των οριακών συνθηκών.

Παρατηρώντας τα αποτελέσματα του ανωτέρω πίνακα, βλέπουμε ότι οι τιμές της $\frac{d^2 F}{dc^2}$ είναι πρακτικά ίδιες ανεξάρτητα από τη μέθοδο υπολογισμού (τουλάχιστον 7 σημαντικά ψηφία ίδια). Το σημαντικό συμπέρασμα ωστόσο είναι ότι οι παράγωγοι των οριακών συνθηκών ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές της ροής έχουν μεγάλη συνεισφορά στη τιμή της παραγώγου $\frac{d^2 F}{dc^2}$, σε αντίθεση με την αμελητέα συνεισφορά που έχουν στις τιμές των $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$. Η συμπεριφορά αυτή είναι μάλλον αναμενόμενη, μιας και οι τιμές των $\frac{d^2 F}{dc_i dc_j}$ είναι άμεσα συνδεδεμένες με τις οριακές συνθήκες.

5.5 Υπολογισμός της Δεύτερης Παραγώγου, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών

Για λόγους πληρότητας παρουσιάζεται στην παρούσα ενότητα ο τρόπος υπολογισμού των δεύτερων παραγώγων με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Στην ουσία πρόκειται για τους ίδιους τύπους που εμφανίζονται στην ενότητα 3.3.5.

Οι σχέσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται είναι οι εξής:

$$\frac{d^2F}{dc_i dc_j} = \frac{F(c_i + \epsilon, c_j + \epsilon) + F(c_i - \epsilon, c_j - \epsilon) - F(c_i + \epsilon, c_j - \epsilon) - F(c_i - \epsilon, c_j + \epsilon)}{4\epsilon^2} \quad (5.16)$$

ενώ για $i = j$ ισχύει:

$$\frac{d^2F}{dc_i^2} = \frac{F(c_i + \epsilon) - 2F(c_i) + F(c_i - \epsilon)}{\epsilon^2} \quad (5.17)$$

Το μητρώο των δεύτερων παραγώγων είναι συμμετρικό. Συνεπώς, για τον υπολογισμό του άνω τριγωνικού υποπίνακα, απαιτούνται $4 \frac{M^2 - M}{2} = 2M(M - 1)$ υπολογισμοί της συνάρτησης - στόχου, που αντιστοιχούν σε ίδιο πλήθος επιλύσεων της ροής, ανα βήμα βελτιστοποίησης. Για τους όρους της κύριας διαγωνίου, απαιτούνται $3M$ επιλύσεις της ροής, αν και για λόγους οικονομίας τα συγκεκριμένα στοιχεία μπορούν να υπολογιστούν μαζί με τις πεπερασμένες διαφορές για την πρώτη παράγωγο, μειώνοντας το κόστος σε M επιλύσεις ανά βήμα βελτιστοποίησης. (Υπενθυμίζεται ότι οι όροι $F(c_i + \epsilon)$ και $F(c_i - \epsilon)$ υπάρχουν και στον τύπο υπολογισμού της πρώτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, συνεπώς δεν απαιτείται εκ νέου ο υπολογισμός τους). Το συνολικό υπολογιστικό κόστος είναι συνεπώς $M(2M - 1)$ επιλύσεις της ροής ανά βήμα βελτιστοποίησης.

Στην περίπτωση που ως μόνη στιβαρή μεταβλητή θεωρηθεί ο αριθμός $M_{is(out)}$, το συνολικό κόστος για τον υπολογισμό της $\frac{d^2F}{dc^2}$ είναι 3 επιλύσεις της ροής (2 για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου και μια επιπλέον για τη δεύτερη). Θυμίζουμε ότι για τον υπολογισμό της ίδιας ποσότητας με τις μεθόδους DD-DD και DD-AM απαιτούνται δύο λύσεις συστημάτων $np \times np$. Βέβαια πρέπει να τονισθεί ότι μια επίλυση της ροής μπορεί να απαιτεί πολλές επιλύσεις συστημάτων $np \times np$ μιας και γίνεται με την επαναληπτική μέθοδο της δ - διατύπωσης. Αντίθετα, τα συστήματα στις μεθόδους DD-DD και DD-AM επιλύονται απευθείας.

Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών χρησιμεύει ως μέσο σύγκρισης για τις τιμές

των παραγώγων δεύτερης τάξης, που υπολογίστηκαν με τις μεθόδους DD-DD και DD-AM.

Κεφάλαιο 6

Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου

6.1 Εισαγωγικά Σχόλια

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε η γενική παρουσίαση της εύρεσης της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και παρουσιάστηκε μια εφαρμογή, θεωρώντας ως στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$. Στο παρόν κεφάλαιο θα ακολουθηθεί παρόμοια διαδικασία για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης F ως προς τις μικτές μεταβλητές (στιβαρές και σχεδιασμού). Θα παρουσιαστούν οι μέθοδοι ευθείας διαφόρισης - ευθείας διαφόρισης (DD-DD) και ευθείας διαφόρισης - συζυγούς τεχνικής (DD-AM) για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου καθώς και η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών για τον έλεγχο των αποτελεσμάτων.

6.2 Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο DD-DD

Έχοντας υπολογίσει την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης (σχέση (4.1)), θα υπολογιστεί η δεύτερη παράγωγος ως προς τις μικτές μεταβλητές χρησιμοποιώντας και πάλι την ίδια τεχνική. Η συνάρτηση - στόχος εξαρτάται με δυο τρόπους από τις μεταβλητές σχεδιασμού, αφενός απευθείας και αφετέρου μέσω της μεταβολής των χαρακτηριστικών της ροής λόγω της μεταβολής των μεταβλητών σχεδιασμού. Έχοντας υπόψη αυτή τη διπλή εξάρτηση και διαφορίζοντας την (4.1) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dc_i db_l} &= \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{db_l} \\ &+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \end{aligned} \quad (6.1)$$

με $i \in [1, M]$, όπου M ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών, $k, m, n \in [1, 3]$, $a, d, e \in [1, np]$, όπου np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος και $l \in [1, N]$, όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού.

Αναλογιζόμενοι, ότι και ο τελεστής του υπολοίπου της ροής \vec{R} εξαρτάται με δυο τρόπους από τις μεταβλητές σχεδιασμού έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{db_l} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} = 0 \end{aligned} \quad (6.2)$$

Η σχέση (6.2) ξαναγράφεται στη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} &= - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_l} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\ &- \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{db_l} \end{aligned} \quad (6.3)$$

από την οποία, με γνωστούς τους όρους του δεξιού μέλους (υπολογίζονται ανάλογα με τις στιβαρές μεταβλητές που επιλέγονται), υπολογίζεται η μεταβολή των χαρακτηριστικών της ροής, $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l}$. Ο υπολογισμός αυτός συνίσταται στη λύση MN συστημάτων $np \times np$. Στο συνολικό κόστος της μεθόδου πρέπει να προστεθούν και οι M και N επιλύσεις που απαιτούνται για τον υπολογισμό των $\frac{\partial U_{k,d}}{\partial c_i}$ και $\frac{\partial U_{k,d}}{\partial b_l}$ αντίστοιχα, με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.

Έπειτα, αντικαθιστώντας το μητρώο $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l}$ στη σχέση (6.1) και υπολογίζοντας τους όρους των μερικών παραγώγων της συνάρτησης - στόχου F , έχουμε το τελικό αποτέλεσμα για την ολική παράγωγο $\frac{d^2 F}{dc_i db_l}$.

Ακολουθούν οι εκφράσεις των όρων που περιλαμβάνονται στην ανωτέρω διαδικασία, θεωρώντας ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$ (η διάσταση του διανύσματος των στιβαρών μεταβλητών είναι $M = 1$, γι' αυτό και θα παραλείπεται ο δείκτης i).

Οι όροι $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}}$, $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$, $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l}$ έχουν ήδη αναλυθεί και δίνονται από τις σχέσεις (5.6), (3.30) και (3.28), ενώ ο $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$ αναλύεται εκτενώς στο Κεφάλαιο 2.

Λαμβάνοντας υπόψη ότι καμία τιμή του τελεστή του υπολοίπου της ροής δεν εξαρτάται ταυτόχρονα από τον αριθμό $M_{is(out)}$ και από τις μεταβλητές σχεδιασμού έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} = 0 \quad (6.4)$$

Με τα ανωτέρω μητρώα γνωστά, η σχέση (6.3) τροποποιείται στην (6.5), από την οποία και υπολογίζεται ο όρος $\frac{d^2 U_{k,d}}{dcdb_l}$

$$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dcdb_l} = - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc} - \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,e}}{db_l} \quad (6.5)$$

Αντικαθιστώντας έπειτα το συγκεκριμένο όρο στη σχέση (6.1) και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{\partial F}{\partial c} = \frac{\partial F}{\partial b_l} = 0$, είναι δυνατός ο υπολογισμός της $\frac{d^2 F}{dcdb_l}$, λαμβάνοντας την τιμή της $\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$ από τη σχέση (3.21). Για λόγους πληρότητας δίνεται η σχέση υπολογισμού της δεύτερης παραγώγου στη συγκεκριμένη περίπτωση

$$\frac{d^2 F}{dcdb_l} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc} \frac{dU_{m,d}}{db_l} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dcdb_l} \quad (6.6)$$

6.3 Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο DD-AM

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστεί συνοπτικά ο τρόπος εύρεσης της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις μικτές μεταβλητές, εφαρμόζοντας τη συζυγή τεχνική, αφού πρώτα έχει βρεθεί η πρώτη παράγωγος ως προς τις στιβαρές μεταβλητές με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης.

Εισάγοντας και εδώ την επαυξημένη συνάρτηση έχουμε:

$$\frac{d^2 F_{aug}}{dc_i db_l} = \frac{d^2 F}{dc_i db_l} + \Psi_{n,a} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l} + K_{in,a} \frac{dR_{n,a}}{db_l} \quad (6.7)$$

και αντικαθιστώντας τις εκφράσεις των $\frac{d^2 F}{dc_i db_l}$, $\frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l}$ και $\frac{dR_{n,a}}{db_l}$ από τις σχέσεις (6.1), (6.2) και (3.5) αντίστοιχα, έχουμε (μετά από αναδιάταξη των όρων) για την δεύτερη παράγωγο:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_{aug}}{dc_i db_l} &= \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial b_l} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + K_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} \\ &+ \left[\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + K_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right. \\ &+ \left. \Psi_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \right] \frac{dU_{k,d}}{db_l} \\ &+ \left(\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Μηδενίζοντας τους πολλαπλασιαστές των όρων $\frac{dU_{k,d}}{db_l}$, $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l}$ ώστε να αποφύγουμε το μεγάλο υπολογιστικό τους κόστος, οδηγούμαστε στη διατύπωση των συζυγών εξισώσεων.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} &= 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \Psi_{n,a} &= - \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \end{aligned} \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + K_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + \Psi_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) = 0 \quad (6.10)$$

Παρατηρούμε ότι η συζυγής εξίσωση (6.9) είναι ίδια με όλες τις συζυγείς εξισώσεις που έχουν αναφερθεί. Το κόστος των όρων που συναντώνται στον υπολογισμό των

δεύτερων μικτών παραγώγων δίνεται στον Πίνακα 6.1. Όπως παρατηρείται σε αυτόν τον πίνακα, το συνολικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου DD-AM είναι ανεξάρτητο του αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού.

Όρος	Υπολογιστικό Κόστος
Εξισώσεις ροής	1
$\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$	M
$\Psi_{n,a}$	1
$K_{in,a}$	M
Σύνολο	$2M + 2$

Πίνακας 6.1: Υπολογιστικό κόστος των όρων που συναντώνται στον υπολογισμό της $\frac{d^2F}{dc_idb_l}$ με τη μέθοδο DD-AM, σε επιλύσεις συστημάτων $np \times np$

Οι μικτές δεύτερες παράγωγοι δίνονται τελικά από τη σχέση

$$\frac{d^2F_{aug}}{dc_idb_l} = \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial b_l} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + K_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} \quad (6.11)$$

Εφαρμόζοντας την μέθοδο DD-AM για την εύρεση της δεύτερης παραγώγου, ως προς τις μικτές μεταβλητές (ως στιβαρή μεταβλητή θεωρείται ο αριθμός $M_{is(out)}$), της συνάρτησης $F = \int p dx$ και λαμβάνοντας υπόψη όσα έχουν αναφερθεί στην προηγούμενη ενότητα για τους όρους που συναντώνται στις εξισώσεις, έχουμε:

$$\frac{d^2F_{aug}}{dcdb_l} = \Psi_{n,d} \frac{\partial^2 R_{n,d}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc} + K_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} \quad (6.12)$$

Συγκρίνοντας το υπολογιστικό κόστος των δύο μεθόδων για τη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου $M = 1$, έχουμε $CPU_{DD-DD} = M+N+MN = 2N+1$ και $CPU_{DD-AM} = 2M+2 = 4$. Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού είναι αρκετά μεγάλος (σε πραγματικά προβλήματα μεγάλος διψήφιος ή τριψήφιος), είναι ξεκάθαρη η υπεροχή της DD-AM μεθόδου.

6.4 Συνεισφορά των οριακών συνθηκών

Στην παρούσα ενότητα θα διερευνηθεί η συνεισφορά των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής, \vec{U} , στη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης - στόχου F , ως προς τις μικτές μεταβλητές, αν ως στιβαρή μεταβλητή θεωρηθεί ο αριθμός $M_{is(out)}$.

Η ανάλυση που προηγήθηκε στην ενότητα 3.3.4 έδωσε τα ακόλουθα αποτελέσματα για τις παραγώγους των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής:

Οριακές συνθήκες εισόδου.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 p_{t1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= \frac{\partial^2 T_{t1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} &= d_1^A \frac{\partial^2 p_1}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} &= d_1^B \frac{\partial^2 p_2}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} \\
 \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}} &= d_1^C \frac{\partial^2 p_3}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}}
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Οριακές συνθήκες εξόδου.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 p_{np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} \\
 \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-1} \partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{2,np}}{\partial U_{k,np-2} \partial U_{m,np-2}} = 0 \\
 \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} &= \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-1} \partial U_{m,np-1}} = \frac{\partial^2 R_{3,np}}{\partial U_{k,np-2} \partial U_{m,np-2}} = 0
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

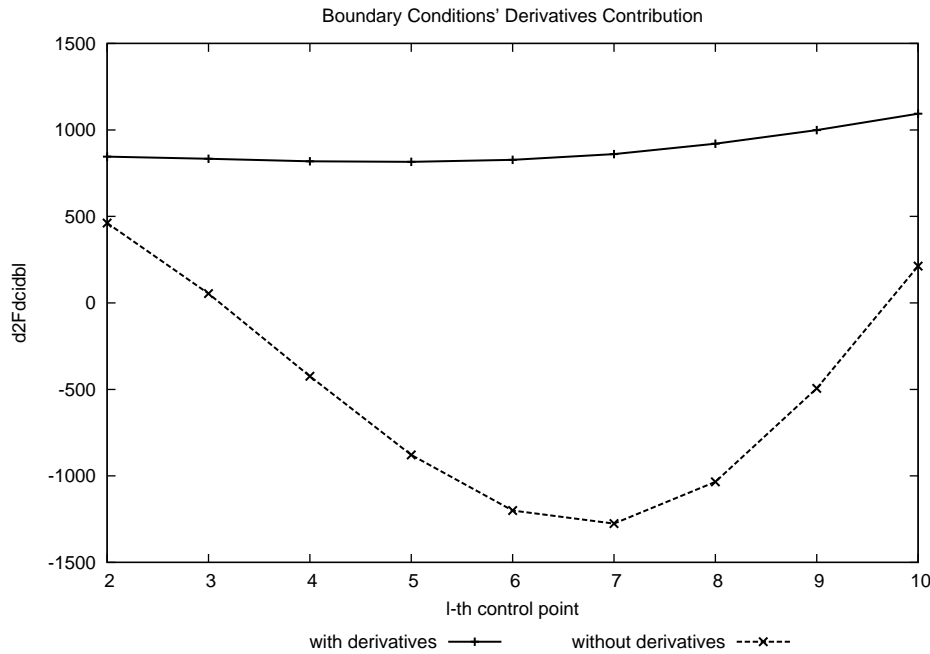
Οι δεύτερες μερικές παράγωγοι των μεγεθών p_t, T_t, p ως προς τις μεταβλητές της ροής, δίνονται από τις σχέσεις (3.41), (3.40) και (3.38) αντίστοιχα.

Για τη μέθοδο DD-AM, η συνεισφορά των οριακών συνθηκών στη τιμή της $\frac{d^2 F}{dcdb_i}$ γίνεται μέσω της δεύτερης συζυγούς εξίσωσης (σχέση (6.10)). Συγκεκριμένα, ο όρος που αντιστοιχεί στις παραγώγους των οριακών συνθηκών, ως προς τις μεταβλητές της ροής, δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned}
\left(\Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right)_{bc} &= \Psi_{1,1} \frac{\partial^2 R_{1,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} + \Psi_{2,1} \frac{\partial^2 R_{2,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} \\
&+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,1} \partial U_{m,1}} \frac{dU_{k,1}}{dc} + \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,2} \partial U_{m,2}} \frac{dU_{k,2}}{dc} \\
&+ \Psi_{3,1} \frac{\partial^2 R_{3,1}}{\partial U_{k,3} \partial U_{m,3}} \frac{dU_{k,3}}{dc} + \Psi_{1,np} \frac{\partial^2 R_{1,np}}{\partial U_{k,np} \partial U_{m,np}} \frac{dU_{k,np}}{dc}
\end{aligned} \tag{6.15}$$

Για τη μέθοδο DD-DD οι όροι των εξισώσεων (6.13) και (6.14) συμπεριλαμβάνονται στην εξίσωση (6.5), επηρεάζοντας τη τιμή του όρου $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc db_i}$, ο οποίος με τη σειρά του μεταβάλλει την τιμή της $\frac{d^2 F}{dc db_i}$.

Προγραμματίζοντας τη μέθοδο DD-AM, χωρίς τους όρους των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις μεταβλητές της ροής και στη συνέχεια συμπεριλαμβάνοντας τους, έχουμε τα ακόλουθα αποτελέσματα (πρόκειται για τον ίδιο αγωγό που παρουσιάζεται και στην ενότητα 3.3.4):



Σχήμα 6.1: Τιμές της $\frac{d^2 F}{dc db_i}$ με (συνεχής καμπύλη) και χωρίς (διακεκομμένη καμπύλη) τις παραγώγους των οριακών συνθηκών ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές της ροής. Οριζόντιος άξονας: αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της παραγώγου $\frac{d^2 F}{dc db_i}$.

Βλέπουμε λοιπόν ότι η συμβολή των παραγώγων των οριακών συνθηκών ως προς τις

συντηρητικές μεταβλητές της ροής, είναι σημαντική στο αποτέλεσμα των παραγώγων $\frac{d^2F}{dc_i db_i}$.

6.5 Υπολογισμός της Δεύτερης, Μικτής, Παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιαστεί ο τρόπος εύρεσης της δεύτερης, μικτής, παράγωγου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές και τις μεταβλητές σχεδιασμού με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Σε αυτή την περίπτωση η παράγωγος δίνεται από τη σχέση

$$\frac{d^2F}{dc_i db_i} = \frac{F(c_i + \epsilon_c, b_i + \epsilon_b) + F(c_i - \epsilon_c, b_i - \epsilon_b) - F(c_i + \epsilon_c, b_i - \epsilon_b) - F(c_i - \epsilon_c, b_i + \epsilon_b)}{4\epsilon_c \epsilon_b} \quad (6.16)$$

Το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου είναι $4MN$ υπολογισμοί της συνάρτησης - στόχου F , που ισοδυναμούν με ίσου πλήθους επιλύσεις της ροής. Συγκρίνοντας το κόστος αυτό με το τα κόστη των μεθόδων DD-DD και DD-AM βλέπουμε ότι είναι αρκετά μεγαλύτερο.

Μέθοδος	Υπολογιστικό Κόστος
DD-DD	$MN + M + N$
DD-AM	$2M + 2$
Πεπερασμένες Διαφορές	$4MN$

Πίνακας 6.2: Υπολογιστικό κόστος των διάφορων μεθόδων που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της $\frac{d^2F}{dc_i db_i}$, σε επιλύσεις συστημάτων $nr \times nr$

Στο πλαίσιο της διπλωματικής αυτής, η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών χρησιμεύει ως μέσο σύγκρισης για τις τιμές των παραγώγων που υπολογίστηκαν με τις μεθόδους DD-DD και DD-AM.

Τέλος διευκρινίζεται ότι προτού χρησιμοποιηθούν οι πεπερασμένες διαφορές είχε προηγηθεί διερεύνηση ως προς τις τιμές των ϵ_c, ϵ_b , έτσι ώστε οι υπολογισμένες παράγωγοι να είναι ανεξάρτητες των ποσοτήτων αυτών.

Κεφάλαιο 7

Υπολογισμός της τρίτης, μικτής, παραγώγου

7.1 Εισαγωγικά Σχόλια

Στο κεφάλαιο αυτό αναπτύσσεται ο κύριος σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Μέχρι στιγμής έχει παρουσιαστεί η εύρεση της πρώτης και δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, καθώς και η εύρεση της πρώτης και δεύτερης παραγώγου της ίδιας συνάρτησης, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές. Στόχος του παρόντος κεφαλαίου είναι η διατύπωση μιας τροποποιημένης συνάρτησης - στόχου \hat{F} , η οποία θα περιλαμβάνει και την εξάρτηση της συνάρτησης F από τις οριακές συνθήκες, καθώς και η ελαχιστοποίηση της συγκεκριμένης συνάρτησης. Η παράγωγος μιας τέτοιας συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού θα οδηγήσει, μέσω μιας διαδικασίας βελτιστοποίησης, στη μορφή ενός αγωγού, ο οποίος θα καλύπτει τις απαιτήσεις που θέτει ο χρήστης σε ένα μεγάλο εύρος καταστάσεων λειτουργίας. Ο αντίκτυπος μιας τέτοιας διαδικασίας σε ένα πραγματικό διδιάστατο ή τριδιάστατο πρόβλημα είναι πολύ σημαντικός, μιας και θα μπορούσε να οδηγήσει σε πτέρυγες που θα έχουν αποδεκτές τιμές σταθερών άνωσης και οπισθέλκουσας σε ένα μεγάλο εύρος αριθμών Mach ή γωνίας πρόσπτωσης της ροής, ή στο σχεδιασμό συμπίεστων με αποδεκτή συμπεριφορά σε μεγάλο εύρος ατμοσφαιρικών συνθηκών (η ολική πίεση και θερμοκρασία στην είσοδο, που χρησιμοποιούνται και σε αυτή τη διπλωματική εργασία ως οριακές συνθήκες, ταυτίζονται με τα αντίστοιχα περιβαλλοντικά μεγέθη). Όπως έχει αναφερθεί ήδη, σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας δεν είναι η επίλυση ενός πραγματικού προβλήματος, αλλά η διερεύνηση των δυνατοτήτων της μεθόδου και της συνεισφοράς των μεγεθών που περιλαμβάνονται σε αυτή.

Η μέση εκτιμώμενη τιμή της συνάρτησης F , για διαφορετικές τιμές των στιβαρών μεταβλητών, μπορεί να υπολογιστεί, όπως προτείνεται στη βιβλιογραφία [17], από το ανάπτυγμα Taylor της F , αν θεωρηθεί ότι οι στιβαρές μεταβλητές ακολουθούν κανονική κατανομή. Από τη διαδικασία προκύπτει

$$\hat{\mu}_F = F + \frac{1}{2} \frac{d^2 F}{dc_i^2} \sigma_i^2 \quad (7.1)$$

όπου $\sigma_i, i \in [1, M]$ οι μεταβλητότητες των στιβαρών μεταβλητών. Αφού θεωρείται ότι οι στιβαρές μεταβλητές ακολουθούν κανονική κατανομή, τότε σ_i είναι η τυπική απόκλιση της i -οστής μεταβλητής.

Με όμοιο τρόπο μπορεί να υπολογιστεί η μεταβλητότητα της εκτίμησης της μέσης τιμής της συνάρτησης F ως

$$\hat{\sigma}_F = \sqrt{\left[\frac{dF}{dc_i} \right]^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \right]^2 \sigma_i^2 \sigma_j^2} \quad (7.2)$$

Διαφορίζοντας τις (7.1),(7.2) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού έχουμε

$$\frac{d\hat{\mu}_F}{db_l} = \frac{dF}{db_l} + \frac{1}{2} \frac{d^3 F}{dc_i^2 db_l} \sigma_i^2 \quad (7.3)$$

$$\frac{d\hat{\sigma}_F}{db_l} = \frac{2 \frac{dF}{dc_i} \frac{d^2 F}{dc_i db_l} \sigma_i^2 + \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} \sigma_i^2 \sigma_j^2}{2 \sqrt{\left[\frac{dF}{dc_i} \right]^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \right]^2 \sigma_i^2 \sigma_j^2}} \quad (7.4)$$

Μια τροποποιημένη συνάρτηση που περιλαμβάνει την F αλλά και την εξάρτηση της F από τις στιβαρές μεταβλητές μπορεί να θεωρηθεί η

$$\hat{F} = \hat{\mu}_F + k \hat{\sigma}_F \quad (7.5)$$

Η σταθερά k δηλώνει το περιθώριο που έχει η συνάρτηση F να κινηθεί γύρω από τη μέση εκτιμώμενη τιμή της. Αν επιθυμούμε την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης \hat{F} , μικρή τιμή της σταθεράς k σημαίνει επιθυμία για ικανοποιητική απόδοση σε μεγάλο εύρος εξωτερικών συνθηκών (μικρή μεταβλητότητα), ενώ μεγάλη τιμή της k σημαίνει ότι επικεντρώνουμε την προσοχή μας στην απόδοση στο σημείο λειτουργίας, με μειονέκτημα τη μεγάλη μεταβλητότητα της λύσης σε πιθανή αλλαγή των συνθηκών λειτουργίας. Διαφορίζοντας τη σχέση (7.5) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού (ή σωστότερα μεταβλητές ελέγχου της γεωμετρίας) έχουμε

$$\frac{d\hat{F}}{db_l} = \frac{dF}{db_l} + \frac{1}{2} \frac{d^3 F}{dc_i^2 db_l} \sigma_i^2 + k \frac{2 \frac{dF}{dc_i} \frac{d^2 F}{dc_i db_l} \sigma_i^2 + \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} \sigma_i^2 \sigma_j^2}{2 \sqrt{\left[\frac{dF}{dc_i} \right]^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \right]^2 \sigma_i^2 \sigma_j^2}} \quad (7.6)$$

Οι όροι $\frac{dF}{db_l}, \frac{dF}{dc_i}, \frac{d^2 F}{dc_i dc_j}, \frac{d^3 F}{dc_i db_l}$ αναλύονται εκτενώς στα Κεφάλαια 3,4,5 και 6 αντίστοιχα.

Απομένει λοιπόν η εύρεση του όρου $\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$. Μετά τον υπολογισμό της παραγώγου $\frac{d\hat{F}}{db_l}$, θα γίνει η ένταξη της σε σχήμα βελτιστοποίησης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου και θα δοθεί ο αντίστοιχος αλγόριθμος σχεδιαμού.

7.2 Υπολογισμός της τρίτης παραγώγου

Η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές με τη μέθοδο DD-DD, μπορεί να υπολογιστεί από τις σχέσεις (5.1),(5.2)

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} &= \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ &+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \end{aligned} \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i dc_j} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} = 0 \end{aligned} \quad (7.8)$$

Διαφορίζοντας την (7.7) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και λαμβάνοντας υπόψη ότι η F εξαρτάται άμεσα, αλλά και μέσω της μεταβολής των μεταβλητών της ροής, από το διάνυσμα \vec{b} έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\ &+ \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\ &+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\ &+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\ &+ \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{d^2 U_{m,e}}{dc_j db_l} \\ &+ \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \end{aligned} \quad (7.9)$$

με $i, j \in [1, M]$, όπου M ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών, $l \in [1, N]$, όπου N ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού, $k, m, n, q \in [1, 3]$ και $a, d, e, g \in [1, np]$, όπου np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

Αναδιατάσσοντας τους όρους ώστε να ξεχωρίσουν οι μηδενικής, πρώτης, δεύτερης και τρίτης τάξης παράγωγοι των μεταβλητών της ροής, ως προς τις μικτές μεταβλητές (στιβαρές και σχεδιασμού):

$$\begin{aligned}
\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\
&+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\
&+ \left(\frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\
&+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \tag{7.10}
\end{aligned}$$

Οι παράγωγοι του τελεστή της ροής, R , ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού:

$$\frac{dR_{n,a}}{db_l} = \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{q,g}} \frac{dU_{q,g}}{db_l} = 0 \tag{7.11}$$

και ως προς τις μικτές μεταβλητές:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} = 0 \tag{7.12}
\end{aligned}$$

Αναδιατάσσοντας τους όρους

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} = 0 \tag{7.13}
\end{aligned}$$

Οι παράγωγοι του R ως προς τις μικτές μεταβλητές, με αντίστροφη σειρά παραγωγίσις

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 R_{n,a}}{db_l dc_j} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} = 0 \tag{7.14}
\end{aligned}$$

και αναδιατάσσοντας τους όρους

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_{n,a}}{db_l dc_j} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} = 0 \end{aligned} \quad (7.15)$$

Διαφορίζοντας την (7.8) ως προς τις μεταβλητές της ροής και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\vec{R}(\vec{U}, \vec{b})$ έχουμε (αναδιατάσσοντας τους όρους) :

$$\begin{aligned} \frac{d^3 R_{n,a}}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\ &+ \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\ &+ \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\ &+ \left. \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\ &+ \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\ &+ \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\ &+ \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \end{aligned} \quad (7.16)$$

Οι όροι $\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$, $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$, $\frac{dU_{q,g}}{db_l}$, $\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l}$, $[\frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l}]$ και $\frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i db_j db_l}$ μπορούν να υπολογιστούν από τις σχέσεις (4.2), (7.8), (7.11), (7.13), [(7.15)] και (7.16) (fully direct approach). Ο υπολογισμός των τρίτων, μικτών, παραγώγων, έχοντας γνωστά τα ανωτέρω μητρώα μπορεί να γίνει από τη σχέση (7.10).

Εφαρμόζοντας τις σχέσεις του πίνακα 7.1 έχουμε για :

CPU cost για M=1: 3+3N επιλύσεις συστημάτων $np \times np$

CPU cost για M=2: 6+6N επιλύσεις συστημάτων $np \times np$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $N \gg M$ (οι μεταβλητές σχεδιασμού είναι πολύ περισσότερες από τις στιβαρές μεταβλητές), η ακόλουθη συζυγής προσέγγιση του προβλήματος, είναι εμφανώς οικονομικότερη. Η επαυξημένη συνάρτηση της τρίτης παραγώγου ορίζεται ως:

$$\frac{d^3 F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} = \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} + K_{ijn,a} \frac{dR_{n,a}}{db_l} + L_{jn,a} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_i db_l} + M_{in,a} \frac{d^2 R_{n,a}}{dc_j db_l} + N_{n,a} \frac{d^3 R_{n,a}}{dc_i dc_j db_l} \quad (7.17)$$

Όρος	Υπολογιστικό Κόστος
Εξισώσεις ροής	1
$\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$	M
$\frac{d^2U_{k,d}}{dc_i dc_j}$	$\frac{M(M+1)}{2}$
$\frac{dU_{q,g}}{db_l}$	N
$\frac{d^2U_{k,d}}{dc_i db_l}$	$N \cdot M$
$\frac{d^2U_{k,d}}{dc_j db_l}$	0 (ίδιος με τον προηγούμενο όρο)
$\frac{d^3U_{k,d}}{dc_i db_j db_l}$	$N \frac{M(M+1)}{2}$
Σύνολο	$1 + M + N + N \cdot M + \frac{M(M+1)(N+1)}{2} =$ $(N + 1)(M + 1) \frac{M+2}{2}$

Πίνακας 7.1: Υπολογιστικό κόστος των όρων που περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της $\frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$ με τη μέθοδο DD-DD-DD, σε επιλύσεις συστήματων $np \times np$

Αντικαθιστώντας τους όρους που περιλαμβάνονται στην ανωτέρω εξίσωση από τις σχέσεις (7.10), (7.11), (7.12), (7.14) και (7.16) έχουμε:

$$\begin{aligned}
\frac{d^3 F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\
&+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\
&+ \left(\frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\
&+ \frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \\
&+ K_{ijn,a} \left(\frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{q,g}} \frac{dU_{q,g}}{db_l} \right) \\
&+ L_{jn,a} \left[\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \right] \\
&+ M_{in,a} \left[\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \right. \\
&+ \left. \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} + \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \right] \\
&+ N_{n,a} \left[\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\
&+ \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\
&+ \left. \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \right] \tag{7.18}
\end{aligned}$$

Αναδιατάσσοντας του όρους, έτσι ώστε να διαχωριστούν οι απλές και μικτές παράγωγοι των συντηρητικών μεταβλητών ως προς τις μεταβλητές σχεδιαμού, έχουμε:

$$\begin{aligned}
\frac{d^3 F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\
&+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\
&+ K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + L_{jn,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \\
&+ M_{in,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \right) \\
&+ N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \\
&+ \left[\frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} + K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{q,g}} \right. \\
&+ L_{jn,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \\
&+ M_{in,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \\
&+ N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right. \\
&+ \left. \left. \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \right] \frac{dU_{q,g}}{db_l} \\
&+ \left[\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right. \\
&+ \left. L_{jn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \right] \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i db_l} \\
&+ \left[\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right. \\
&+ \left. M_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) \right] \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_j db_l} \\
&+ \left(\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} \right) \frac{d^3 U_{k,d}}{dc_i dc_j db_l} \tag{7.19}
\end{aligned}$$

Στόχος της συζυγούς τεχνικής είναι η αποφυγή υπολογισμού των παραγώγων των συντηρητικών μεταβλητών ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, λόγω του μεγάλου αριθμού των τελευταίων. Μετά την αναδιάταξη των όρων στη σχέση (7.19), η διατύπωση των συζυγών εξισώσεων είναι εύκολη:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\
& + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} + K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{q,g}} \\
& + L_{jn,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) + M_{in,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) \\
& + N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \right. \\
& \left. + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) = 0
\end{aligned} \tag{7.20}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + L_{jn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \right) = 0 \tag{7.21}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} + M_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} \right) = 0 \tag{7.22}$$

Η σχέση (7.22) είναι ίδια με τη (7.21) και συνεπώς $M_{in,a} = L_{jn,a}$. Η τελευταία συζυγής εξίσωση:

$$\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} = 0 \tag{7.23}$$

Η σειρά επίλυσης των συζυγών εξισώσεων είναι η (7.23) (υπολογισμός $N_{n,a}$), (7.21) (υπολογισμός $L_{jn,a}$) και τέλος (7.20) (υπολογισμός $K_{ijn,a}$).

Εφαρμόζοντας τις σχέσεις του πίνακα 7.2 έχουμε:

CPU cost για M=1: 6 επιλύσεις συστημάτων $np \times np$

CPU cost για M=2: 12 επιλύσεις συστημάτων $np \times np$

Παρατηρούμε ότι η αυτή η προσέγγιση (μπορεί να ονομασθεί DD-DD-AM) είναι σαφώς οικονομικότερη από την πλήρως ευθεία προσέγγιση, δεδομένου ότι οι μεταβλητές σχεδιασμού είναι πολύ περισσότερες από τις στιβαρές μεταβλητές ($N \gg M$). Μεγάλο

Όρος	Υπολογιστικό Κόστος
Εξισώσεις ροής	1
$\frac{dU_{k,d}}{dc_i}$	M
$\frac{d^2U_{k,d}}{dc_i dc_j}$	$\frac{M(M+1)}{2}$
$K_{ijn,a}$	$\frac{M(M+1)}{2}$
$L_{jn,a}$	M
$M_{in,a}$	0 (ίδιος με τον προηγούμενο όρο)
$N_{n,a}$	1
Σύνολο	$2 + 3M + M^2$

Πίνακας 7.2: Υπολογιστικό κόστος των όρων που περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της $\frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$ με τη μέθοδο DD-DD-AM, σε επιλύσεις συστήματων $np \times np$.

πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι ότι το υπολογιστικό της κόστος, είναι ανεξάρτητο του αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού.

Τέλος αφαιρώντας από τη σχέση (7.19) τους μηδενικούς όρους που προκύπτουν από τη διατύπωση των συζυγών εξισώσεων, έχουμε τον τύπο που δίνει τη τρίτη παράγωγο:

$$\begin{aligned}
\frac{d^3F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \\
&+ \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \\
&+ K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + L_{jn} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) + M_{in,a} \left(\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \right) \\
&+ N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} + \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \right) \\
&+ \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}
\end{aligned} \tag{7.24}$$

7.3 Εφαρμογή των εξισώσεων της τρίτης παραγώγου

Στην παρούσα ενότητα θα γίνει εφαρμογή των εξισώσεων της τρίτης παραγώγου στην περίπτωση που ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρείται ο αριθμός $M_{is(out)}$.

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{\partial F}{\partial c} = 0$ (σχέση (4.7)), έχουμε για τους ακόλουθους όρους :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} = \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial U_{k,d}} = \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} \\ &= \frac{\partial^3 F}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} = \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} = 0 \end{aligned} \quad (7.25)$$

Επίσης, λαμβάνοντας υπόψη τη συνάρτηση - στόχο ($\int p dx$) και την επιλογή μας για σταθερούς κόμβους στο πλέγμα έχουμε, $\frac{\partial F}{\partial b_l} = 0$. Συνεπώς, για τους ακόλουθους όρους ισχύει:

$$\frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} = \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial b_l} = 0 \quad (7.26)$$

Επιπλέον ανατρέχοντας στη σχέση (5.6) έχουμε $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d}} = \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j} = 0$. Από την ίδια σχέση συνεπάγεται ότι :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{q,g}} &= \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial c_j} = \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial U_{q,g}} = \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} = \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial U_{q,g}} = \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial U_{k,d} \partial b_l} \\ &= \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial c_j \partial b_l} = 0 \end{aligned} \quad (7.27)$$

Τέλος διαφορίζοντας τη σχέση (4.6) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού έχουμε:

$$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial c_i \partial b_l} = \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial c_j} = 0 \quad (7.28)$$

από την οποία συνεπάγεται ότι

$$\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial c_i \partial c_j \partial b_l} = 0 \quad (7.29)$$

Απαλείφοντας τους μηδενικούς όρους των σχέσεων (7.25) ως (7.29) από τις συζυγείς εξισώσεις και τη σχέση υπολογισμού των τρίτων παραγώγων έχουμε :

Πρώτη συζυγής εξίσωση:

$$\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} = 0 \quad (7.30)$$

Πρόκειται για τη συζυγή εξίσωση που έχει συναντηθεί αρκετές φορές ως τώρα. Η επίλυση της εξηγείται από τη σχέση (3.16).

Δεύτερη συζυγής εξίσωση:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} + M_{in,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}} + N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i} = 0 \quad (7.31)$$

Με τα μητρώα $\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$ και $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}}$, γνωστά από τις σχέσεις (3.21) και (3.30) (για τους εσωτερικούς κόμβους), καθώς και τη συζυγή μεταβλητή $N_{n,a}$ γνωστή από τη σχέση (7.30), υπολογίζεται εύκολα η συζυγής μεταβλητή $M_{n,a} = L_{n,a}$ (αφού $i = 1$).

Τρίτη συζυγής εξίσωση:

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η δεύτερη συζυγής εξίσωση ταυτίζεται με τη τρίτη. Έχουμε συνεπώς:

$$L_{n,a} = M_{n,a} \quad (7.32)$$

Τέταρτη συζυγής εξίσωση:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} + K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{q,g}} \\ & + L_{jn,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + M_{in,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} \\ & + N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) = 0 \end{aligned} \quad (7.33)$$

Ο όρος $\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}}$ δίνεται από τη σχέση (3.21). Διαφορίζοντας αυτή τη σχέση ως προς τις μεταβλητές της ροής έχουμε:

$$\frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,d} \partial U_{q,d}} = (\gamma - 1) G_d \Delta x_d \quad (7.34)$$

όπου:

$$G_d = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{3u^2}{\rho^2} & -\frac{2u}{\rho^2} & 0 \\ -\frac{2u}{\rho^2} & \frac{1}{\rho^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -\frac{2u}{\rho^2} & \frac{1}{\rho^2} & 0 \\ \frac{1}{\rho^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}_d \quad (7.35)$$

ενώ $\frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} = 0$ για $d \neq e, g$.

Οι όροι $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}}$, $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{q,g} \partial U_{m,e}}$, $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}}$ δίνονται, για τους εσωτερικούς κόμβους, από τη σχέση (3.30). Διαφορίζοντας τη συγκεκριμένη σχέση ως προς τις μεταβλητές της ροής έχουμε:

$$\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,a} \partial U_{m,a} \partial U_{q,a}} = \left[\frac{1}{S} \frac{ds}{dx} \right] H_a \Delta x_a \quad (7.36)$$

όπου :

$$H_a = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -\frac{6u^2}{\rho^2} & \frac{4u}{\rho^2} & 0 \\ \frac{4u}{\rho^2} & -\frac{2}{\rho^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{-6\gamma Eu + 12(\gamma-1)u^3}{\rho^2} & \frac{2\gamma E - 9(\gamma-1)u^2}{\rho^2} & \frac{2\gamma u}{\rho^2} \\ \frac{2\gamma E - 9(\gamma-1)u^2}{\rho^2} & \frac{6(\gamma-1)u}{\rho^2} & -\frac{\gamma}{\rho^2} \\ \frac{2\gamma u}{\rho^2} & -\frac{\gamma}{\rho^2} & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{4u}{\rho^2} & -\frac{2u}{\rho^2} & 0 \\ -\frac{2}{\rho^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{2\gamma E - 9(\gamma-1)u^2}{\rho^2} & \frac{6(\gamma-1)u}{\rho^2} & -\frac{\gamma}{\rho^2} \\ \frac{6(\gamma-1)u}{\rho^2} & -\frac{3(\gamma-1)}{\rho^2} & 0 \\ -\frac{\gamma}{\rho^2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{2\gamma u}{\rho^2} & -\frac{\gamma}{\rho^2} & 0 \\ -\frac{\gamma}{\rho^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}_a \quad (7.37)$$

Ο δείκτης n δείχνει τη στήλη του πίνακα H_a , ο δείκτης k τον υποπίνακα της στήλης n , ο δείκτης m τη γραμμή του υποπίνακα k και ο δείκτης q τη στήλη του υποπίνακα k .

Με τα ανωτέρω μητρώα γνωστά, τις $\frac{\partial U_{k,d}}{\partial c_i}, \frac{\partial^2 U_{k,d}}{\partial c_i \partial c_j}$ υπολογισμένες με τη μέθοδο της ευθείας διαφορίσης και τις συζυγείς μεταβλητές $N_{n,a}, M_{n,a}, L_{n,a}$ να δίνονται από τις σχέσεις (7.30), (7.31), (7.32), υπολογίζεται η συζυγής μεταβλητή $K_{ijn,a} = K_{n,a}$ (μιας και $i = j = 1$), από τη σχέση (7.33).

Με όλες τις συζυγείς μεταβλητές γνωστές, η τρίτη παράγωγος της συνάρτησης στόχου δίνεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \frac{d^3 F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} &= K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + L_{jn} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + M_{in,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \\ &+ N_{n,a} \left(\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \right) \end{aligned} \quad (7.38)$$

με τους όρους $\frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l}, \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l}, \left[\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \right]$ να δίνονται από τις σχέσεις (3.7), (3.30), [(3.30)] και τον όρο $\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l}$ να προκύπτει διαφορίζοντας τη σχέση (3.30) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού:

$$\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} = \left[\frac{1}{S} \frac{d}{db_l} \left(\frac{dS}{dx} \right) - \frac{1}{S^2} \frac{dS}{dx} \frac{dS}{db_l} \right]_a T_a \Delta x_a \quad (7.39)$$

με :

$$T_a = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{2u^2}{\rho} & -\frac{2u}{\rho} & 0 \\ -\frac{2u}{\rho} & \frac{2}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{(2\gamma Eu) - 3u^3(\gamma-1)}{3u^2(\gamma-1) - \gamma E} & \frac{3u^2(\gamma-1) - \gamma E}{-3u(\gamma-1)} & -\frac{\gamma u}{\rho} \\ -\frac{\gamma u}{\rho} & \frac{\gamma}{\rho} & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}_a \quad (7.40)$$

ενώ $\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} = 0$ για $a \neq d, e$.

7.4 Υπολογισμός της τρίτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται η εύρεση της τρίτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.

Από τις σχέσεις (5.16) και (5.17) έχουμε τις εκφράσεις για τη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης F ως προς τις στιβαρές μεταβλητές:

$$\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} = \frac{F(c_i + \epsilon_c, c_j + \epsilon_c) + F(c_i - \epsilon_c, c_j - \epsilon_c) - F(c_i + \epsilon_c, c_j - \epsilon_c) - F(c_i - \epsilon_c, c_j + \epsilon_c)}{4\epsilon_c^2} \quad (7.41)$$

ενώ για $i = j$ ισχύει:

$$\frac{d^2 F}{dc_i^2} = \frac{F(c_i + \epsilon_c) - 2F(c_i) + F(c_i - \epsilon_c)}{\epsilon_c^2} \quad (7.42)$$

Διαφορίζοντας τις ανωτέρω εξισώσεις ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, έχουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} = & [F(c_i + \epsilon_c, c_j + \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) - F(c_i + \epsilon_c, c_j + \epsilon_c, b_l - \epsilon_b) + F(c_i - \epsilon_c, c_j - \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) \\ & - F(c_i - \epsilon_c, c_j - \epsilon_c, b_l - \epsilon_b) - F(c_i + \epsilon_c, c_j - \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) + F(c_i + \epsilon_c, c_j - \epsilon_c, b_l - \epsilon_b) \\ & - F(c_i - \epsilon_c, c_j + \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) + F(c_i - \epsilon_c, c_j + \epsilon_c, b_l - \epsilon_b)] \frac{1}{8\epsilon_c^2 \epsilon_b} \end{aligned} \quad (7.43)$$

ενώ για $i = j$ ισχύει:

$$\begin{aligned} \frac{d^3 F}{dc_i^2 db_l} = & [F(c_i + \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) - F(c_i + \epsilon_c, b_l - \epsilon_b) - 2F(c_i, b_l + \epsilon_b) + 2F(c_i, b_l - \epsilon_b) \\ & + F(c_i - \epsilon_c, b_l + \epsilon_b) - F(c_i - \epsilon_c, b_l - \epsilon_b)] \frac{1}{2\epsilon_c^2 \epsilon_b} \end{aligned} \quad (7.44)$$

Το υπολογιστικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών, εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου ως προς τις στιβαρές μεταβλητές είναι συμμετρικό μητρώο, δίνεται στον πίνακα 7.3.

Εφαρμόζοντας τις σχέσεις του πίνακα 7.3 έχουμε:

CPU cost για $M=1$: $6N$ επιλύσεις της ροής. Εδώ υπάγεται και η περίπτωση που μοναδική στιβαρή μεταβλητή είναι ο αριθμός $M_{is(out)}$

CPU cost για $M=2$: $20N$ επιλύσεις της ροής

Όρος	Υπολογιστικό Κόστος
Σχέση (7.43)($i \neq j$)	$\frac{8M(M-1)N}{2} = 4M(M-1)N$
Σχέση (7.44)($i = j$)	$6MN$
Σύνολο	$MN(4M+2)$

Πίνακας 7.3: Υπολογιστικό κόστος των όρων που περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της $\frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$ με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, σε επιλύσεις της ροής.

Μέθοδος	Υπολογιστικό Κόστος
$DD - DD - DD$	$(N+1)(M+1)\frac{M+2}{2}$
$DD - DD - AM$	$2 + 3M + M^2$
Πεπερασμένες διαφορές	$MN(4M+2)$

Πίνακας 7.4: Σύγκριση υπολογιστικού κόστους εύρεσης της $\frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$ για τις διάφορες μεθόδους.

Στον πίνακα 7.4 παρουσιάζεται το υπολογιστικό κόστος των τριών μεθόδων για τον υπολογισμό της τρίτης παραγώγου που έχουν αναπτυχθεί στο παρόν κεφάλαιο.

Από τους ανωτέρω πίνακες είναι εμφανές ότι το υπολογιστικό κόστος εφαρμογής της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών είναι πολύ υψηλό. Ωστόσο η μέθοδος είναι αρκετά απλή στον προγραμματισμό και μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως βάση σύγκρισης για τα αποτελέσματα που έχουν προκύψει από τις άλλες δυο μεθόδους.

Πρέπει επίσης να τονισθεί ότι είναι απαραίτητη η διερεύνηση της συμπεριφοράς της τρίτης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, με διαφορετικές τιμές των σταθερών ϵ . Για να διευκολυνθεί η εύρεση λύσης ανεξάρτητης του ϵ , έχουν εισαχθεί δυο τέτοιες σταθερές, οι ϵ_c, ϵ_b , λόγω και του διαφορετικού επιπέδου τιμών που έχει η κάθε φυσική ποσότητα. Η πρώτη σταθερά αναφέρεται στη μεταβολή των στιβαρών μεταβλητών και η δεύτερη στη μεταβολή των μεταβλητών σχεδιασμού. Η τρίτη παράγωγος είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη στις τιμές των ϵ , μιας και το γινόμενο τους βρίσκεται στον παρονομαστή και στην τρίτη δύναμη (θυμίζουμε ότι οι σταθερές ϵ έχουν ιδιαίτερα μικρή τιμή.)

7.5 Σχεδιασμός με τη μέθοδο απότομης καθόδου

Η μέθοδος της απότομης καθόδου (steepest descent) απαιτεί σε κάθε νέο βήμα τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης - στόχου. Η ανανέωση της μορφής του αγωγού γίνεται σύμφωνα με τη σχέση:

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

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

7.6 Αλγόριθμος σχεδιασμού

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιαστεί ο αλγόριθμος σχεδιασμού αγωγού, στον οποίο εμπλέκονται και οι στιβαρές μεταβλητές. Συγκεκριμένα θα παρουσιαστεί ο αλγόριθμος στην περίπτωση που ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρείται ο αριθμός $M_{is(out)}$. Σε αυτή την περίπτωση η παράγωγος της τροποποιημένης συνάρτησης στόχου \hat{F} ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{d\hat{F}}{db_l} = \frac{dF}{db_l} + \frac{1}{2} \frac{d^3F}{dc^2 db_l} \sigma_M^2 + k \frac{2 \frac{dF}{dc} \frac{d^2F}{dc db_l} \sigma_M^2 + \frac{d^2F}{dc^2} \frac{d^3F}{dc^2 db_l} \sigma_M^2 \sigma_M^2}{2 \sqrt{\left[\frac{dF}{dc}\right]^2 \sigma_M^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2F}{dc^2}\right]^2 \sigma_M^2 \sigma_M^2}} \quad (7.45)$$

Η μεταβλητότητα σ_M δηλώνει το περιθώριο που έχει ο αριθμός *Mach* να κινηθεί γύρω από τη μέση τιμή του. Συγκεκριμένα, όπως γνωρίζουμε από τη στατιστική, το 99,87% των τιμών μιας μεταβλητής που ακολουθεί την κανονική κατανομή βρίσκεται στο διάστημα $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$, όπου σ η τυπική απόκλιση της κατανομής και μ η μέση τιμή της. Αν η μέση τιμή του αριθμού *Mach* είναι 0.3, μια ενδεικτική τιμή της μεταβλητότητας θα μπορούσε να είναι $\sigma_M = 0.01$. Έτσι στη βελτιστοποίηση που θα γίνει το 99,87% των πιθανών τιμών του αριθμού *Mach* βρίσκεται στο διάστημα $M \in [0.27, 0.33]$.

Ο αλγόριθμος σχεδιασμού για την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης \hat{F} είναι ο εξής:

- Βήμα 1:
Δίνεται αρχική τιμή στο μετρητή των κύκλων και επιλέγεται η αρχική γεωμετρία, δηλαδή ένα αρχικό σύνολο τιμών των N μεταβλητών σχεδιασμού. Δίνεται επίσης η μέση τιμή του αριθμού *Mach*

- Βήμα 2:
Χρησιμοποιείται ως συνάρτηση παρεμβολής το πολυώνυμο Bezier-Bernstein, ώστε να σχηματιστεί η γεωμετρία του αγωγού (κατανομή $S(x)$ που αντιστοιχεί στις τρέχουσες τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού).
- Βήμα 3:
Επιλύεται το ευθύ πρόβλημα (εξισώσεις ροής, Κεφάλαιο 2)
- Βήμα 4:
Υπολογίζονται η τιμή της συνάρτησης F καθώς και οι τιμές των παραγώγων $\frac{dF}{dc_i}, \frac{d^2F}{dc_i dc_j}$ (Κεφάλαια 4 και 5). Με γνωστά αυτά τα μεγέθη υπολογίζονται η μέση εκτιμώμενη τιμή $\hat{\mu}_F$ και η μεταβλητότητα της μέσης εκτιμώμενης τιμής $\hat{\sigma}_F$ (σχέσεις (7.1) και (7.2)). Έπειτα βρίσκεται η τιμή της \hat{F} (σχέση (7.5)).
- Βήμα 5:
Εφαρμόζεται κριτήριο σύγκλισης που δίνεται από το χρήστη. Λόγω της ιδιομορφίας της συνάρτησης - στόχου, η τιμή του κριτηρίου σύγκλισης μπορεί να απαιτεί πειραματισμό. Αν ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης, ο αλγόριθμος σταματά εδώ.
- Βήμα 6:
Υπολογίζονται οι τιμές των παραγώγων $\frac{d^2F}{dc_i db_l}, \frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$ από τα Κεφάλαια 6 και 7.
- Βήμα 7:
Υπολογίζονται οι τιμές των παραγώγων ευαισθησίας της συνάρτησης \hat{F} από τη σχέση (7.45).
- Βήμα 8:
Διορθώνονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου.
- Βήμα 9:
Ένας νέος κύκλος ξεκινά από το βήμα 2.

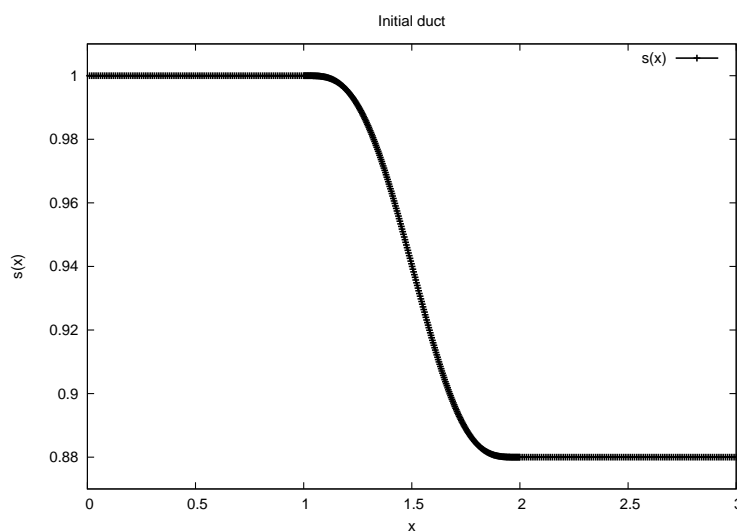
Κεφάλαιο 8

Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

8.1 Σχόλια

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα των παραγώγων πρώτης, δεύτερης και τρίτης τάξης που αναλύθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια, θα γίνει διερεύνηση της σημαντικότητας των όρων που περιέχονται στις συγκεκριμένες παραγωγούς ταυτόχρονα με την παρουσίαση των απαιτήσεων μνήμης του κάθε όρου και τέλος θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης της τροποποιημένης συνάρτησης - στόχου \hat{F} (robust design). Έμφαση θα δοθεί κυρίως στις συζυγείς μεθόδους μιας και παρουσιάζουν το μικρότερο υπολογιστικό κόστος.

Η αρχική γεωμετρία του αγωγού στην οποία θα αναφέρονται τα περισσότερα σχήματα των ακόλουθων ενοτήτων δίνεται στο Σχήμα 8.1.



Σχήμα 8.1: Αρχική γεωμετρία του αγωγού. Οριζόντιος άξονας: μήκος αγωγού. Κατακόρυφος άξονας: Διατομή του αγωγού στη θέση x .

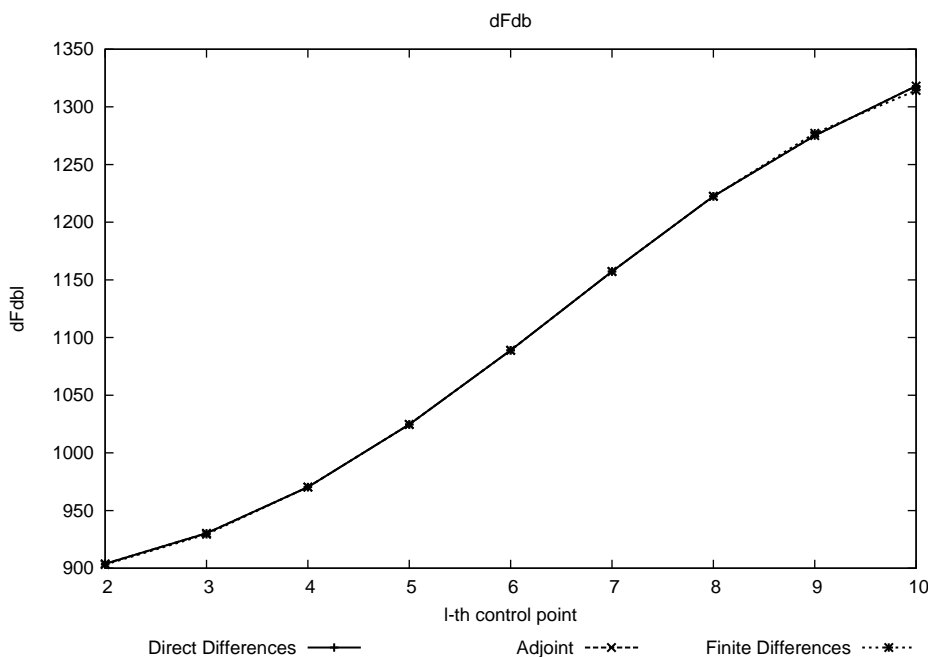
Παρατηρούμε ότι το πλέγμα είναι πυκνότερο στο καμπύλο κομμάτι, όπου τα μεγέθη έ-

χουν εντονότερες μεταβολές και στο οποίο απαιτούμε μεγάλη ακρίβεια αποτελεσμάτων. Αντίθετα το πλέγμα είναι αραιότερο στα ευθύγραμμα τμήματα εισόδου και εξόδου στα οποία η μεταβολή των περισσότερων μεγεθών είναι μηδενική, μειώνοντας έτσι τις απαιτήσεις μνήμης. Την επιλογή αυτή επέτρεψε η χρήση παραγώγων για μη ισαπέχοντες κόμβους (Παράρτημα Α').

8.2 Πρώτη Παράγωγος ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού και τη Στιβαρή Μεταβλητή

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$ ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τις διάφορες μεθόδους που αναλύθηκαν στο Κεφάλαιο 3, καθώς και η τιμή της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης F αν ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρηθεί ο αριθμός $M_{is(out)}$.

Αναλυτικότερα, οι τιμές της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, που αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1, δίνονται στο Σχήμα 8.2.



Σχήμα 8.2: Πρώτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της πρώτης παραγώγου $\frac{dF}{db_l}$.

Όπως έχει αναφερθεί και προηγουμένως, δε τυπώνονται οι τιμές των παραγώγων που

αναφέρονται στην πρώτη και τελευταία μεταβλητή σχεδιασμού, μιας και επιθυμούμε να κρατήσουμε σταθερή τη διατομή εισόδου και εξόδου του αγωγού.

Παρατηρώντας το Σχήμα 8.2 βλέπουμε ότι οι τιμές της πρώτης παραγωγού, υπολογισμένες με τη μέθοδο ευθείας διαφορίσης και τη συζυγή μέθοδο ουσιαστικά ταυτίζονται με τις τιμές που προκύπτουν από τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Αυτό σημαίνει ότι η παραδοχή (2.36) δεν επηρεάζει τις τιμές των πρώτων παραγωγών της συνάρτησης - στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Υπενθυμίζουμε ότι η παραδοχή που έχει γίνει είναι

$$\frac{\partial A^+}{\partial \vec{U}} = 0, \quad \frac{\partial A^-}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (8.1)$$

Η τιμή της πρώτης παραγωγού της συνάρτησης F ως προς τον αριθμό $M_{is(out)}$, υπολογισμένη με τις διάφορες μεθόδους που αναφέρονται στο Κεφάλαιο 4 δίνεται στον Πίνακα 8.1.

Μέθοδος	$\frac{dF}{dc}$
Direct Differentiation	-101403.340
Adjoint	-101403.340
Πεπερασμένες διαφορές	-101400.714

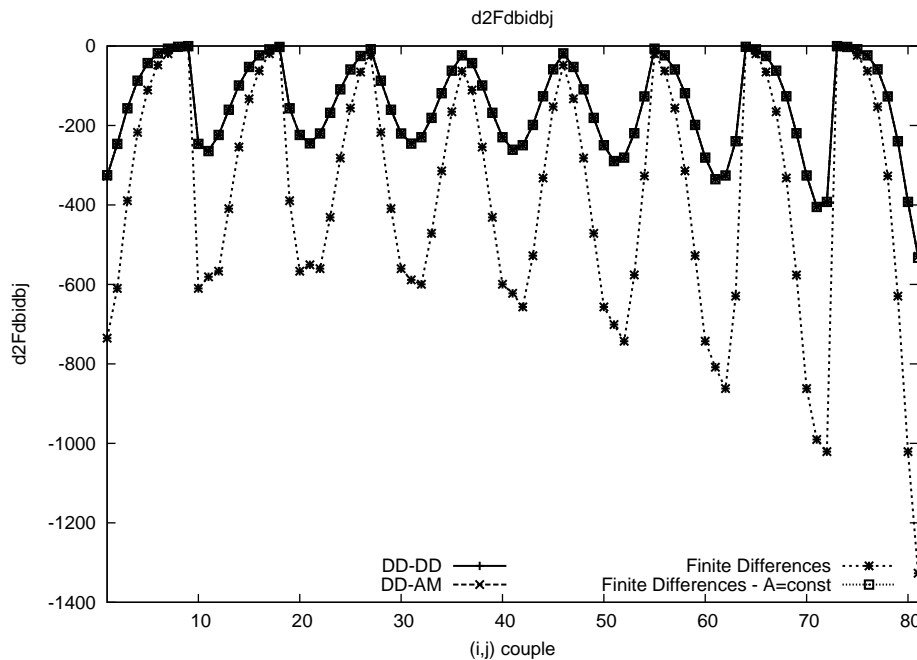
Πίνακας 8.1: Τιμές της παραγωγού $\frac{dF}{dc}$ για τις διάφορες μεθόδους υπολογισμού. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1

Παρατηρούμε και εδώ ταύτιση των τιμών των διαφορών μεθόδων (διατήρηση 5 σημαντικών ψηφίων). Συνεπώς και στην πρώτη παράγωγο της συνάρτησης F ως προς τη στιβαρή μεταβλητή, δεν υπάρχει ουσιαστική επίδραση της παραδοχής (2.36).

8.3 Δεύτερη Παράγωγος ως προς τις Μεταβλητές Σχεδιασμού, τη Στιβαρή Μεταβλητή και τις Μικτές Μεταβλητές

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$ ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τις διάφορες μεθόδους που αναλύθηκαν στο Κεφάλαιο 3, καθώς και η τιμή της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης F αν ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρηθεί ο αριθμός $M_{is(out)}$. Τέλος, θα παρουσιαστεί η μικτή δεύτερη παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τη στιβαρή μεταβλητή $M_{is(out)}$.

Αναλυτικότερα, οι τιμές της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, που αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1, δίνονται στο Σχήμα 8.3.



Σχήμα 8.3: Δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός ζεύγους μεταβλητών σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της δεύτερης παραγώγου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$.

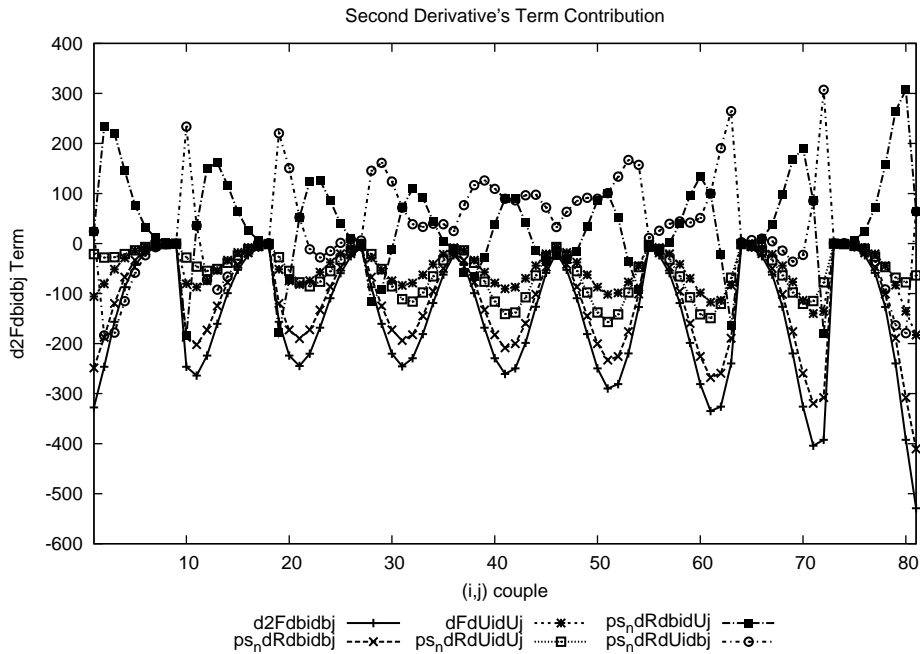
Παρατηρώντας το Σχήμα 8.3 βλέπουμε ότι οι τιμές της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ που υπολογίζονται με τις μεθόδους DD-DD και DD-AM ταυτίζονται μεταξύ τους, αλλά όχι και με τις τιμές που προκύπτουν από τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Υπολογίζοντας τις τιμές της δεύτερης παραγώγου της F με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών αλλά κρατώντας ταυτόχρονα το μητρώο A σταθερό, παίρνουμε την καμπύλη με τα τετράγωνα του Σχήματος 8.3, η οποία ταυτίζεται ουσιαστικά με τις καμπύλες των μεθόδων DD-DD

και DD-AM. Αυτό σημαίνει ότι στη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, η επίδραση της παραδοχής (2.36) είναι πολύ σημαντική. Ωστόσο από το ανωτέρω σχήμα παρατηρούμε ότι η προσέγγιση της $\frac{d^2F}{db_i db_j}$ με την παραδοχή των μηδενικών παραγώγων $\frac{\partial A^+}{\partial U}$, $\frac{\partial A^-}{\partial U}$, διατηρεί το πρόσημο και τη τάξη μεγέθους στα περισσότερα ζευγάρια μεταβλητών σχεδιασμού.

Η παράγωγος $\frac{d^2F}{db_i db_j}$ με τη μέθοδο DD-AM δίνεται στην περίπτωση μας από τη σχέση (3.37). Για λόγους πληρότητας παρατίθεται και εδώ:

$$\begin{aligned} \frac{d^2F_{aug}}{db_i db_j} = & \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \\ & + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} + \Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \right] \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j} \end{aligned} \quad (8.2)$$

Η συνεισφορά των όρων που συναντώνται στην ανωτέρω εξίσωση δίνεται από το Σχήμα 8.4.



Σχήμα 8.4: Συνεισφορά των όρων που απαρτίζουν την δεύτερη παράγωγο $\frac{d^2F}{db_i db_j}$. Οριζόντιος άξονας: Αύξων Αριθμός ζεύγους μεταβλητών σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Συνεισφορά του εκάστοτε όρου, υπολογισμένη στο ζεύγος μεταβλητών σχεδιασμού (i, j) .

Η εξήγηση των συντομογραφιών που συναντώνται στο Σχήμα 8.4 και η απαιτούμενη μνήμη για κάθε όρο της σχέσης (8.2) δίνονται στον Πίνακα 8.2. Για την ελάττωση των απαιτήσεων μνήμης μπορούμε να εκμεταλλευτούμε το γεγονός ότι τα μητρώα όλων των όρων είναι συμμετρικά.

Συντομογραφία	Όρος	Απαιτούμενη Μνήμη
d2Fdbidbj	$\frac{d^2 F}{db_i db_j}$	$\frac{N(N+1)}{2}$
psndRdbidbj	$\Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial b_j}$	$\frac{N(N+1)}{2}$
dFdUidUj	$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j}$	$\frac{N(N+1)}{2}$
psndRdUidUj	$\Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j}$	$\frac{N(N+1)}{2}$
psndRdbidUj	$\Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_i \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{db_j}$	$\frac{N(N+1)}{2}$
psndRdUidbj	$\Psi_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_j} \frac{dU_{k,d}}{db_i}$	$\frac{N(N+1)}{2}$

Πίνακας 8.2: Εξήγηση των συντομογραφιών του Σχήματος 8.4 και απαιτούμενη μνήμη για κάθε όρο της σχέσης 8.2.

Αξίζει σε αυτό το σημείο να επισημάνουμε ότι μιας και ο υπολογισμός της $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$ με τη μέθοδο DD-AM γίνεται σε ένα βήμα από την εξίσωση (8.2), μπορούμε να αποφύγουμε την αποθήκευση των ενδιάμεσων μητρώων (π.χ. του $\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{k,d}}{db_i} \frac{dU_{m,e}}{db_j}$), εξοικονομώντας μεγάλα ποσά μνήμης. Αντίθετα η μέθοδος DD-DD γίνεται σε δυο βήματα, υπολογίζοντας αρχικά το μητρώο $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$ από τη σχέση (3.32) και στη συνέχεια αντικαθιστώντας το στη σχέση (3.20). Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να αποθηκευτούν τα ενδιάμεσα μητρώα, αυξάνοντας πολύ τις απαιτήσεις μνήμης. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι μόνο ο όρος $\frac{d^2 U_{k,d}}{db_i db_j}$ απαιτεί $3 \times \frac{N(N+1)}{2} \times np$ στοιχεία μνήμης. Στην περίπτωση μας όπου $N = 11$, $np = 500$ απαιτούνται 99000 στοιχεία μνήμης μόνο για αυτό τον όρο, σε αντίθεση με τα $5 \frac{N(N+1)}{2} = 330$ στοιχεία μνήμης που απαιτούνται για την αποθήκευση όλων των όρων που εμπλέκονται στη μέθοδο DD-AM. Βλέπουμε δηλαδή ότι εκτός από το μικρότερο υπολογιστικό κόστος, η μέθοδος DD-AM υπερτερεί και στις απαιτήσεις μνήμης έναντι της μεθόδου DD-DD.

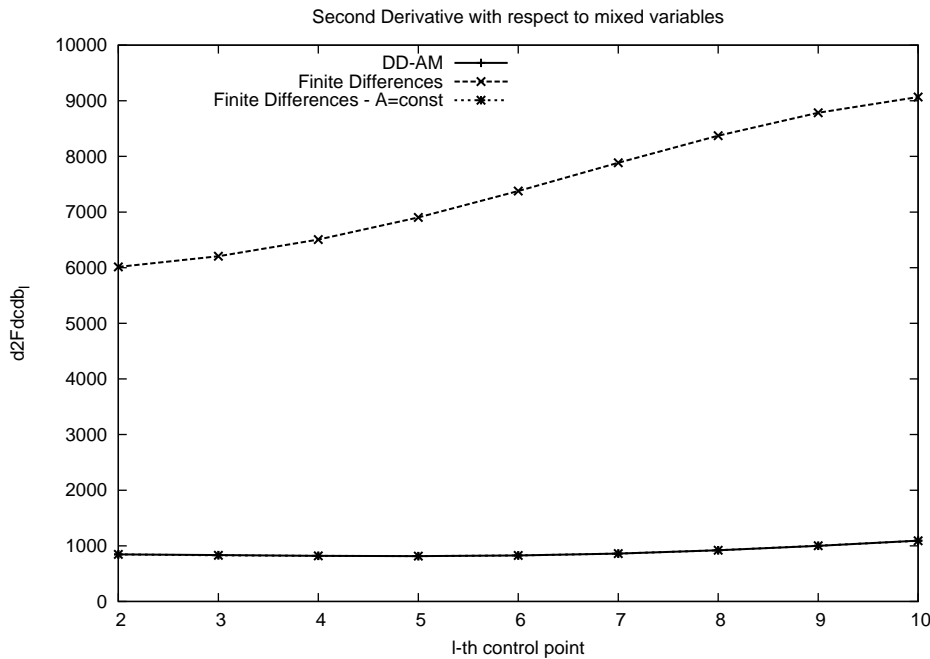
Τα αποτελέσματα της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τη στιβαρή μεταβλητή, $M_{is(out)}$, για τις διάφορες μεθόδους υπολογισμού δίνονται στον Πίνακα 8.3.

Μέθοδος	$\frac{d^2 F}{dc^2}$
DD-DD	-343879.885
DD-AM	-343879.885
Πεπερασμένες διαφορές - $A = const$	-343875.687
Πεπερασμένες διαφορές	-272249.659

Πίνακας 8.3: Τιμές της παραγώγου $\frac{d^2 F}{dc^2}$ για τις διάφορες μεθόδους υπολογισμού. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1

Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα των μεθόδων DD-DD και DD-AM ταυτίζονται μεταξύ τους και με το αποτέλεσμα των πεπερασμένων διαφορών με παγωμένο το μητρώο A (διατήρηση 5 σημαντικών ψηφίων), αλλά διαφέρουν από το αποτέλεσμα των πεπερασμένων διαφορών με μεταβλητό μητρώο A . Βλέπουμε και εδώ την έντονη επίδραση της παραδοχής (2.36). Ωστόσο, όπως και με τις δεύτερες παραγωγούς της F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, η προσέγγιση που γίνεται διατηρεί το πρόσημο και τη τάξη μεγέθους της παραγωγού $\frac{d^2 F}{dc^2}$.

Η μικτή δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$ ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τη στιβαρή μεταβλητή $M_{is(out)}$ δίνεται στο Σχήμα 8.5.



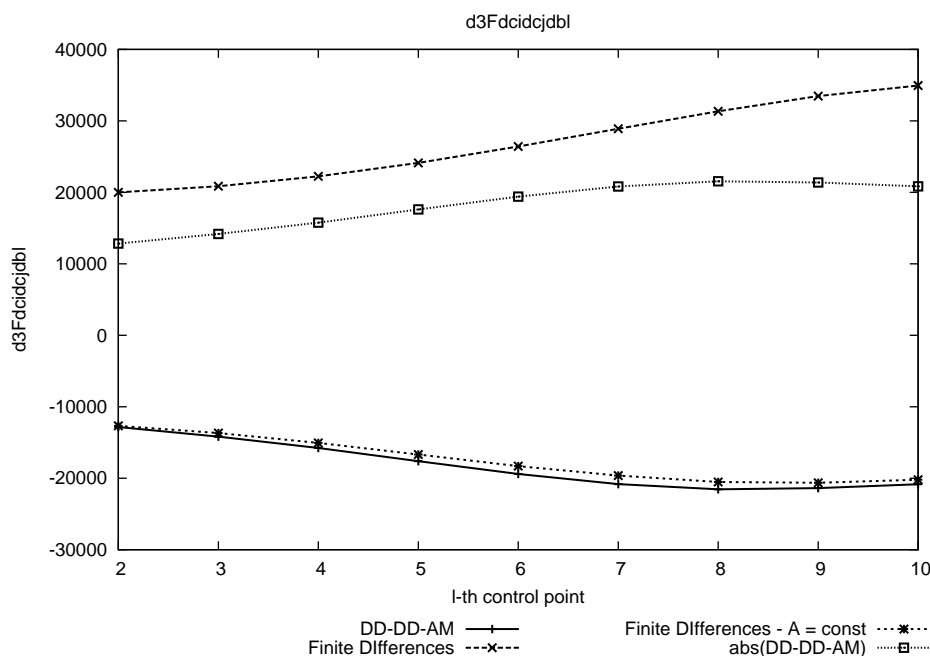
Σχήμα 8.5: Μικτή δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τη στιβαρή μεταβλητή $M_{is(out)}$. Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της παραγωγού $\frac{d^2 F}{dcdb_1}$. Το παρόν σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1.

Από το Σχήμα 8.5 παρατηρούμε ότι οι τιμές της $\frac{d^2 F}{dcdb_1}$ που υπολογίζονται με τη μέθοδο DD-AM διαφέρουν από τις τιμές που υπολογίζονται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Αν υπολογιστούν όμως οι τιμές της $\frac{d^2 F}{dcdb_1}$ με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών κρατώντας παράλληλα σταθερό το μητρώο A , παρατηρούμε ταύτιση τους με αυτές της μεθόδου DD-AM (συνεχής και εστιγμένη καμπύλη του Σχήματος 8.5). Είναι φανερό λοιπόν η επίδραση της παραδοχής (2.36) στις τιμές της $\frac{d^2 F}{dcdb_1}$, μιας και η προσέγγισή τους, θεωρώντας ότι $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$ δίνει αποτελέσματα που διαφέρουν από τα πραγματικά κατά μια τάξη μεγέθους (διατηρώντας ωστόσο το πρόσημο).

8.4 Τρίτη, Μικτή, Παράγωγος

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιαστεί η μικτή τρίτη παράγωγος $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$, αν ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρηθεί ο αριθμός $M_{is(out)}$. Θα γίνει επίσης ανάλυση της σημαντικότητας των όρων που συναντώνται στον υπολογισμό της.

Συγκεκριμένα, οι τιμές της παραγώγου $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ δίνονται στο Σχήμα 8.6.



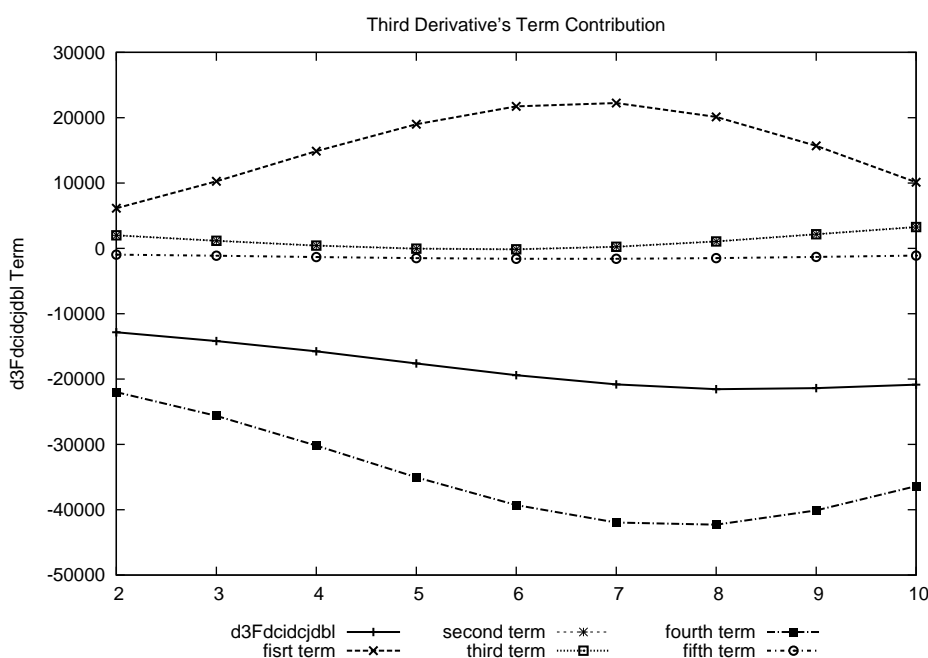
Σχήμα 8.6: Μικτή τρίτη παράγωγος της συνάρτησης - στόχου F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τη στιβαρή μεταβλητή $M_{is(out)}$. Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της παραγώγου $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$. Το παρόν σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1.

Παρατηρώντας το Σχήμα 8.6 εξάγονται χρήσιμα συμπεράσματα. Βλέπουμε ότι οι τιμές των παραγώγων $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ που υπολογίζονται με τη μέθοδο DD-DD-AM απέχουν πολύ από αυτές που υπολογίζονται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (συνεχής και διακεκομμένη καμπύλη αντίστοιχα). Ωστόσο αν υπολογιστούν οι τιμές της συγκεκριμένης παραγώγου με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών κρατώντας ταυτόχρονα σταθερό το μητρώο A (εστιγμένη καμπύλη), έχουμε σχεδόν ταύτιση των αποτελεσμάτων με αυτά της μεθόδου DD-DD-AM. Παρόλα αυτά, οι υπολογιζόμενες τιμές διαφέρουν από τις πραγματικές στο πρόσημο, αλλά διατηρούν τη τάξη μεγέθους. Συνεπώς, για τη συγκεκριμένη περίπτωση και μόνο, μια καλύτερη προσέγγιση των πραγματικών τιμών της $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$, θα μπορούσε να είναι η απόλυτη τιμή των παραγώγων που υπολογίζονται με τη μέθοδο DD-DD-AM. Έτσι, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 8.6 (καμπύλη abs(DD-DD-AM) με τα τετράγωνα), η προσέγγιση αυτή διατηρεί τη μονοτονία, το πρόσημο και τη τάξη μεγέθους των πραγματικών τιμών.

Η παράγωγος $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ δίνεται από τη σχέση (8.3):

$$\begin{aligned} \frac{d^3 F_{aug}}{dc_i dc_j db_l} = & K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l} + L_{jn} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} + M_{in,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j} \\ & + N_{n,a} \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j} + N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j} \end{aligned} \quad (8.3)$$

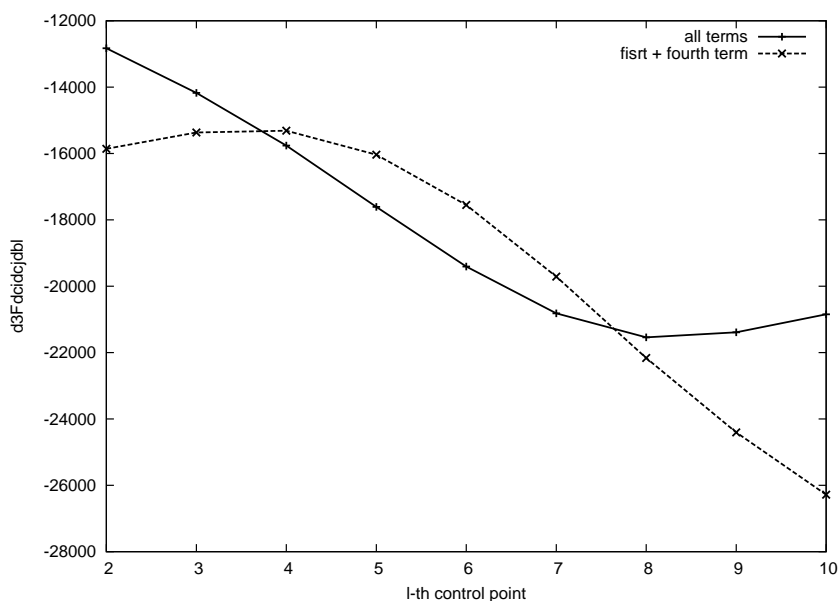
Η συνεισφορά των όρων της σχέσης στη τρίτη παράγωγο της συνάρτησης F δίνεται στο Σχήμα 8.7.



Σχήμα 8.7: Συνεισφορά των όρων που απαρτίζουν την παράγωγο $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$. Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή του εκάστοτε όρου. Το παρόν σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1.

Με μια πρώτη ματιά στο Σχήμα 8.7 βλέπουμε ότι οι όροι $N_{n,a} \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j}$, $K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l}$ έχουν σημαντική επίδραση στη τιμή της $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ ενώ οι όροι $L_{jn} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} = M_{in,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j}$, $N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ έχουν μικρή συνεισφορά και θα μπορούσαν να αμεληθούν. Αν συγκρίνουμε λοιπόν τη τιμή της $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ υπολογισμένη με όλους τους όρους και υπολογισμένη μόνο με τους όρους $K_{ijn,a} \frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l}$, $N_{n,a} \frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j}$ έχουμε το Σχήμα 8.8.

Παρατηρούμε ότι ενώ αρχικά οι όροι $L_{jn} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} = M_{in,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial b_l \partial U_{k,d}} \frac{dU_{k,d}}{dc_j}$, $N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ φαίνεται να έχουν μικρή επίδραση στη τιμή της τρίτης παραγώγου, η παράλειψή τους

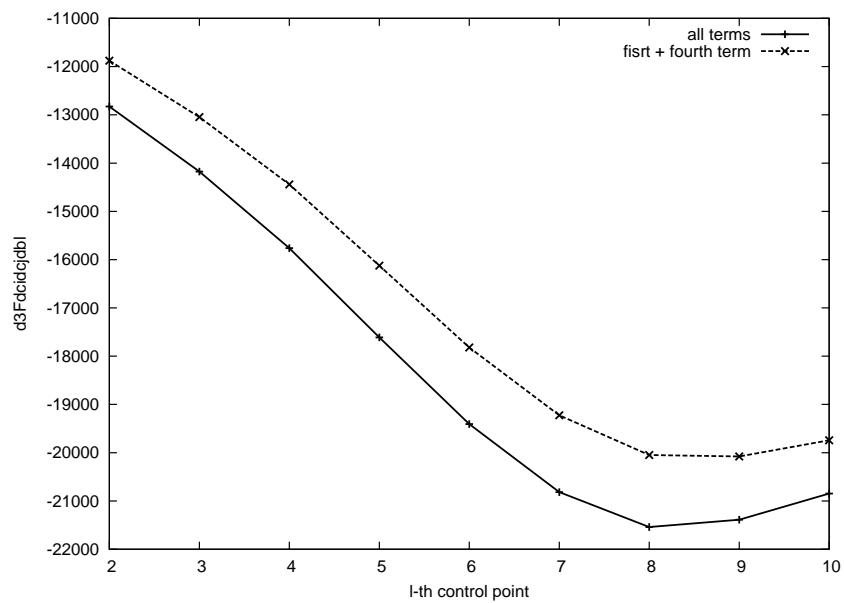


Σχήμα 8.8: Σύγκριση των τιμών της $\frac{d^3F}{dc^2db_l}$ όταν υπολογίζονται όλοι οι όροι και όταν παραλείπονται ο δεύτερος, τρίτος και πέμπτος όρος της σχέσης (8.3). Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της $\frac{d^3F}{dc^2db_l}$. Το παρόν σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1.

οδηγεί σε καμπύλη διαφορετικής μονοτονίας, κάτι το οποίο δε μπορεί να γίνει αποδεκτό. Αν τέλος παραλειφθεί μόνο ο όρος $N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ από τη σχέση (8.3), έχουμε το Σχήμα 8.9.

Από το Σχήμα 8.9 παρατηρούμε ότι η παράλειψη του όρου $N_{n,a} \frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$ από τη σχέση (8.3) διατηρεί τη μονοτονία του αποτελέσματος και έχει μικρή συμβολή στην αριθμητική τιμή του. Συνεπώς, ο μόνος όρος που θα μπορούσε να παραλειφθεί για λόγους οικονομίας μνήμης και πράξεων είναι αυτός.

Οι μονάδες μνήμης που απαιτούν οι όροι των τεσσάρων συζυγών εξισώσεων, καθώς και της σχέσης (8.3), για το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε, δίνονται στον Πίνακα 8.4. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα έχουμε $i = j = 1, N = 11, np = 500$.



Σχήμα 8.9: Σύγκριση των τιμών της $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$ όταν υπολογίζονται όλοι οι όροι και όταν παραλείπονται ο πέμπτος όρος της σχέσης (8.3). Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός μεταβλητής σχεδιασμού. Κατακόρυφος άξονας: Τιμή της $\frac{d^3 F}{dc^2 db_l}$. Το παρόν σχήμα αναφέρεται στην αρχική γεωμετρία του Σχήματος 8.1.

Όρος	Απαιτούμενη Μνήμη
$\frac{\partial F}{\partial U_{k,d}}$	$3 \times np$
$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d}}$	$3 \times 3 \times np$
$N_{n,a}$	$3 \times np$
$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i}$	$3 \times M \times np$
$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e}} \frac{dU_{m,e}}{dc_i}$	$3 \times 3 \times M \times np$
$M_{in,a}$	$3 \times M \times np$
$L_{jn,a}$	0 (ίδιος με τον προηγούμενο όρο)
$\frac{\partial^3 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j}$	$3 \times M^2 \times np$
$\frac{\partial^2 F}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$	$3 \times M^2 \times np$
$\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial U_{q,g}} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j}$	$3 \times 3 \times M^2 \times np$
$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{q,g}} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$	$3 \times 3 \times M^2 \times np$
$K_{ijn,a}$	$3 \times M^2 \times np$
$\frac{\partial R_{n,a}}{\partial b_l}$	$3 \times N \times np$
$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i}$	$3 \times N \times M \times np$
$\frac{\partial^3 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial U_{m,e} \partial b_l} \frac{dU_{k,d}}{dc_i} \frac{dU_{m,e}}{dc_j}$	$3 \times N \times M^2 \times np$
$\frac{\partial^2 R_{n,a}}{\partial U_{k,d} \partial b_l} \frac{d^2 U_{k,d}}{dc_i dc_j}$	$3 \times N \times M^2 \times np$

Πίνακας 8.4: Απαιτούμενες μονάδες μνήμης των όρων που απαρτίζουν τις τέσσερις συζυγείς εξισώσεις της τρίτης παραγώγου καθώς και τη σχέση (8.3). Με N συμβολίζεται ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού, με M ο αριθμός των στιβαρών μεταβλητών και με np ο αριθμός των κόμβων του πλέγματος.

8.5 Στιβαρός Σχεδιασμός

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης της συνάρτησης \hat{F} του Κεφαλαίου 7, εφαρμοσμένης στον αγωγό του Σχήματος 8.1. Υπενθυμίζεται ότι η συνάρτηση \hat{F} δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{F} = \hat{\mu}_F + k\hat{\sigma}_F \quad (8.4)$$

με τη μέση εκτιμώμενη τιμή της F να δίνεται από τη σχέση

$$\hat{\mu}_F = F + \frac{1}{2} \frac{d^2 F}{dc_i^2} \sigma_i^2 \quad (8.5)$$

και τη μεταβλητότητα της μέσης εκτιμώμενης τιμής της F από τη σχέση

$$\hat{\sigma}_F = \sqrt{\left[\frac{dF}{dc_i} \right]^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \right]^2 \sigma_i^2 \sigma_j^2} \quad (8.6)$$

Η παράγωγος της \hat{F} ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, που χρησιμοποιείται για την εύρεση της βέλτιστης γεωμετρίας του αγωγού μέσω της μεθόδου της απότομης καθόδου είναι:

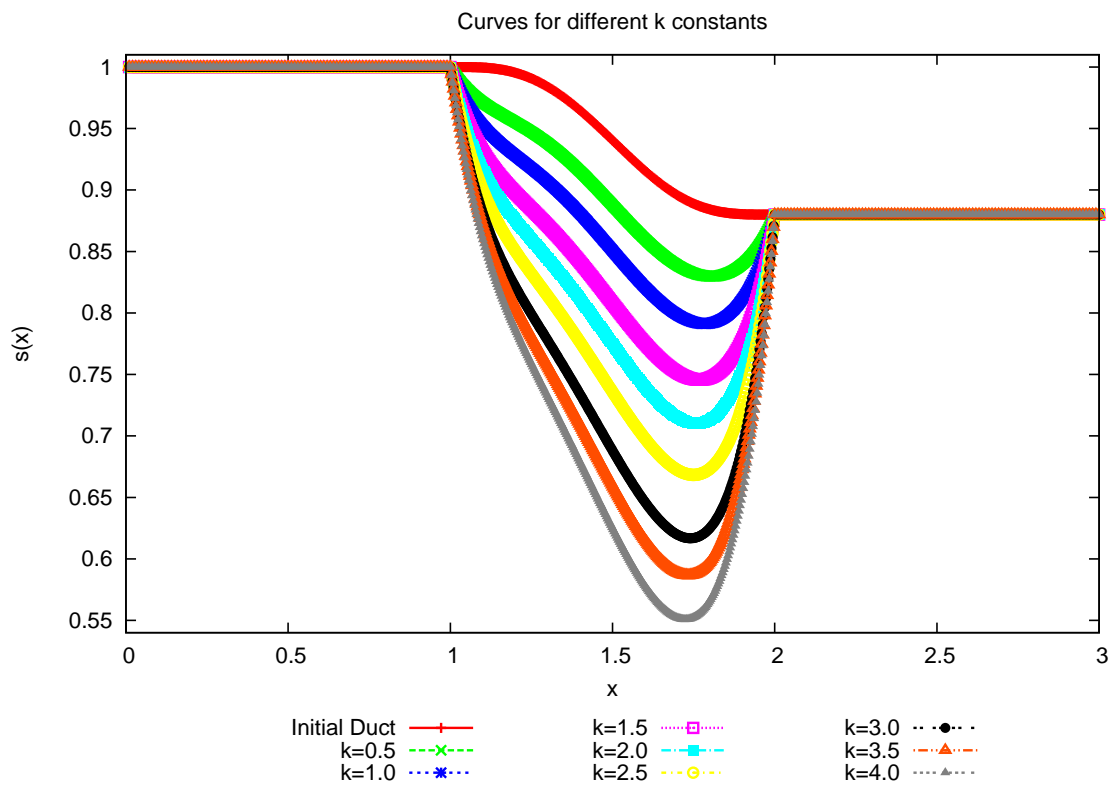
$$\frac{d\hat{F}}{db_l} = \frac{dF}{db_l} + \frac{1}{2} \frac{d^3 F}{dc_i^2 db_l} \sigma_i^2 + k \frac{2 \frac{dF}{dc_i} \frac{d^2 F}{dc_i db_l} \sigma_i^2 + \frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} \sigma_i^2 \sigma_j^2}{2 \sqrt{\left[\frac{dF}{dc_i} \right]^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 F}{dc_i dc_j} \right]^2 \sigma_i^2 \sigma_j^2}} \quad (8.7)$$

Ο αλγόριθμος σχεδιασμού στην περίπτωση που ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή θεωρείται ο αριθμός $M_{is(out)}$ δίνεται στην ενότητα 7.6. Θέτοντας ένα κριτήριο τερματισμού του αλγόριθμου (στην περίπτωση μας τον αριθμό 284000) και δοκιμάζοντας οκτώ διαφορετικές τιμές για τη σταθερά k ($k \in [0.5, 4]$ με βήμα 0.5), οι μορφές των αγωγών που προκύπτουν δίνονται από το Σχήμα 8.10. Εδώ πρέπει να αναφερθεί ότι στο κώδικα χρησιμοποιήθηκε η $\left| \frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l} \right|$ αντί της $\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$, μιας και αυτή, στη συγκεκριμένη συνάρτηση - στόχο και μόνο, προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την πραγματική τιμή, όπως φαίνεται και από το Σχήμα 8.6.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναλυθεί μια ιδιομορφία της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$. Η συνάρτηση F είναι ουσιαστικά το άθροισμα της στατικής πίεσης όλων των κόμβων του πλέγματος. Οι Euler εξισώσεις ροής είναι ατριβείς, κάτι που σημαίνει ότι η ολική πίεση κατά μήκος του αγωγού παραμένει σταθερή. Από την εξίσωση για την ολική πίεση σε συμπίεστη ροή έχουμε

$$p_t = p_i \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_i^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} = const \quad (8.8)$$

Από τη σχέση 8.8 βλέπουμε ότι για να ελαχιστοποιηθεί η τιμή της στατικής πίεσης p_i σε κάθε κόμβο (και κατ'επέκταση σε όλο τον αγωγό) πρέπει να αυξηθεί η τοπική τιμή του αριθμού Mach, δηλαδή πρέπει να αυξηθεί η τοπική ταχύτητα. Αυτό γίνεται ελαττώνοντας τη διατομή του αγωγού. Αν τεθεί πολύ μικρή τιμή στο κριτήριο τερματισμού



Σχήμα 8.10: Μορφές των αγωγών που προκύπτουν από τη διαδικασία βελτιστοποίησης για διαφορετικές τιμές της σταθεράς k . Οριζόντιος άξονας: μήκος του αγωγού. Κατακόρυφος άξονας: διατομή του αγωγού στη θέση x .

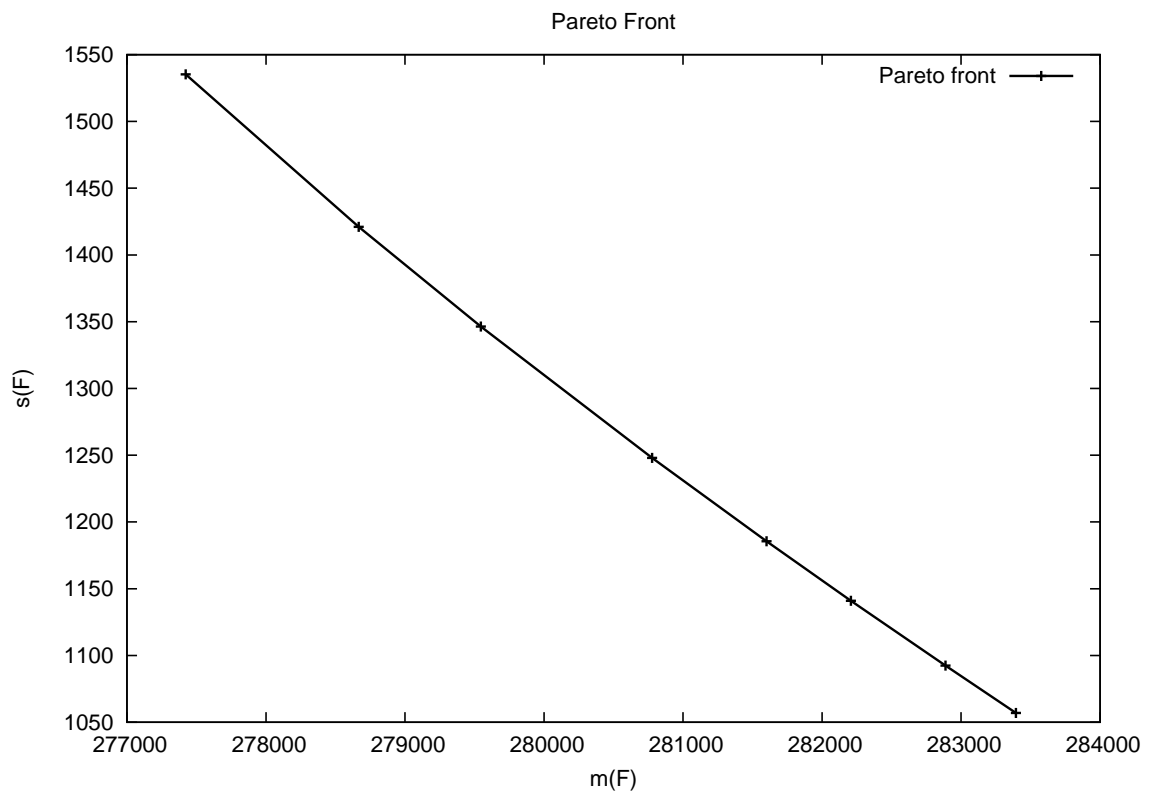
του αλγόριθμου, η διατομή θα μικρύνει τόσο ώστε να εμφανιστεί ηχητικός λαιμός, κάτι που οδηγεί σε τερματισμό του προγράμματος, μιας και δεν είναι δυνατό να περάσει η απαιτούμενη παροχή από τον αγωγό. Πρέπει δηλαδή να τεθεί προσεκτικά το κριτήριο τερματισμού του αλγόριθμου ώστε να μην εμφανιστεί ηχητικός λαιμός. Η επιλογή αυτή μπορεί να απαιτήσει πειραματισμό μέχρι να βρεθεί η κατάλληλη τιμή. Επίσης από την ανωτέρω ανάλυση προκύπτει ότι η αναμενόμενη βέλτιστη γεωμετρία χρησιμοποιώντας ως συνάρτηση - στόχο την $F = \int p dx$, θα είναι αυτή με τη μικρότερη δυνατή διατομή.

Έχοντας κάνει την ανωτέρω ανάλυση και παρατηρώντας το Σχήμα 8.10 βγάζουμε τα ακόλουθα χρήσιμα συμπεράσματα. Για μεγάλες τιμές της σταθεράς k παρατηρούμε αγωγούς με μικρές διατομές. Αυτό σημαίνει ότι οι συγκεκριμένοι αγωγοί έχουν καλή συμπεριφορά (δηλαδή μικρή τιμή της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$) στο σημείο σχεδίασης ($M_{is(out)} = 0.3$), αλλά μεγάλη μεταβλητότητα, δηλαδή η συμπεριφορά τους αλλάζει έντονα όταν μεταβληθεί έστω και λίγο ο αριθμός $M_{is(out)}$. Αντίθετα, για μικρές τιμές της σταθεράς k παρατηρούμε μεγαλύτερες διατομές του αγωγού. Αυτό σημαίνει ότι οι συγκεκριμένοι αγωγοί έχουν χειρότερη συμπεριφορά στο σημείο σχεδίασης (μεγαλύτερη τιμή της $F = \int p dx$) αλλά μικρότερη μεταβλητότητα, δηλαδή η συμπεριφορά τους δεν μεταβάλλεται ιδιαίτερα με τη μεταβολή του αριθμού $M_{is(out)}$. Εδώ πρέπει να τονισθεί ότι η συμπεριφορά των αγωγών με μεγάλη τιμή της σταθεράς k σε περίπτωση μεταβολής του αριθμού $M_{is(out)}$, δε θα είναι απαραίτητα χειρότερη από τη συμπεριφορά των αγωγών με μικρή τιμή της σταθεράς k , απλά η μεταβολή της τιμής της συνάρτησης F θα είναι μεγαλύτερη στους συγκεκριμένους αγωγούς.

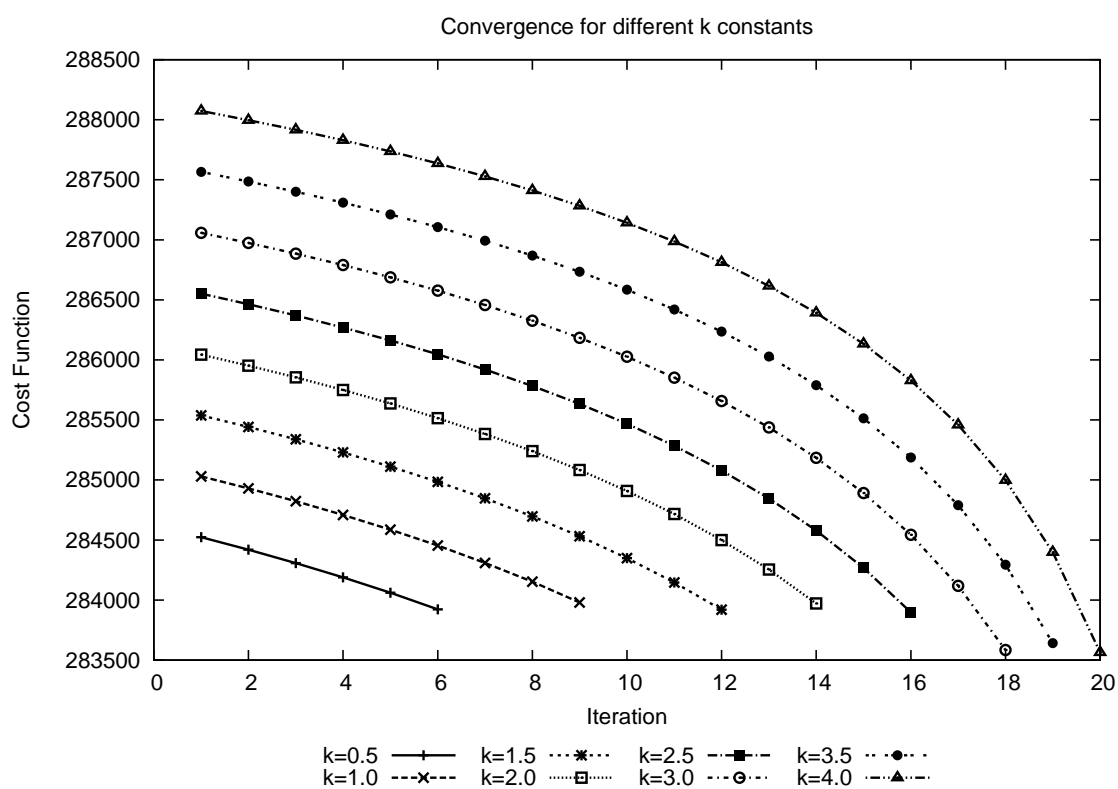
Παρατηρώντας τα σχήματα 8.5, 8.6 αλλά και τους Πίνακες 8.1, 8.3 μπορούμε να εξάγουμε το συμπέρασμα ότι η παραδοχή $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$, αν και επηρεάζει τις τιμές των παραγώγων $\frac{dF}{dc}$, $\frac{d^2F}{dc^2}$, $\frac{d^2F}{dcdb_1}$, $\frac{d^3F}{dc^2db_1}$ σε μεγάλο βαθμό, οδηγεί τελικά σε αναμενόμενα αποτελέσματα, ως προς τη φυσική τους σημασία (βέβαια πρέπει να αναφερθεί ότι για τη μικτή τρίτη παράγωγο έχει γίνει και η επιπλέον προσέγγιση με το απόλυτο) (Σχήμα 8.10). Αυτό σημαίνει ότι οι λύσεις που προκύπτουν από τη διαδικασία βελτιστοποίησης είναι προς τη σωστή κατεύθυνση αλλά, πιθανώς, όχι οι βέλτιστες δυνατές. Για την εύρεση των ακριβών λύσεων θα έπρεπε να παραγωγιστεί το μητρώο A ως προς τις μεταβλητές της ροής, διαδικασία αυξανόμενης δυσκολίας (τόσο στις πράξεις όσο και στον προγραμματισμό) με τη τάξη της παραγώγου.

Στο Σχήμα 8.10 έχουμε το μέτωπο Pareto της διαδικασίας βελτιστοποίησης με διαφορετικές τιμές της σταθεράς k . Από το Σχήμα αυτό παρατηρούμε ότι δεν υπάρχει κυριαρχία κάποιας λύσης στις υπόλοιπες, κάτι που σημαίνει ότι η τελική επιλογή του αγωγού εξαρτάται από τη βαρύτητα που θέλουμε να δώσουμε στην εκτιμώμενη μέση τιμή της F (απόδοση στο σημείο σχεδίασης) και στη μεταβλητότητα της εκτιμώμενης μέσης τιμής (αποδεκτή συμπεριφορά σε μεγάλο εύρος συνθηκών λειτουργίας).

Τέλος, στο Σχήμα 8.12 δίνεται η πορεία σύγκλισης της μεθόδου της απότομη καθόδου, για τις διάφορες τιμές της σταθεράς k .



Σχήμα 8.11: Μέτωπο Pareto που προκύπτει από τη διαδικασία βελτιστοποίησης για διαφορετικές τιμές της σταθεράς k . Οριζόντιος άξονας: εκτιμώμενη μέση τιμή ($\hat{\mu}_F$) της συνάρτησης - στόχου $F = \int p dx$. Κατακόρυφος άξονας: μεταβλητότητα ($\hat{\sigma}_F$) της εκτιμώμενης μέσης τιμής της συνάρτησης F .



Σχήμα 8.12: Πορεία σύγκλισης της μεθόδου της απότομης καθόδου για τις διαφορετικές τιμές της σταθεράς k . Οριζόντιος άξονας: Αύξων αριθμός επανάληψης. Κατακόρυφος άξονας: Τιμές της συνάρτησης \hat{F} . Ως κριτήριο σύγκλισης έχει τεθεί ο αριθμός 284000.

Κεφάλαιο 9

Συμπεράσματα - Σχόλια

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκαν η διακριτή συζυγής μέθοδος και η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης, για τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου μιας συνάρτησης - στόχου F , ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού ($\frac{dF}{db_i}$) και τις στιβαρές μεταβλητές ($\frac{dF}{dc_i}$). Επίσης αναπτύχθηκαν οι -με πρακτική σημασία- συνδυασμοί των παραπάνω μεθόδων για τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου της συνάρτησης F , ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού ($\frac{d^2F}{db_i db_j}$), τις στιβαρές μεταβλητές ($\frac{d^2F}{dc_i dc_j}$) αλλά και τις μικτές μεταβλητές (στιβαρές και σχεδιασμού, $\frac{d^2F}{dc_i db_l}$). Έπειτα, υπολογίστηκε η μικτή τρίτη παράγωγος της συνάρτησης F ($\frac{d^3F}{dc_i dc_j db_l}$) με τη συζυγή μέθοδο, έχοντας υπολογίσει την πρώτη και δεύτερη παράγωγο ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης. Τέλος, εισάγοντας τις έννοιες της μέσης εκτιμώμενης τιμής της συνάρτησης F ($\hat{\mu}_F$), της μεταβλητότητας της ($\hat{\sigma}_F$) και της τροποποιημένης συνάρτησης ($\hat{F} = \hat{\mu}_F + k\hat{\sigma}_F$), οι ανωτέρω παράγωγοι χρησιμοποιούνται σε κύκλο βελτιστοποίησης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου, με σκοπό το σχεδιασμό αγωγού με ικανοποιητική απόδοση σε εύρος συνθηκών λειτουργίας (στιβαρός σχεδιασμός, robust design). Έπειτα από εφαρμογή της ανωτέρω διαδικασίας, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση - στόχο $F = \int p dx$ και ως μοναδική στιβαρή μεταβλητή τον αριθμό $M_{is(out)}$, προκύπτουν τα ακόλουθα συμπεράσματα:

- Επιδείχθηκε η ορθότητα υπολογισμού των πρώτων παραγώγων $\frac{dF}{db_l}, \frac{dF}{dc_i}$ με τη συζυγή μέθοδο και τη μέθοδο ευθείας διαφόρισης χρησιμοποιώντας ως μέτρο σύγκρισης την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Και στις δυο παραγώγους, η επίδραση της παραδοχής $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$ είναι αμελητέα. Άρα γενικεύοντας, μπορεί να ειπωθεί ότι η παράγωγος του μητρώου A , ως προς τις μεταβλητές της ροής, έχει μικρή επίδραση στις τιμές της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης - στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και τις στιβαρές μεταβλητές, και συνεπώς μπορεί να αμεληθεί.
- Αντίθετα, αποδείχθηκε ότι ο υπολογισμός των Hessian μητρώων $\frac{d^2F}{db_i db_j}, \frac{d^2F}{dc_i dc_j}$ με τις μεθόδους DD-DD, DD-AM επηρεάζεται αρκετά από την παραδοχή $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$, ωστόσο η τάξη μεγέθους και το πρόσημο των προσεγγίσεων που γίνον-

ται, ταυτίζονται με τα μεγέθη που προκύπτουν από τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Η προσέγγιση του μητρώου $\frac{d^2 F}{dc_i db_l}$ με τη μέθοδο DD-AM κάνοντας την ανωτέρω παραδοχή, οδηγεί σε αποτελέσματα που μπορεί να διαφέρουν από αυτά των πεπερασμένων διαφορών σημαντικά αλλά, ευτυχώς, διατηρούν το πρόσημο. Συνεπώς, οι ανωτέρω παράγωγοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε σχήμα βελτιστοποίησης με τη μέθοδο της απότομης καθόδου.

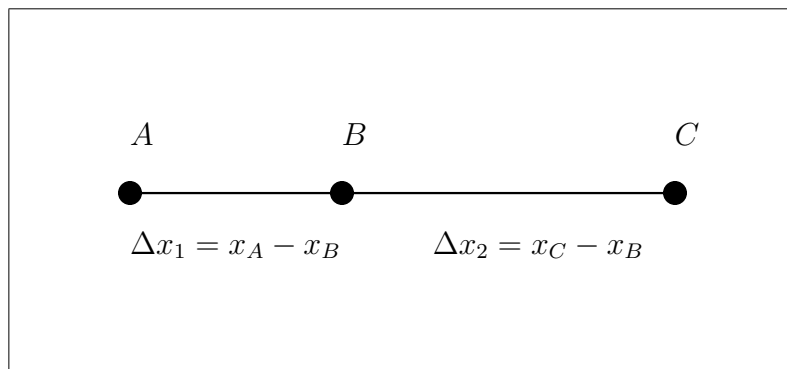
- Αποδείχθηκε ότι η συμβολή των παραγώγων των οριακών συνθηκών, ως προς τις συντηρητικές μεταβλητές της ροής, είναι αμελητέα κατά τον υπολογισμό του μητρώου $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, αλλά είναι ιδιαίτερα σημαντική κατά τον υπολογισμό των μητρώων $\frac{d^2 F}{dc_i dc_j}$, $\frac{d^2 F}{dc_i db_l}$.
- Παρατηρήθηκε ότι η προσέγγιση του μητρώου $\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$ με τη μέθοδο DD-DD-AM και την παραδοχή $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$, συγκρινόμενη με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, διατηρεί την τάξη μεγέθους αλλά έχει διαφορετικό πρόσημο. Δηλαδή η συγκεκριμένη παραδοχή έχει ιδιαίτερη επίδραση στο τελικό αποτέλεσμα. Συνεπώς, για να χρησιμοποιηθεί η μικτή τρίτη παράγωγος σε σχήμα βελτιστοποίησης πρέπει να βρεθεί ένας τρόπος βελτίωσης των αποτελεσμάτων. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η μεγάλη επίδραση της ανωτέρω παραδοχής ίσως μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός ότι εξετάζεται ψευδο - 1Δ αγωγός, όπου από θέση σε θέση υπάρχει έντονη μεταβολή των ροϊκών μεγεθών.
- Παρατηρήθηκε ότι παρά τη σημαντική επίδραση της παραδοχής $\frac{\partial A^+}{\partial U} = \frac{\partial A^-}{\partial U} = 0$ στις τιμές των παραγώγων $\frac{d^2 F}{db_i db_j}$, $\frac{d^2 F}{dc_i dc_j}$, $\frac{d^2 F}{dc_i db_l}$, $\frac{d^3 F}{dc_i dc_j db_l}$, τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης έχουν την αναμενόμενη φυσική σημασία. Ο υπολογισμός βέβαια των ακριβών αποτελεσμάτων απαιτεί την παραγωγή του μητρώου A .
- Για τη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού είναι σημαντικά μεγαλύτερος του αριθμού των στιβαρών μεταβλητών, διαπιστώθηκε η υπεροχή της συζυγούς τεχνικής έναντι της μεθόδου ευθείας διαφόρισης, τόσο από πλευράς υπολογιστικού κόστους, όσο και από πλευράς απαιτούμενης μνήμης.
- Τέλος, τα συμπεράσματα της παρούσας διπλωματικής εργασίας θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν σε ένα πραγματικό διδιάστατο ή τριδιάστατο πρόβλημα. Στη συγκεκριμένη περίπτωση βέβαια, λόγω του αυξημένου υπολογιστικού κόστους, θα ήταν επιθυμητό να χρησιμοποιηθεί παράλληλη επεξεργασία. Η σημαντικότερη ίσως βελτίωση που θα μπορούσε να γίνει, είναι η παραγωγή του μητρώου A ως προς τις μεταβλητές της ροής, μιας και όπως αποδείχθηκε, η μη παραγωγή του μητρώου A επηρεάζει τις τιμές των δεύτερων και τρίτων παραγώγων, ως προς τις στιβαρές μεταβλητές, τις μεταβλητές σχεδιασμού αλλά και τις μικτές μεταβλητές. Μια τέτοια παραγωγή είναι βέβαια κοπιώδης (ειδικά για τις παραγωγούς δεύτερης και τρίτης τάξης) και αυξάνει τις απαιτήσεις μνήμης του υπολογιστή.

Παράρτημα Α΄

Έκφραση 1ης παραγώγου για μη ισαπέχοντες κόμβους.

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιαστεί η απόδειξη των τύπων της διακριτοποιημένης μορφής της πρώτης παραγώγου συνάρτησης f για μη ισαπέχοντες κόμβους.

Κεντρικές διαφορές, δεύτερης τάξης ακρίβεια:



Σχήμα Α΄.1: Εσωτερικοί, μη ισαπέχοντες κόμβοι.

Από το ανάπτυγμα Taylor για τον κόμβο C

$$f_C = f_B + \Delta x_2 \left[\frac{df}{dx} \right]_B + \frac{(\Delta x_2)^2}{2!} \left[\frac{d^2 f}{dx^2} \right]_B + O(\Delta x_2^3) \quad (A'.1)$$

Ενώ για τον κόμβο A

$$f_A = f_B + \Delta x_1 \left[\frac{df}{dx} \right]_B + \frac{(\Delta x_1)^2}{2!} \left[\frac{d^2 f}{dx^2} \right]_B + O(\Delta x_1^3) \quad (A'.2)$$

Πολλαπλασιάζοντας την (Α΄.1) με $(\Delta x_1)^2$ και την (Α΄.2) με $(\Delta x_2)^2$ και, στη συνέχεια, αφαιρώντας κατά μέλη έχουμε :

$$(\Delta x_1)^2 f_C - (\Delta x_2)^2 f_A = [(\Delta x_1)^2 - (\Delta x_2)^2] f_B + \Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 - \Delta x_2) \left[\frac{df}{dx} \right]_B \Rightarrow$$

$$\left[\frac{df}{dx} \right]_B = \frac{(\Delta x_1)^2 f_C - (\Delta x_2)^2 f_A - [(\Delta x_1)^2 - (\Delta x_2)^2] f_B}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 - \Delta x_2)} \quad (\text{A'.3})$$

ή συντομότερα

$$\left[\frac{df}{dx} \right]_B = d_A f_A + d_B f_B + d_C f_C \quad (\text{A'.4})$$

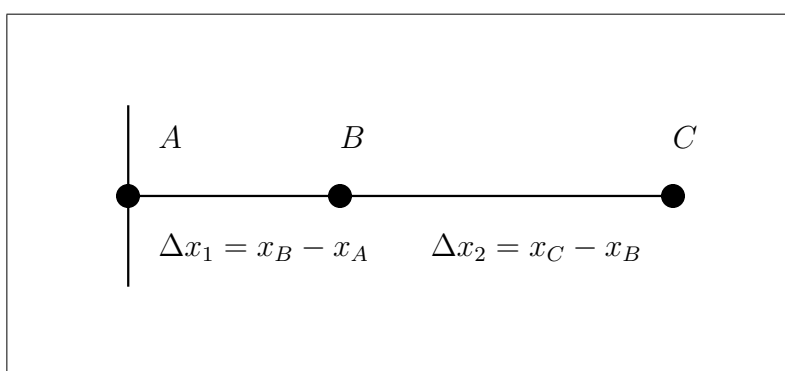
Με τους συντελεστές d να δίνονται από τις σχέσεις

$$d_A = \frac{-(\Delta x_2)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 - \Delta x_2)} \quad (\text{A'.5})$$

$$d_B = \frac{-[(\Delta x_1)^2 - (\Delta x_2)^2]}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 - \Delta x_2)} \quad (\text{A'.6})$$

$$d_C = \frac{(\Delta x_1)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 - \Delta x_2)} \quad (\text{A'.7})$$

Μονόπλευρη παραγωγή, δεύτερης τάξης ακρίβεια:



Σχήμα Α'.2: Οριακοί, μη ισαπέχοντες κόμβοι.

Πρόσω παραγωγή :

$$f_B = f_A + \Delta x_1 \left[\frac{df}{dx} \right]_A + \frac{(\Delta x_1)^2}{2!} \left[\frac{d^2 f}{dx^2} \right]_A + O(\Delta x_1^3) \quad (\text{A'.8})$$

$$f_C = f_A + (\Delta x_1 + \Delta x_2) \left[\frac{df}{dx} \right]_A + \frac{(\Delta x_1 + \Delta x_2)^2}{2!} \left[\frac{d^2f}{dx^2} \right]_A + O[(\Delta x_1 + \Delta x_2)^3] \quad (\text{A'.9})$$

Πολλαπλασιάζοντας την (A'.8) με $(\Delta x_1 + \Delta x_2)^2$ και την (A'.9) με $(\Delta x_1)^2$ και αφαιρώντας κατά μέλη έχουμε (χρησιμοποιώντας και τις διαφορές τετραγώνων):

$$(\Delta x_1 + \Delta x_2)^2 f_B - (\Delta x_1)^2 f_C = [(2\Delta x_1 + \Delta x_2)\Delta x_2] f_A + \Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2) \left[\frac{df}{dx} \right]_A \Rightarrow$$

$$\left[\frac{df}{dx} \right]_A = \frac{-2(\Delta x_1 + \Delta x_2)\Delta x_2 f_A + (\Delta x_1 + \Delta x_2)^2 f_B - (\Delta x_1)^2 f_C}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.10})$$

ή συντομότερα

$$\left[\frac{df}{dx} \right]_A = d_A f_A + d_B f_B + d_C f_C \quad (\text{A'.11})$$

Με τους συνετελεστές d να δίνονται από τις σχέσεις

$$d_A = \frac{-2(\Delta x_1 + \Delta x_2)\Delta x_2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.12})$$

$$d_B = \frac{(\Delta x_1 + \Delta x_2)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.13})$$

$$d_C = \frac{-(\Delta x_1)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.14})$$

Πίσω παραγωγή :

Με όμοιο τρόπο αποδεικνύεται:

$$\left[\frac{df}{dx} \right]_A = d_A f_A + d_B f_B + d_C f_C \quad (\text{A'.15})$$

$$d_A = \frac{2(\Delta x_1 + \Delta x_2)\Delta x_2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.16})$$

$$d_B = \frac{-(\Delta x_1 + \Delta x_2)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.17})$$

$$d_C = \frac{(\Delta x_1)^2}{\Delta x_1 \Delta x_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)} \quad (\text{A'.18})$$

με $\Delta x_1 = x_A - x_B$ και $\Delta x_2 = x_B - x_C$.

Παράρτημα Β'

Υπολογισμός μητρώων A^+ , A^-

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζεται ο τρόπος εύρεσης των μητρώων A^+ και A^- του ψευδο - $1D$ προβλήματος της ροής. Από την διαγωνοποίηση του μητρώου A ισχύει ότι:

$$A = P\Lambda P^{-1} \quad (\text{B'.1})$$

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

$$\Lambda = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{bmatrix} \quad (\text{B'.2})$$

ενώ ταυτόχρονα το $P=ML$ και το $P^{-1}=L^{-1}M^{-1}$, όπου M και L γνωστοί πίνακες [3], οι οποίοι παρουσιάζονται παρακάτω:

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

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

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

Επομένως, σύμφωνα με τα όσα αναφέρθηκαν, η σχέση (Β'.1), θα γίνει:

$$A^+ = P\Lambda^+P^{-1} \quad (\text{B'.3})$$

$$A^- = P\Lambda^-P^{-1} \quad (\text{B'.4})$$

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

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

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

Ωστόσο, απαιτείται, όπως έγινε σαφές από την παραπάνω παρουσίαση σχέσεων, η γνώση των αντίστροφων του M και του L . Για τον πίνακα M , ο αντίστροφός του υπολογίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$M^{-1} = \frac{\text{adj}M}{\text{det}M} \quad (\text{B'.5})$$

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

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

$$P = \begin{bmatrix} 1 & \frac{\rho}{2c} & -\frac{\rho}{2c} \\ u & \frac{\rho}{2} \left[\frac{u+c}{c} \right] & -\frac{\rho}{2} \left[\frac{u-c}{c} \right] \\ \frac{1}{2}u^2 & \frac{\rho}{2c} \left[\frac{u^2}{2} + uc + \frac{c^2}{\gamma-1} \right] & -\frac{\rho}{2c} \left[\frac{u^2}{2} - uc + \frac{c^2}{\gamma-1} \right] \end{bmatrix} \quad (\text{B'.6})$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \left[1 - \frac{u^2(\gamma-1)}{2c^2} \right] & \frac{u(\gamma-1)}{c^2} & -\frac{\gamma-1}{c^2} \\ \left[\frac{\frac{1}{2}u^2(\gamma-1)}{\rho c} - \frac{uc}{\rho c} \right] & \left[\frac{c}{\rho c} - \frac{u(\gamma-1)}{\rho c} \right] & \frac{\gamma-1}{\rho c} \\ -\left[\frac{\frac{1}{2}u^2(\gamma-1)}{\rho c} + \frac{uc}{\rho c} \right] & \left[\frac{c}{\rho c} + \frac{u(\gamma-1)}{\rho c} \right] & -\frac{\gamma-1}{\rho c} \end{bmatrix} \quad (\text{B'.7})$$

Έχοντας πια γνωστούς τους παραπάνω πίνακες P και P^{-1} , μπορούν να υπολογιστούν οι πίνακες A^+ και A^- με βάση τις σχέσεις (B'.3) και (B'.4) για οποιοδήποτε κόμβο ή μεσόκομβο του $1-D$ πλέγματος.

Βιβλιογραφία

- [1] Ι.Χ ΜΥΡΑΛΙΔΗ. *Η Διακριτή και η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για τον Υπολογισμό Πρώτων και Δεύτερων Παραγώγων Ευαισθησίας. Εφαρμογές στον Αντίστροφο Σχεδιασμό Αγωγού*. Διπλωματική Εργασία, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών.
- [2] Κ.Χ ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ. *Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική*. ΕΜΠ, 2005.
- [3] Κ.Χ ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ. *Συνεκτικές Ροές στις Στροβιλομηχανές*. ΕΜΠ, 2005.
- [4] Α.ΔΕΡΜΑΝΗΣ. *Συνορθώσεις Παρατηρήσεων και Θεωρία Εκτίμησης (τόμος 1)*. Εκδόσεις Ζήτη, Θεσσαλονίκη 1999.
- [5] C. HIRSCH. *Numerical Computation of internal and external flows. Volume 2: Computational methods for inviscid and viscous flows.*, 1990.
- [6] W. SQUIRE,G. TRAP (Paper) *Using Complex Variables to Estimate Derivatives of Real Functions*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998
- [7] THEODORE W. *Gamelin Complex Analysis*. Springer,2001
- [8] D.I. PAPANIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLOU. *Direct, Adjoint and Mixed Approaches for the Computation of Hessian in Airfoil Design Problems*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 53, pp. 455-469, 2007.
- [9] PAPANIMITRIOU D.I., GIANNAKOGLOU K.C. *Computation of the Hessian Matrix in Aerodynamic Inverse Design using Continuous Adjoint Formulations*. Computers and Fluids, to appear, 2007.
- [10] PAPANIMITRIOU D.I., ZYMARIS, A.,S., GIANNAKOGLOU K.C. *Discrete and Continuous Adjoint Formulations for Turbomachinery Applications*. EUROGEN 2005, Munich, September 12-1.
- [11] V.G. ASOUTI, A.S. ZYMARIS, D.I. PAPANIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLOU. *Continuous and Discrete Adjoint Approaches for Aerodynamic Shape Optimization with Low Number preconditioning*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 57, pp. 1485-1504, 2008.
- [12] D.I. PAPANIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLOU *A Continuous Adjoint Method with Objective Function Derivatives Based on Boundary Integrals for Inviscid and Viscous Flows*. Computers and Fluids, Vol. 36, pp. 325-341, 2007

-
- [13] D.I. PAPADIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLU *Total Pressure Losses Minimization in Turbomachinery Cascades, Using a New Continuous Adjoint Formulation*. Proc. IMechE, Part A: Journal of Power and Energy (Special Issue on Turbomachinery). Vol. 221, pp.865-872, 2007
- [14] D.I. PAPADIMITRIOU, K.C. GIANNAKOGLU *A Continuous Adjoint Method for the Minimization of Losses in Cascade Viscous Flows*. 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA-2006-0116, Reno, NV, USA, Jan 9-11, 2006
- [15] PAPADIMITRIOU D.I., GIANNAKOGLU K.C. *Compressor blade optimization using a continuous adjoint formulation*. ASME TURBO EXPO, GT2006/90466, Barcelona, 2006.
- [16] GIANNAKOGLU K.C., PAPADIMITRIOU D.I. *Formulation and application of the continuous adjoint method in aerodynamics and turbomachinery*. Von-Karman Institute Lecture Series, 2006.
- [17] M. MARTINELLI, R. DUVIGNEAU *Comparison of second-order derivatives and metamodel-based Monte-Carlo approaches to estimate statistics for robust design of a transonic wing*. 49th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference.
- [18] KOJI SHIMOYAMMA *Robust Aerodynamic Airfoil Design Optimization Against Wind Variations for Mars Exploratory Airplane*. IAC-06-A3.P.3.07
- [19] PHANI R. ADDURIA and RAVI C. PENMETSIA *System reliability analysis for mixed uncertain variables*. Structural Safety, Volume 31, Issue 5, September 2009, Pages 375-382
- [20] B. EPSTEIN and S. PEIGIN, *Robust Hybrid Approach to Multiobjective Constrained Optimization in Aerodynamics*. AIAA Journal 42 (8) (2004), pp. 1572-1581.
- [21] D.S. LEE , L.F. GONZALEZ , K. SRINIVAS , J. PERIAUX, *Robust evolutionary algorithms for UAV/UCAV aerodynamic and RCS design optimisation*. Computers and Fluids 37 (2008) 547-564, August 2007.
-