

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Δ.Π.Μ.Σ. Υπολογιστική Μηχανική

Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος στο OpenFOAM σε Εφαρμογές Βελτιστοποίησης για Προβλήματα Μεταφοράς Θερμότητας

Μεταπτυχιακή Εργασία
Σάββας Α. Σάββα

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Μάρτιος 2016

Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος στο OpenFOAM σε Εφαρμογές Βελτιστοποίησης για Προβλήματα Μεταφοράς Θερμότητας

Μεταπτυχιακή Εργασία
Σάββας Α. Σάββα

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ
Αθήνα, Μάρτιος 2016

Περίληψη

Στις αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης, σε κάθε κύκλο, απαιτείται ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας, οι οποίοι αποτελούν την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Με τη χρήση της συζυγούς μεθόδου (adjoint method) γίνεται ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας και το υπολογιστικό κόστος παραμένει ανεξάρτητο του αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού. Εξαιτίας του τελευταίου, η συζυγής μέθοδος πλεονεκτεί έναντι άλλων μεθόδων επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης ή εύρεσης παραγώγων αντικειμενικής συνάρτησης. Στην παρούσα εργασία έγινε η εφαρμογή της συζυγούς μεθόδου, συγκεκριμένα της συνεχούς της προσέγγισης, σε πρόβλημα ροής με μεταφορά θερμότητας για την βελτιστοποίηση του συστήματος που περιγράφεται παρακάτω.

Στο υπό μελέτη σύστημα, το φαινόμενο της ροής λαμβάνει μέρος μέσα σε κλειστή κοιλότητα, η οποία έχει σχήμα ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου. Στην κλειστή κοιλότητα η κάτω πλευρά αποτελείται από ένα θερμαινόμενο τοίχωμα, οι πλαϊνές πλευρές αποτελούνται από αδιαβατικά τοιχώματα και η πάνω πλευρά αποτελείται από ένα κινούμενο, σχετικά ψυχρό, τοίχωμα. Σκοπός της συγκεκριμένης διάταξης είναι η απαγωγή θερμότητας από το σύστημα μέσω του κινούμενου τοιχώματος. Όμως, για την κίνηση του κινούμενου τοιχώματος καταναλώνεται ισχύς η οποία εξαρτάται από την ταχύτητα του. Βεβαίως, από την ταχύτητα του κινούμενου τοιχώματος εξαρτάται επίσης και η απαγωγή θερμότητας καθώς όσο πιο έντονη είναι η προκαλούμενη ανακυκλοφορία του ρευστού τόσο πιο έντονα μεταφέρεται η θερμότητα μέσα σε αυτό. Οπότε, στόχος του προβλήματος βελτιστοποίησης είναι η εύρεση του μέτρου και της κατεύθυνσης του διανύσματος της ταχύτητας του κινούμενου τοιχώματος με σκοπό τη μέγιστη απαγωγή θερμότητας με την ελάχιστη κατανάλωση ισχύος.

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης, αναπτύχθηκε η μαθηματική διατύπωση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου, όπου έγινε η εξαγωγή του συστήματος των συζυγών εξισώσεων, των συζυγών οριακών συνθηκών και της έκφρασης υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας. Η κατασκευή του κώδικα για την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης έγινε με την χρήση του ελεύθερου λογισμικού OpenFOAM. Στο συγκεκριμένο λογισμικό σε κάθε κύκλο της βελτιστοποίησης υπολογίζονται με την εξής σειρά, οι μεταβλητές του πεδίου ροής, οι συζυγείς μεταβλητές, οι παράγωγοι ευαισθησίας και, έπειτα, με τη χρήση της απότομης καθόδου ανανεώνονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού. Στην παρούσα εργασία μελετήθηκαν τρεις διαφορετικές περιπτώσεις της διάταξης. Η πρώτη περίπτωση αφορά διδιάστατη ροή ρευστού, οι άλλες δύο αφορούν τριδιάστατη ροή και διαφέρουν ως προς τη γεωμετρία του χωρίου στο οποίο λαμβάνει μέρος η ροή του ρευστού.

The Continuous Adjoint Method in OpenFOAM - Application in Optimization Problems with Heat Transfer

Master Thesis
Savvas A.Savva

Supervisor: Kyriakos C.Giannakoglou Professor NTUA
Athens, March 2016

Abstract

In deterministic optimization methods, in each cycle, the computation of sensitivity derivatives is required. Sensitivity derivatives correspond to the gradient of the objective function with respect to the design variables. Through the adjoint method, it is possible to compute the sensitivity derivatives while keeping the computational cost independent from the number of design variables. The latter makes the adjoint method more to be advantageous than other relevant methods. In this thesis, the continuous variant of the adjoint method's applied to a heat transfer optimization problem, in the geometry which is described below.

Heat takes place across the lid of a parallelepiped shaped cavity. Heat enters the system through its lower surface, while side walls are insulated. The upper surface of the system moves while it retains relatively low temperature. The purpose of the moving surface is to dissipate heat. Because of its motion power is consumed, which depends on the surface velocity. An immediate result of the surface's movement is the recirculation of the fluid which increases heat transfer. The purpose of the present optimization problem is to define the length and direction of upper surface's velocity vector so as to ensure that heat dissipation is maximized and at the same time the power consumption is minimized.

For the optimization problem under consideration, the mathematical formulation of the continuous adjoint method was developed resulting on the adjoint equations, the adjoint boundary conditions as well as expressions for the sensitivity derivatives. The development of the necessary code was based on the open source software OpenFOAM. In each cycle, the code computes in the following order: the flow fields, the adjoint fields and the sensitivity derivatives. Finally, through the use of the steepest descent method, the design variables are updated. Research was conducted on three different cases based on the system that was described earlier. The first case concerns a two-dimensional flow while the other two concern three-dimensional flows and their only differences are related to system geometries.

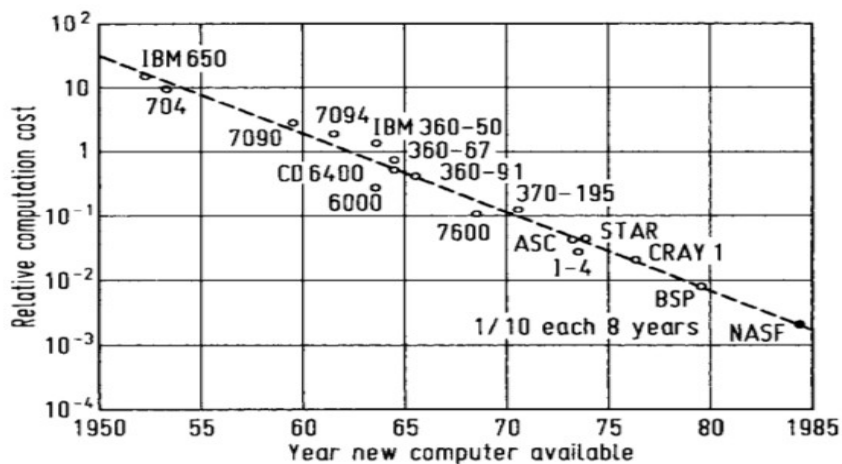
Περιεχόμενα

1.Εισαγωγή.....	9
1.1.Μέθοδοι βελτιστοποίησης.....	11
1.2.Μέθοδοι υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης.....	13
1.2.1.Η Μέθοδος της ευθείας διαφόρισης και η συζυγής μέθοδος.....	15
1.2.1.1.Ορισμός του ευθέος και του συζυγούς προβλήματος.....	15
1.2.1.2.Σύγκριση της Μέθοδου της ευθείας διαφόρισης με τη διακριτή συζυγή μέθοδο.....	17
1.3.Σκοπός της εργασίας.....	20
2.Περιγραφή του πρωτεύοντος προβλήματος.....	22
2.1.Καταστατικές εξισώσεις πρωτεύοντος προβλήματος -Ιδιότητες της ροής.....	22
2.2.Γεωμετρία και οι Οριακές συνθήκες του πρωτεύοντος προβλήματος.....	22
3.Ορισμός της αντικειμενικής συνάρτησης.....	26
4.Μαθηματική διατύπωση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου.....	31
4.1.Εισαγωγή.....	31
4.2.Διατύπωση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων.....	40
4.3.Συζυγείς οριακές συνθήκες.....	44
4.4.Παράγωγοι ευαισθησίας.....	46
5.Η επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης.....	48
6.Αποτελέσματα.....	51
6.1.2Δ Πρόβλημα- Τετραγωνικό χωρίο.....	51
6.2.3Δ Πρόβλημα- Κυβικό χωρίο.....	53
6.3.3Δ Πρόβλημα- Παραλληλεπίπεδο χωρίο.....	55
7.Σύνοψη-Συμπεράσματα.....	57

1. Εισαγωγή

Από τη σκοπιά του Μηχανικού, η ποσοτική περιγραφή είναι ο στόχος της ανάλυσης ενός προβλήματος. Τα προβλήματα στη Μηχανική των Ρευστών διέπονται από τρεις θεμελιώδεις νόμους, της διατήρησης της μάζας, της διατήρησης της ορμής και της διατήρησης της ενέργειας. Αυτοί οι τρεις θεμελιώδεις νόμοι εκφράζονται μέσα από μερικές διαφορικές εξισώσεις. Πριν την εμφάνιση της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, η ποσοτική περιγραφή ενός προβλήματος της Μηχανικής των Ρευστών μπορούσε να εξαχθεί μέσω της διεξαγωγής πειράματος ή της αναλυτικής λύσης του συστήματος των μερικών διαφορικών εξισώσεων. Η διεξαγωγή πειράματος είναι αρκετά χρονοβόρα και υψηλού κόστους διαδικασία. Απ' την άλλη, για να είναι εφικτή η εξαγωγή αναλυτικής λύσης, προϋπόθεση είναι αυτή να γίνεται για προβλήματα με απλή γεωμετρία και με παράλειψη όρων από τις μερικές διαφορικές εξισώσεις, μέσω παραδοχών, δηλαδή αλλοιώνοντας τη φυσική του φαινομένου.

Στα μέσα του περασμένου αιώνα, αυτές οι δύο μέθοδοι για την εξαγωγή της ποσοτικής περιγραφής, δεν ανταποκρίνονταν πλέον στις βιομηχανικές ανάγκες, καθώς τα προβλήματα είχαν αυξημένο αριθμό βαθμών ελευθερίας και απαιτούσαν λεπτομερή ποσοτική περιγραφή. Ταυτόχρονα, υπήρχε τότε ως ένα βαθμό η ανάπτυξη των Η/Υ, η οποία λειτούργησε ως προϋπόθεση της εμφάνισης της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, όπου πλέον επιλύονται με πολύ ικανοποιητική ακρίβεια οι διαφορικές εξισώσεις. Το κόστος μέσω της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ήταν πολύ πιο μικρό ως προς το κόστος της διεξαγωγής πειράματος, όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 1.1.1



Σχήμα 1.1: Χρονική εξέλιξη του σχετικού υπολογιστικού κόστους ως προς το κόστος διεξαγωγής πειράματος σε αεροδυναμική σήραγγα, [1]. Όπως παρατηρείται το σχετικό κόστος μειώνεται κατά μία τάξη μεγέθους κάθε οκτώ χρόνια, εξαιτίας της εκθετικής αύξησης της υπολογιστικής ισχύος και της σχετικά μικρής αύξησης του κόστους των Η/Υ.

Σήμερα, η Υπολογιστική Ρευστοδυναμική αποτελεί βασικό εργαλείο τόσο στην ακαδημαϊκή έρευνα όσο και στη βιομηχανία, υποστηρίζοντας και συμπληρώνοντας το πείραμα και τη θεωρία της Μηχανικής των Ρευστών, [2]. Αποτέλεσμα της χρήσης της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής στην ακαδημαϊκή έρευνα ήταν η μείωση του χρόνου και του κόστους μεταξύ της υπόθεσης και του συμπεράσματος καθώς η διεξαγωγή πειράματος παραμένει κοστοβόρα διαδικασία. Περαιτέρω με την εξέλιξη της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, η οποία εξέλιξη είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την εξέλιξη των Η/Υ, μειώθηκε αρκετά το υπολογιστικό κόστος και μπορεί πλέον η βιομηχανία να χρησιμοποιεί την Υπολογιστική Ρευστοδυναμική για το σχεδιασμό και βελτιστοποίηση προϊόντων, καθώς έτσι μειώνεται ραγδαία ο χρόνος και το κόστος τα οποία μεσολαβούν μεταξύ του αρχικού και τελικού σχεδιασμού του προϊόντος.

Στη μαθηματική βελτιστοποίηση, η οποία είναι κλάδος των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών, η λύση ενός προβλήματος αντιστοιχεί στην εύρεση των τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού (design variables), \mathbf{b} , για τις οποίες επέρχεται βέλτιστη συμπεριφορά του συστήματος. Στη Μηχανική των Ρευστών, η διάταξη του συστήματος αποτελείται από το χωρίο στο οποίο λαμβάνει μέρος η ροή του ρευστού και από το όριο του. Ως μεταβλητές σχεδιασμού μπορούν να ορισθούν ποσότητες που καθορίζουν τη γεωμετρία ενός στερεού τοιχώματος ή συγκεκριμένες κατανομές διάφορων μεγεθών μέσα στο χωρίο ή ακόμη και οι θερμο-ρευστομηχανικές ιδιότητες του ρευστού.

Συνήθης στόχος του προβλήματος βελτιστοποίησης είναι η ελαχιστοποίηση ή η μεγιστοποίηση κάποιας ολοκληρωματικής ποσότητας. Αυτή η ολοκληρωματική ποσότητα ορίζεται ως η αντικειμενική συνάρτηση (objective function) του προβλήματος βελτιστοποίησης, $F = F(\mathbf{b}, \mathbf{U}(\mathbf{b}))$. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης εξαρτάται από τις μεταβλητές σχεδιασμού \mathbf{b} και από τις τιμές των μεταβλητών του προβλήματος της ροής, $\mathbf{U}(\mathbf{b})$, όπου και αυτές, με τη σειρά τους, εξαρτώνται επίσης από τις μεταβλητές σχεδιασμού. Αναζητούνται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού οι οποίες θα δώσουν το ελάχιστο ή το μέγιστο της αντικειμενικής συνάρτησης.

Σε γενική μορφή, για την εύρεση των μεταβλητών σχεδιασμού ακολουθείται μία επαναληπτική διαδικασία. Σε κάθε επανάληψη ή κύκλο βελτιστοποίησης (optimization cycle), αξιολογούνται μία ή πολλές διαφορετικές λύσεις του προβλήματος βελτιστοποίησης. Δηλαδή αξιολογούνται διαφορετικά διανύσματα τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού, \mathbf{b} . Η αξιολόγηση σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης για κάθε υποψήφια λύση γίνεται υπολογίζοντας την αντικειμενική συνάρτηση, με σκοπό να παρακολουθείται το κατά πόσο υπάρχει σύγκλιση στην τιμή της προς το αναζητούμενο ακρότατο. Όμως ο υπολογισμός της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης απαιτεί τον υπολογισμό του πεδίου ροής. Στους διαρκείς υπολογισμούς του πεδίου ροής οφείλεται το υψηλό υπολογιστικό κόστος του προβλήματος βελτιστοποίησης. Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης αναπτύχθηκαν και αναπτύσσονται στην κατεύθυνση μείωσης των αναγκαίων επαναυπολογισμών του πεδίου ροής, οι οποίοι πρέπει να γίνουν μέχρι να βρεθεί η βέλτιστη λύση.

1.1. Μέθοδοι βελτιστοποίησης

Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης (optimization methods) χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, στις αιτιοκρατικές [3, 4, 5] και στις στοχαστικές μεθόδους [6, 7]. Η διαφορά των δύο αυτών κατηγοριών έγκειται ως προς τον τρόπο που γίνεται η ανανέωση τιμών των διανυσμάτων \mathbf{b} σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης. Στις στοχαστικές γίνεται με στοιχεία τυχαιότητας και, αντίστοιχα, στις αιτιοκρατικές μεθόδους γίνεται χρησιμοποιώντας παράγωγους της αντικειμενικής συνάρτησης.

Στοχαστικές μέθοδοι βελτιστοποίησης

Στις στοχαστικές μεθόδους (stochastic methods), η επιλογή των διανυσμάτων \mathbf{b} γίνεται τυχαία ή στρατηγικά τυχαία. Συνήθως, η στρατηγική τεχνική είναι εμπνευσμένη και μιμείται τεχνικές από τη φύση, όπως είναι ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης με αποικίες μυρμηγκιών (ant colony optimization algorithm) [8]. Ο αλγόριθμος μιμείται τον τρόπο με τον οποίο τα μυρμηγκία κινούνται προς την τροφή τους. Οι εξελικτικοί αλγόριθμοι (evolutionary algorithms) [9, 10], είναι οι πλέον δημοφιλείς και, άρα, το πιο αντιπροσωπευτικό δείγμα από τις στοχαστικές μεθόδους. Οι εξελικτικοί αλγόριθμοι βασίζονται στη θεωρία εξέλιξης των ειδών όπως αυτές διατυπώθηκαν από τον Δαρβίνο, περί το 1960. Σύμφωνα με τη σχετική θεωρία, κάθε άτομο έχει ως στόχο την επιβίωση και την αναπαραγωγή του στο περιβάλλον. Απώτερος σκοπός, αυτού του ατόμου, είναι να αφήσει δυνατούς απογόνους έτσι ώστε το γονιδίωμα του να περνάει από γενιά σε γενιά [11].

Γενικά, σε έναν κλασικό εξελικτικό αλγόριθμο, σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης αξιολογούνται τα άτομα μίας γενιάς. Κάθε άτομο αποτελεί μία υποψήφια λύση δηλαδή η γενιά είναι ένα πλήθος διανυσμάτων των μεταβλητών σχεδιασμού, \mathbf{b} . Η αξιολόγηση μίας υποψήφιας λύσης γίνεται μέσω του λογισμικού αξιολόγησης (evaluation software). Σε εφαρμογές Μηχανικής των Ρευστών το λογισμικό αξιολόγησης αποτελείται από κώδικα ή κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής οι οποίοι υπολογίζουν το πεδίο ροής για τον μετέπειτα υπολογισμό της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Σύμφωνα με τις αξιολογήσεις κάθε ατόμου και χρησιμοποιώντας τελεστές μετάλλαξης και διασταύρωσης, προκύπτουν οι απόγονοι της νέας γενιάς δηλαδή οι νέες υποψήφιες λύσεις του επόμενου κύκλου βελτιστοποίησης. Ο εξελικτικός αλγόριθμος μπορεί να χειριστεί προβλήματα βελτιστοποίησης πολλών στόχων, εξαγοντας έτσι το μέτωπο Pareto (Pareto front). Επίσης, η χρήση ενός εξελικτικού αλγόριθμου δεν απαιτεί πρόσβαση στο λογισμικό αξιολόγησης. Επιπλέον εξαιτίας της τυχαιότητας, η αναζήτηση των υποψήφιων λύσεων γίνεται μέσα από ολόκληρο το πεδίο τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού, αυτό κάνει δυνατή την εύρεση του καθολικού ακρότατου. Όμως το υπολογιστικό κόστος αυτής της μορφής εξελικτικού αλγόριθμου είναι αρκετά υψηλό, εξαιτίας του ότι για κάθε υποψήφια λύση απαιτείται να επαναυπολογιστεί το πεδίο ροής. Για να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος, εισάγεται η χρήση μεταπροτύπων (metamodels), τα οποία είναι υποκατάστατα του 'ακριβού' λογισμικού αξιολόγησης. Συγκεκριμένα με τη χρήση μεταπροτύπων προσεγγίζεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης την οποία θα έδινε το αντίστοιχο λογισμικό. Επίσης, υπάρχει η δυνατότητα της παράλληλης επεξεργασίας κατά τη φάση της αξιολόγησης των υποψήφιων λύσεων, όπου ταυτόχρονα αξιολογούνται περισσότερες

από μία. Το τελευταίο έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση του πραγματικού χρόνου της βελτιστοποίησης.

Αιτιοκρατικές μέθοδοι βελτιστοποίησης

Στις αιτιοκρατικές μεθόδους (deterministic methods), σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης, οι μεταβλητές σχεδιασμού διορθώνονται με γνώμονα την κατεύθυνση την οποία υποδεικνύουν οι παράγωγοι ευαισθησίας (sensitivity derivatives), $\frac{dF}{db_n}$. Έτσι, απαιτείται μικρότερος αριθμός

αξιολογήσεων από ότι στους εξελικτικούς αλγόριθμους, με αποτέλεσμα να προκύπτει πιο γρήγορα η σύγκλιση. Όμως υπάρχει κίνδυνος να 'εγκλωβιστεί' η λύση σε κάποιο τοπικό ακρότατο, εφόσον σε εκείνο το σημείο θα μηδενιστούν οι παράγωγοι ευαισθησίας. Το προηγούμενο διορθώνεται θέτοντας διαφορετική αρχικοποίηση και επανεκκινώντας τον αλγόριθμο, με τίμημα την αύξηση του αριθμού των αξιολογήσεων. Επίσης οι αιτιοκρατικές μέθοδοι παρουσιάζουν αδυναμία στον χειρισμό προβλημάτων βελτιστοποίησης πολλών στόχων, καθώς μπορούν να χειριστούν μόνο μία αντικειμενική συνάρτηση. Το πρόβλημα συνήθως αντιμετωπίζεται διατυπώνοντας μία αντικειμενική συνάρτηση η οποία περιέχει όλους τους επιμέρους στόχους. Με σκοπό τη ρύθμιση της σημαντικότητας κάθε στόχου, καθένας από αυτούς πολλαπλασιάζεται με ένα συντελεστή βαρύτητας.

Από τις πιο βασικές αιτιοκρατικές μεθόδους αποτελεί η μέθοδος Newton [11]. Η διατύπωσή της προκύπτει μέσω του αναπτύγματος Taylor της αντικειμενικής συνάρτησης

$$F(\mathbf{b}^n + \Delta \mathbf{b}^n) \approx F(\mathbf{b}^n) + (\Delta \mathbf{b}^n)^T \nabla F(\mathbf{b}^n) + \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{b}^n)^T \nabla^2 F(\mathbf{b}^n) \Delta \mathbf{b}^n \quad (1)$$

όπου το $\Delta \mathbf{b}$ συμβολίζει το διάνυσμα της διόρθωσης των μεταβλητών σχεδιασμού και ο δείκτης n συμβολίζει την αρίθμηση των κύκλων βελτιστοποίησης. Για τον επόμενο κύκλο βελτιστοποίησης, οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού προκύπτουν ως

$$\mathbf{b}^{n+1} = \mathbf{b}^n + \Delta \mathbf{b}^n \quad (2)$$

Παραγωγίζοντας την προσέγγιση της $F(\mathbf{b}^n + \Delta \mathbf{b}^n)$ και μηδενίζοντας την παράγωγο της, προκύπτει η έκφραση της διόρθωσης τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού

$$\Delta \mathbf{b}^n = (\nabla^2 F(\mathbf{b}^n))^{-1} \nabla F(\mathbf{b}^n) \quad (3)$$

Το μητρώο $\nabla^2 F(\mathbf{b}^n)$ ορίζεται ως το εσσιανό μητρώο (Hessian Matrix) και έχει ως στοιχεία τις δεύτερες παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Απαραίτητη προϋπόθεση για να γραφεί η πιο πάνω σχέση είναι το εσσιανό μητρώο να είναι θετικά

ορισμένο έτσι ώστε να είναι εφικτή η αντιστροφή του. Εξαιτίας του 'ακριβού' υπολογισμού του εσσιανού μητρώου σπάνια χρησιμοποιείται η ακριβής μέθοδος Newton. Αντί αυτής, προτιμώνται οι προσεγγιστικές μέθοδοι Newton (Quasi-Newton) στις οποίες το εσσιανό μητρώο υπολογίζεται προσεγγιστικά. Παρόλα αυτά, οι προσεγγιστικές μέθοδοι Newton διατηρούν τον πολύ καλό ρυθμό σύγκλισης της ακριβούς μεθόδου Newton.

Σε αυτήν την εργασία, η αιτιοκρατική μέθοδος η οποία χρησιμοποιείται είναι αυτή της απότομης καθόδου (steepest descent), κατά την οποία το εσσιανό μητρώο αντικαθίσταται από ένα μοναδιαίο πίνακα. Η σημασία αυτής της αντικατάστασης είναι η αποκοπή του τρίτου όρου του αναπτύγματος Taylor της αντικειμενικής συνάρτησης, το οποίο παρουσιάζεται στη σχέση 1. Τότε, το διάλυμα της διόρθωσης των μεταβλητών σχεδιασμού ταυτίζεται με τις παραγώγους ευαισθησίας, $\Delta \mathbf{b} = \nabla F(\mathbf{b})$. Επίσης, εισάγεται η ποσότητα $\eta > 0$, η οποία είναι το βήμα με το οποίο θα προχωρήσει η λύση προς την κατεύθυνση η οποία υποδεικνύεται από τις παραγώγους ευαισθησίας. Για πρόβλημα βελτιστοποίησης του οποίου ο στόχος είναι η μεγιστοποίηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης, η έκφραση της μεθόδου της απότομης καθόδου είναι

$$\mathbf{b}^{n+1} = \mathbf{b}^n + \eta \nabla F(\mathbf{b}^n) \quad (4)$$

Η απότομη κάθοδος είναι μία απλή αιτιοκρατική μέθοδος, ιδίως εάν η τιμή του βήματος η παραμένει σταθερή σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης. Μία πολύ καλή λύση είναι ο συνδυασμός της απότομης καθόδου με κάποια από τις προσεγγιστικές μεθόδους Newton. Κατά τον συνδυασμό αυτό, για τους πρώτους κύκλους βελτιστοποίησης χρησιμοποιείται η απότομη κάθοδος και, καθώς πλησιάζει η σύγκλιση, ενεργοποιείται η προσεγγιστική μέθοδος Newton. Παρόλα αυτά η αποτελεσματικότητα των αιτιοκρατικών μεθόδων εξαρτάται από τη μέθοδο υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας.

1.2. Μέθοδοι υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης

Μια αρκετά απλοϊκή μέθοδος υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας είναι η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών (finite differences method, FD). Στις παρακάτω σχέσεις παρουσιάζονται οι τύποι υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας για κάθε κύκλο βελτιστοποίησης. Έστω N είναι το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού και e μία απειροελάχιστη ποσότητα. Με το σύμβολο $\frac{\delta}{\delta b_n}$ συμβολίζεται η ολική παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Στις σχέσεις 5 και 6 χρησιμοποιούνται σχήματα 1^{ns} και 2^{ns} τάξης ακρίβειας αντίστοιχα.

$$\frac{\delta F(\mathbf{b})}{\delta b_n} = \frac{F(b_1, \dots, b_n + e, \dots, b_N) - F(b_1, \dots, b_n, \dots, b_N)}{e} + O(e) \quad (5)$$

$$\frac{\delta F(\mathbf{b})}{\delta b_n} = \frac{F(b_1, \dots, b_n + e, \dots, b_N) - F(b_1, \dots, b_n - e, \dots, b_N)}{2e} + O(e^2) \quad (6)$$

Όπως παρατηρείται από τα σχήματα 1^{ns} και 2^{ns} τάξης ακρίβειας, ο αριθμός των επαναυπολογισμών σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης ισούται με $N+1$ και με $2N+1$ αντίστοιχα. Το '+1' είναι εξαιτίας του επιπρόσθετου υπολογισμού του πεδίου ροής με σκοπό τον υπολογισμό της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Δηλαδή, το υπολογιστικό κόστος είναι γραμμικά ανάλογο του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού. Το προηγούμενο καθιστά τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών εξαιρετικά ασύμφορη σε προβλήματα βελτιστοποίησης μεγάλου αριθμού μεταβλητών σχεδιασμού.

Επίσης, οι υπολογισμοί των παραγώγων ευαισθησίας είναι αρκετά επιρρεπείς ως προς την τιμή της ποσότητας e . Για αυτό, αρχικά πρέπει να προηγηθεί μια μελέτη ανεξαρτησίας, με προσοχή στην επιλογή της τιμής του e , καθώς μία πολύ μικρή τιμή θα απειρήσει τις τιμές των παραγώγων ευαισθησίας. Επιπλέον σε αυτήν τη μέθοδο, απαιτείται η πλήρης σύγκλιση της λύσης του πεδίου ροής σε κάθε επαναυπολογισμό της, εξαιτίας του ότι στον αριθμητή αφαιρούνται δύο πολύ κοντινές, ως προς την τιμή, ποσότητες.

Στη μέθοδο των μιγαδικών μεταβλητών (complex variables method, CV) [12, 13], οι παράγωγοι ευαισθησίας υπολογίζονται σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης σύμφωνα με την παρακάτω σχέση

$$\frac{\delta F(\mathbf{b})}{\delta b_n} = \frac{F(b_1, \dots, b_n + ie, \dots, b_N)}{e}, \quad i = \sqrt{-1} \quad (7)$$

Σε αντίθεση με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, στη μέθοδο των μιγαδικών μεταβλητών (complex variables) ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας είναι ανεξάρτητος από την τιμή της ποσότητας e . Επίσης δεν απαιτείται η πλήρης σύγκλιση της λύσης του πεδίου ροής, εφόσον δεν υπάρχει η αφαίρεση η οποία υπήρχε προηγουμένως.

Για τον προγραμματισμό της μεθόδου των μιγαδικών μεταβλητών δεν απαιτείται απλά η πρόσβαση στο λογισμικό αξιολόγησης αλλά η τροποποίηση του. Συγκεκριμένα, κάθε μεταβλητή του πεδίου ροής πρέπει να ορισθεί και να αντιμετωπιστεί ως μιγαδική. Αποτέλεσμα του προηγούμενου είναι να διπλασιασθούν οι πράξεις και η μνήμη τα οποία απαιτούνται, εφόσον ο μιγαδικός αριθμός στον προγραμματισμό εκφράζεται ως ένα διάνυσμα με δύο συνιστώσες. Επίσης, ο αριθμός των επαναυπολογισμών σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης είναι ανάλογος του αριθμού του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού και ίσος με $N+1$.

Οι υπόλοιπες μέθοδοι παρουσιάζονται στην επόμενη ενότητα αυτού του κεφαλαίου. Αυτές χρήζουν ιδιαίτερης σημασίας, καθώς υπερτερούν από τις ήδη προαναφερθείσες. Η παρουσίαση τους

συνοδεύεται από τη σύγκριση μεταξύ τους με σκοπό την ανάδειξη των χαρακτηριστικών τους.

1.2.1. Η Μέθοδος της ευθείας διαφόρισης και η συζυγής μέθοδος

Στη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης (direct differentiation, DD) [14], διαφορίζονται οι εξισώσεις του πεδίου ροής ως προς κάθε μεταβλητή σχεδιασμού. Έτσι προκύπτουν N προβλήματα προς επίλυση, όπου στο καθένα από αυτά το διάνυσμα της λύσης είναι οι παράγωγοι των μεταβλητών του πεδίου ροής ως προς συγκεκριμένη μεταβλητή σχεδιασμού. Έτσι, το κόστος της μεθόδου της ευθείας διαφόρισης εξαρτάται από το πλήθος N των μεταβλητών σχεδιασμού και η χρήση της μεθόδου γίνεται ασύμφορη για προβλήματα μεγάλου πλήθους μεταβλητών σχεδιασμού. Παρόλα αυτά, η χρήση της μεθόδου είναι απαραίτητη για τις αιτιοκρατικές μεθόδους οι οποίες χρησιμοποιούν υψηλής τάξης παράγωγους ευαισθησίας [15, 16].

Η συζυγής μέθοδος (adjoint method, AM) [17, 18, 19], έχει δύο προσεγγίσεις, τη συνεχή και τη διακριτή. Η διαφορά τους έγκειται στην πορεία η οποία ακολουθείται για την εξαγωγή των διακριτοποιημένων συζυγών εξισώσεων. Στη συνεχή συζυγή προσέγγιση (continuous adjoint approach) [20, 21, 22], από τις εξισώσεις του πεδίου ροής και τις οριακές συνθήκες, εξάγονται οι συζυγείς εξισώσεις και οι συζυγείς οριακές συνθήκες και έπειτα αυτές διακριτοποιούνται. Στη διακριτή συζυγή προσέγγιση (discrete adjoint approach) [19, 23], πρώτα διακριτοποιούνται οι εξισώσεις του πεδίου ροής και, στη συνέχεια, εξάγονται οι διακριτοποιημένες συζυγείς εξισώσεις.

Και στις δύο προσεγγίσεις το πλεονέκτημα της συζυγούς μεθόδου είναι ότι το κόστος υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας είναι ανεξάρτητο του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού. Το τελευταίο θα γίνει κατανοητό με τη σύγκριση των γενικών διατυπώσεων της διακριτής συζυγούς μεθόδου με τη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης. Επίσης κατανοητό θα γίνει και για την περίπτωση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου μέσα από τη μαθηματική διατύπωση της για το πρόβλημα που μελετάται σε αυτήν την εργασία.

Για τις γενικές μαθηματικές διατυπώσεις της διακριτής συζυγούς μεθόδου και της μεθόδου της ευθείας διαφόρισης, απαιτείται ο ορισμός του ευθέος και του συζυγούς του προβλήματος.

1.2.1.1 Ορισμός του ευθέος και του συζυγούς προβλήματος

Με σκοπό τον ορισμό του συζυγούς προβλήματος παρουσιάζεται η συζυγής προσέγγιση από την γραμμική άλγεβρα. Επίσης παρουσιάζεται και η προσέγγιση μέσω των πολλαπλασιαστών Lagrange με σκοπό να αποδειχθεί η ισοδυναμία της με την πρώτη προσέγγιση. Η προσέγγιση μέσω της χρήσης πολλαπλασιαστών Lagrange θα είναι βοηθητική για την παρουσίαση της διακριτής συζυγούς μεθόδου.

Κατά τη συζυγή προσέγγιση, έστω ότι επιθυμείται ο υπολογισμός της βαθμωτής ποσότητας T ,

μέσω του παρακάτω εσωτερικού γινομένου

$$T = \mathbf{g}^T \mathbf{U} \quad (8)$$

όπου το διάνυσμα \mathbf{g} είναι γνωστό και το διάνυσμα \mathbf{U} προκύπτει από την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$\mathbf{A} \mathbf{U} = \mathbf{f} \quad (9)$$

Ο πίνακας \mathbf{A} και το διάνυσμα \mathbf{f} είναι προφανώς, γνωστά. Η επίλυση του γραμμικού συστήματος της σχέσης 9 ορίζεται ως το ευθύ πρόβλημα και ο τρόπος υπολογισμού του T χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 8 και 9 ορίζεται ως η ευθεία μέθοδος υπολογισμού.

Εναλλακτικά, η βαθμωτή ποσότητα T μπορεί να υπολογισθεί από τη σχέση

$$T = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{f} \quad (10)$$

όπου το διάνυσμα $\mathbf{\Psi}$ προκύπτει από την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$\mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} = \mathbf{g} \quad (11)$$

Οι μεταβλητές του διανύσματος $\mathbf{\Psi}$ είναι οι συζυγείς μεταβλητές του διανύσματος \mathbf{U} . Συνδυάζοντας τις σχέσεις 8, 9, 10 και 11 επαληθεύεται ότι

$$\mathbf{g}^T \mathbf{U} = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{f} \Rightarrow \mathbf{g}^T \mathbf{U} = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{A} \mathbf{U} \Rightarrow \mathbf{g}^T = \mathbf{\Psi}^T \mathbf{A} \Rightarrow (\mathbf{g}^T)^T = (\mathbf{\Psi}^T \mathbf{A})^T \Rightarrow \mathbf{g} = \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \quad (12)$$

Η επίλυση του γραμμικού συστήματος της σχέσης 11 ορίζεται ως το συζυγές πρόβλημα και ο τρόπος υπολογισμού του βαθμωτού μεγέθους T χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 10 και 11 ορίζεται ως η συζυγής μέθοδος.

Κατά τη δεύτερη συζυγή προσέγγιση, το διάνυσμα $\mathbf{\Psi}$ ορίζεται ως το διάνυσμα πολλαπλασιαστών Lagrange. Συγχρόνως, ορίζεται το επαυξημένο βαθμωτό μέγεθος T_{aug}

$$T_{aug} = \mathbf{g}^T \mathbf{U} - \mathbf{\Psi}^T (\mathbf{A} \mathbf{U} - \mathbf{f}) \quad (13)$$

Εφόσον $\mathbf{A}\mathbf{U}-\mathbf{f}=0$, τότε ισχύει $T_{aug}\equiv T$. Στη συνέχεια, η σχέση 13 αναπτύσσεται ως εξής

$$T_{aug}=\mathbf{g}^T\mathbf{U}-\mathbf{\Psi}^T\mathbf{A}\mathbf{U}+\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f}=(\mathbf{g}^T-\mathbf{\Psi}^T\mathbf{A})\mathbf{U}+\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f}=(\mathbf{g}^T-(\mathbf{A}^T\mathbf{\Psi})^T)\mathbf{U}+\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f} \quad (14)$$

Με την προϋπόθεση ότι το διάνυσμα $\mathbf{\Psi}$ υπολογίζεται από το γραμμικό σύστημα της εξίσωσης 11, προκύπτει

$$T\equiv T_{aug}=(\mathbf{g}^T-\mathbf{g}^T)\mathbf{U}+\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f}=\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f} \quad (15)$$

Με τη σχέση 15 αποδεικνύεται η ισοδυναμία των δύο προσεγγίσεων. Δηλαδή η διατύπωση του συζυγούς προβλήματος μπορεί να προκύψει είτε επιλέγοντας τις μεταβλητές του διανύσματος $\mathbf{\Psi}$ ως τις συζυγείς μεταβλητές του διανύσματος \mathbf{U} ή ως τους πολλαπλασιαστές Lagrange.

Όπως παρουσιάστηκε και στις δύο προσεγγίσεις, γίνεται κατανοητό ότι όποια και αν είναι η επιλογή της μεθόδου, είτε η ευθεία είτε η συζυγής, υπολογίζεται η ίδια τιμή για το βαθμωτό μέγεθος T . Όμως το υπολογιστικό κόστος της χρήσης της κάθε μεθόδου δεν είναι το ίδιο. Εξαιρέση στο προηγούμενο είναι η περίπτωση στην οποία ο υπολογισμός του T θα γίνει μόνο μια φορά, για ένα \mathbf{f} και για ένα \mathbf{g} . Σε αυτήν την περίπτωση, το υπολογιστικό κόστος ισοδυναμεί περίπου με το κόστος επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος καθώς το κόστος εκτέλεσης της πράξης ενός εσωτερικού γινομένου είναι σχετικά αμελητέο.

Στην περίπτωση κατά την οποία απαιτείται να γίνει ο υπολογισμός του βαθμωτού μεγέθους T $M\times N$ φορές, όπου M ο αριθμός των διανυσμάτων \mathbf{g} και N ο αριθμός των διανυσμάτων \mathbf{f} , τότε αποκτά νόημα η επιλογή της μεθόδου. Εάν επιλεγεί η ευθεία μέθοδος, $(\mathbf{A}\mathbf{U}=\mathbf{f}, T=\mathbf{g}^T\mathbf{U})$, τότε το υπολογιστικό κόστος ισοδυναμεί με την επίλυση N γραμμικών συστημάτων. Εάν όμως επιλεγεί η συζυγής μέθοδος, $(\mathbf{A}^T\mathbf{\Psi}=\mathbf{g}, T=\mathbf{\Psi}^T\mathbf{f})$, τότε το υπολογιστικό κόστος ισοδυναμεί με το κόστος M επίλυσεων γραμμικών συστημάτων. Οπότε σε κάθε περίπτωση, για την επιλογή της μεθόδου, επιβάλλεται η σύγκριση μεταξύ των τιμών των M και N . Ανακεφαλαιώνοντας, αν $N<M$ τότε συμφέρει η ευθεία μέθοδος και αν $N>M$ η συζυγής μέθοδος.

1.2.1.2 Σύγκριση της Μέθόδου της ευθείας διαφορίσης με τη διακριτή συζυγή μέθοδο

Στην μέθοδο της ευθείας διαφορίσης, διαφορίζεται η αντικειμενική συνάρτηση, $F=F(\mathbf{U}_k(b_n), b_n)$, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Έτσι προκύπτει η έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας.

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial F}{\partial b_n} \quad (16)$$

όπου το κόστος του υπολογισμού των διανυσμάτων $\frac{\partial F}{\partial b_n}$ και $\frac{\partial F}{\partial U_k}$ είναι πάρα πολύ μικρό σε σχέση με το κόστος υπολογισμού των διανυσμάτων $\frac{\delta U_k}{\delta b_n}$, 11. Η έκφραση των γραμμικών συστημάτων για τον υπολογισμό των διανυσμάτων $\frac{\delta U_k}{\delta b_n}$, προκύπτει μέσω της διαφορίσης των εξισώσεων του πεδίου ροής $R_k = R_k(U_k(b_n), b_n) = 0$.

Διαφορίζοντας τις εξισώσεις του πεδίου ροής ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού προκύπτει

$$\frac{\delta R_k}{\delta b_n} = \frac{\partial R_k}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial R_k}{\partial b_n} \quad (17)$$

Εφόσον για τα υπόλοιπα των εξισώσεων του πεδίου ροής ισχύει ότι $R_k = 0$, τότε και για τις ολικές παραγώγους ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού ισχύει

$$\frac{\delta R_k}{\delta b_n} = 0 \quad (18)$$

Συνδυάζοντας τις 17 και 18, ισχύει

$$\frac{\partial R_k}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} = -\frac{\partial R_k}{\partial b_n} \quad (19)$$

Έτσι προκύπτουν N γραμμικά συστήματα εξισώσεων προς επίλυση. Η λύση κάθε συστήματος αποτελεί το διάνυσμα των παραγώγων των μεταβλητών του πεδίου ροής ως προς μία συγκεκριμένη μεταβλητή σχεδιασμού $\frac{\delta U}{\delta b_n}$. Υπενθυμίζεται ότι το N συμβολίζει το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού.

Στη διακριτή συζυγή μέθοδο (discrete adjoint method), με σκοπό να προκύψει το συζυγές πρόβλημα, με παρόμοιο τρόπο όπως στη σχέση 13 ορίζεται η επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση (augmented objective Function) ως $F_{aug} = F - \Psi_k^T R_k$, η οποία ταυτίζεται με την αντικειμενική συνάρτηση F εφόσον $R_k = 0$. Διαφορίζοντας την επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, προκύπτει

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F}{\delta b_n} &= \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial F}{\partial b_n} - \Psi^T \left(\frac{\partial R_k}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial R_k}{\partial b_n} \right) \\
&= \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial F}{\partial b_n} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial b_n} \\
&= \left(\frac{\partial F}{\partial U_k} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial U_k} \right) \frac{\delta U_k}{\delta b_n} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial b_n} + \frac{\partial F}{\partial b_n}
\end{aligned} \tag{20}$$

Με σκοπό την αποφυγή της ανάγκης υπολογισμού του όρου $\frac{\delta U_k}{\delta b_n}$, ο οποίος για να υπολογιστεί χρειάζεται N επιλύσεις γραμμικών συστημάτων, το άθροισμα των όρων εντός της παρένθεσης επιβάλλεται να είναι ίσο με μηδέν. Έτσι προκύπτει το σύστημα των συζυγών εξισώσεων

$$\left(\frac{\partial R_k}{\partial U_k} \right)^T \Psi_k = \left(\frac{\partial F}{\partial U_k} \right)^T \tag{21}$$

Έχοντας ικανοποιήσει τη σχέση 21, η έκφραση υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας για τη διακριτή συζυγή μέθοδο είναι η εξής

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \frac{\partial F}{\partial b_n} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial b_n} \tag{22}$$

Οι σχέσεις 19, 16, 21 και 22, οι οποίες χρησιμοποιούνται στη μέθοδο της ευθείας διαφόρισης και στη διακριτή συζυγή μέθοδο, συνοψίζονται στον πίνακα 1, όπου επίσης παρουσιάζεται και η ταύτιση τους ως προς τη συζυγή προσέγγιση που έγινε στο προηγούμενο εδάφιο 1.2.1.1. Συμπερασματικά, σε πρόβλημα βελτιστοποίησης μίας αντικειμενικής συναρτήσης και με πλήθος N μεταβλητών σχεδιασμού, η επίλυση του μέσω της μεθόδου της ευθείας διαφόρισης απαιτεί επίλυση των γραμμικών συστημάτων της εξίσωσης 19 τα οποία έχουν πλήθος N . Με τον τρόπο αυτό, το υπολογιστικό κόστος είναι ανάλογο του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού.

Αντίθετα, στη διακριτή συζυγή μέθοδο, το υπολογιστικό κόστος είναι ανεξάρτητο του πλήθους των μεταβλητών σχεδιασμού. Συγκεκριμένα, το υπολογιστικό κόστος ισοδυναμεί με το κόστος επίλυσης δύο γραμμικών συστημάτων. Το γραμμικοποιημένο σύστημα εξισώσεων για τον υπολογισμό του πεδίου ροής και το γραμμικό σύστημα για τον υπολογισμό των συζυγών μεταβλητών. Δηλαδή σε ένα κύκλο βελτιστοποίησης για τις τρέχουσες τιμές του διανύσματος \mathbf{b} , αρχικά επιλύεται το πρωτεύον πρόβλημα, μετά το συζυγές αυτού, υπολογίζονται οι παράγωγοι ευαισθησίας και έπειτα ανανεώνονται οι τιμές του διανύσματος \mathbf{b} . Τα προηγούμενα ισχύουν τόσο στη διακριτή όσο και στη συνεχή προσέγγιση της συζυγούς μεθόδου, με την οποία ασχολείται αυτή η εργασία και η οποία υλοποιείται στη συνέχεια. Επίσης σημειώνεται ότι ως πρωτεύον πρόβλημα (primal problem)

ορίζεται το πρόβλημα της επίλυσης του πεδίου ροής.

	Μέθοδος ευθείας διαφόρισης	Διακριτή συζυγής μέθοδος
Γραμμικό σύστημα εξισώσεων	$\underbrace{\frac{\partial R_k}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} = -\frac{\partial R_k}{\partial b_n}}_{A U = f}$	$\underbrace{\left(\frac{\partial R_k}{\partial U_k}\right)^T \Psi_k = \left(\frac{\partial F}{\partial U_k}\right)^T}_{A^T \Psi = g}$
Παράγωγοι ευαισθησίας	$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n} + \frac{\partial F}{\partial b_n}$ $\Rightarrow \underbrace{\frac{\delta F}{\delta b_n} - \frac{\partial F}{\partial b_n}}_{T = g^T U} = \frac{\partial F}{\partial U_k} \frac{\delta U_k}{\delta b_n}$	$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \frac{\partial F}{\partial b_n} - \Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial b_n}$ $\Rightarrow \underbrace{\frac{\delta F}{\delta b_n} - \frac{\partial F}{\partial b_n}}_{T = -\Psi^T f} = -\Psi_k^T \frac{\partial R_k}{\partial b_n}$

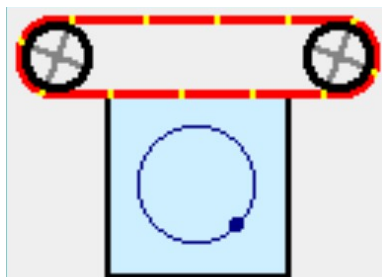
Πίνακας 1: Παρουσιάζονται τα γραμμικά συστήματα και οι εκφράσεις των παραγώγων ευαισθησίας για κάθε μέθοδο. Οι όροι των σχέσεων ταυτίζονται με τους όρους που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 1.2.1.1. Συγκεκριμένα $\frac{\partial R_k}{\partial U_k} \rightarrow A$, $\frac{\delta U_k}{\delta b_n} \rightarrow U$, $-\frac{\partial R_k}{\partial b_n} \rightarrow f$, $\left(\frac{\partial F}{\partial U_k}\right)^T \rightarrow g$ και $\left(\frac{\delta F}{\delta b_n} - \frac{\partial F}{\partial b_n}\right) \rightarrow T$

1.3. Σκοπός της εργασίας

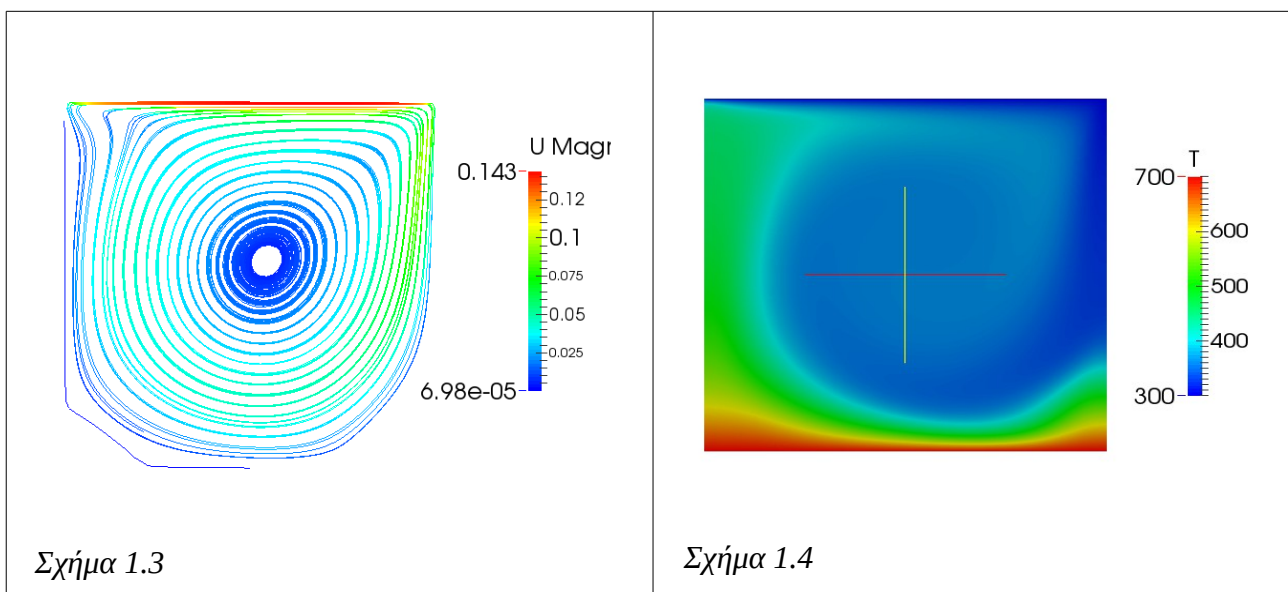
Πρωταρχικός σκοπός είναι η ανάπτυξη της μαθηματικής διατύπωσης της συνεχούς συζυγούς μεθόδου για πρόβλημα βελτιστοποίησης, στο οποίο το πρωτεύον πρόβλημα αφορά την επίλυση τριδιάστατης ροής σε κοιλότητα με επίπεδο κάλυμμα που είναι κινούμενο με σταθερή γραμμική ταχύτητα, (Lid-driven cavity problem) [24, 25, 26]. Το συγκεκριμένο πρόβλημα ροής, εξαιτίας της απλότητας του, χρησιμοποιείται για την πιστοποίηση κώδικων και για τη δοκιμή νέων μεθόδων επίλυσης, η γεωμετρία του αναπαριστάται σε ένα τυπικό σκαρίφημα στο σχήμα 1.2. Συγκεκριμένα, σε αυτήν την εργασία, προστίθεται η επίλυση της ενεργειακής εξίσωσης, οπότε έτσι ορίζεται και η θερμοκρασία ως μεταβλητή του πεδίου ροής. Στα σχήματα 1.3 και 1.4 αντίστοιχα παρουσιάζονται οι γραμμές ροής και το πεδίο της θερμοκρασίας για διάδιάστατη ροή, επίσης η περιγραφή του πρωτεύοντος προβλήματος γίνεται στο επόμενο κεφάλαιο, 2.

Η διατύπωση της συνεχούς συζυγής μεθόδου, δεν αναπτύσσεται μόνο για συγκεκριμένο πρωτεύον πρόβλημα, αλλά επίσης για συγκεκριμένες μεταβλητές σχεδιασμού και για συγκεκριμένη αντικειμενική συνάρτηση. Οι μεταβλητές σχεδιασμού, σε αυτήν την εργασία, αποτελούνται από κατανομές μεταβλητών του πεδίου ροής στο όριο, δηλαδή στην ουσία είναι οριακές συνθήκες οπότε αναφέρονται στην αντίστοιχη ενότητα, 2.2. Επίσης η έκφραση της αντικειμενικής συνάρτησης περιγράφεται στο κεφάλαιο 3.

Ο απώτερος σκοπός είναι η κατασκευή κώδικα για την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης, στον οποίο θα προγραμματιστεί και η επίλυση του συζυγούς προβλήματος, όπως αυτό έχει προκύψει από την μαθηματική διατύπωση. Στην πορεία του προγραμματισμού του κώδικα, αυτός θα δοκιμαστεί σε μια περίπτωση διδιάστατης ροής για την επιβεβαίωση του. Έπειτα, ο κώδικας θα επεκταθεί και σε περιπτώσεις τριδιάστατης ροής για την εύρεση της βέλτιστης λύσης σε αυτές. Οι γεωμετρίες όλων των περιπτώσεων που θα μελετηθούν σε αυτή την εργασία παρουσιάζονται στην ενότητα 2.2.



Σχήμα 1.2: Τυπικό σκαρίφημα του πρωτεύον προβλήματος, όπου τον ρόλο της κινούμενης πλάκας αναλαμβάνει ο περιστρεφόμενος μάντλας και έτσι προκύπτει η ανακυκλοφορία του ρευστού [26].



Στο σχήμα 1.3 παρουσιάζονται οι γραμμές ροής και το μέτρο της ταχύτητας σε αυτές. Στο σχήμα 1.4 παρουσιάζεται το θερμοκρασιακό πεδίο. Και τα δύο σχήματα προκύπτουν από αποτελέσματα της επίλυσης του ίδιου πεδίου ροής σε κλειστή κοιλότητα με κινούμενο άνω κάλυμμα. Στο κάλυμμα αυτό που αποτελεί και το πάνω τοίχωμα του χωρίου, εφαρμόστηκε ταχύτητα 0.15m/s και θερμοκρασία 300K . Στο κάτω όριο εφαρμόστηκε θερμοκρασία 700K . Επίσης στα πλαϊνά τοιχώματα εφαρμόστηκε αδιαβατική συνθήκη.

2. Περιγραφή του πρωτεύοντος προβλήματος

2.1. Καταστατικές εξισώσεις πρωτεύοντος προβλήματος -ιδιότητες της ροής

Οι καταστατικές εξισώσεις οι οποίες διέπουν το πρωτεύον πρόβλημα είναι οι εξισώσεις Navier-Stokes για μόνιμη, στρωτή ροή ασυμπίεστου ρευστού, συμπεριλαμβανομένης και της ενεργειακής εξίσωσης,

$$R^p = -\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (23)$$

$$R_i^v = v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad (24)$$

$$R^T = c_p v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} - c_p \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (25)$$

όπου v_j οι καρτεσιανές συντεταγμένες της ταχύτητας, p η στατική πίεση, T η θερμοκρασία, ν η κινηματική συνεκτικότητα, c_p η ειδική θερμοχωρητικότητα και Pr ο αριθμός Prandtl. Η εξίσωση 23 είναι η εξίσωση συνέχειας, η 24 είναι οι εξισώσεις ορμής και η 25 είναι η ενεργειακή εξίσωση η οποία διέπει τη μεταφορά θερμότητας στο πρωτεύον πρόβλημα.

Οι τιμές των σταθερών ν , c_p , Pr και της πυκνότητας ρ για όλα τα προβλήματα που θα μελετηθούν παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.

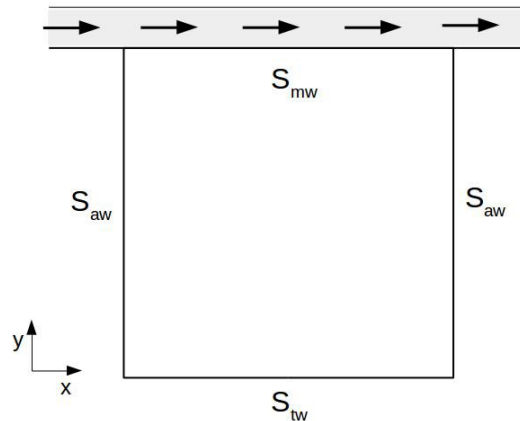
$\rho \left(\frac{kg}{m^3} \right)$	$\nu \left(\frac{m^2}{s} \right)$	$c_p \left(\frac{J}{kg K} \right)$	Pr
1	1.511×10^{-5}	1004.5	0.7

Πίνακας 2: Οι ιδιότητες του ρευστού.

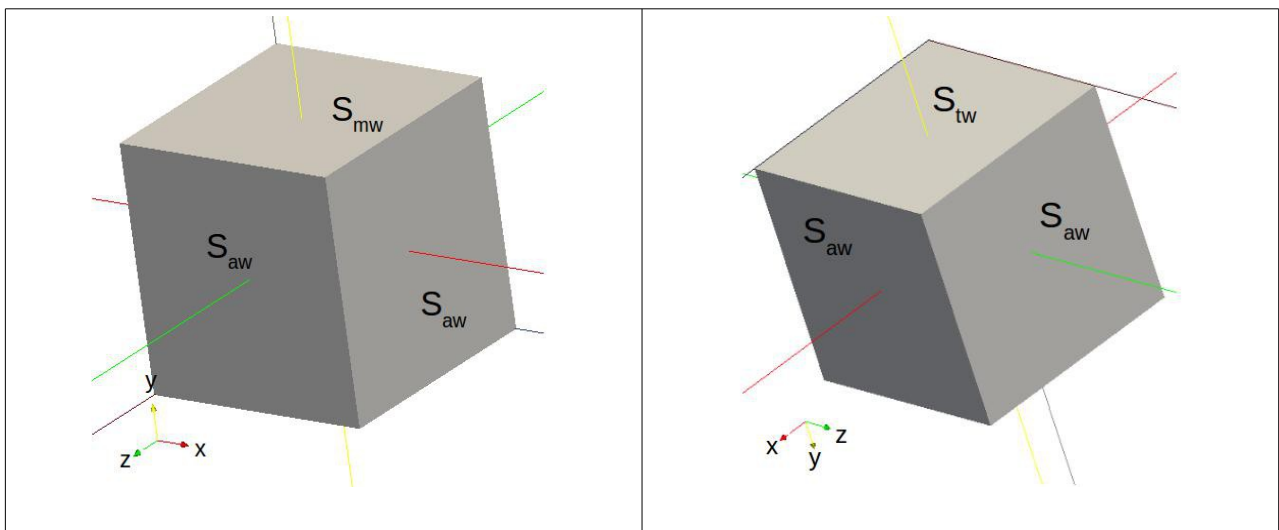
2.2. Γεωμετρία και οι Οριακές συνθήκες του πρωτεύοντος προβλήματος

Παρακάτω ακολουθούν τα σχήματα 2.1, 2.2 και 2.3, για τις τρεις περιπτώσεις του συγκεκριμένου τύπου γεωμετρίας, οι οποίες μελετήθηκαν σε αυτήν την εργασία. Στα σχήματα υποδεικνύονται τα

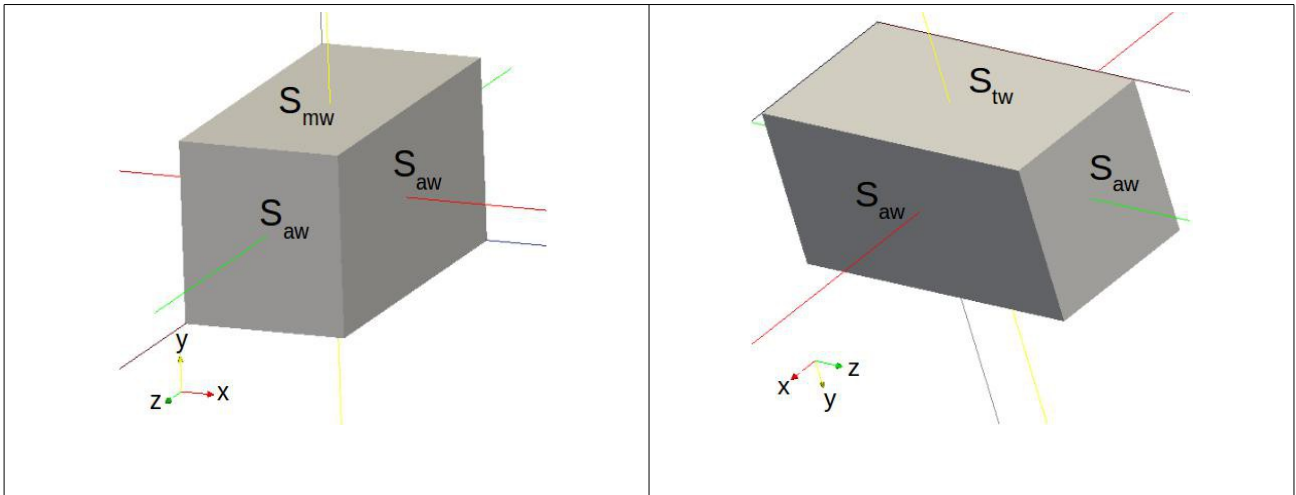
όρια $S_{mw} \cup S_{aw} \cup S_{tw} = S$ του προβλήματος.



Σχήμα 2.1: Παρουσιάζεται η 1^η περίπτωση γεωμετρίας, η οποία είναι για διδιάστατη (2D) ροή. Το χωρίο στο οποίο λαμβάνει μέρος η ροή του ρευστού πλαισιώνεται από ένα τετράγωνο πλευράς $d=0.1\text{m}$. Επίσης παρουσιάζονται τα όρια με τους συμβολισμούς τους, όπου με S_{mw} συμβολίζεται το όριο της πάνω πλευράς (moving wall), με S_{tw} το όριο της κάτω πλευράς (thermal wall) και με S_{aw} τα όρια των δύο πλαϊνών πλευρών (adiabatic walls). Σημειώνεται ότι η πάνω πλευρά κινείται με σταθερή γραμμική ταχύτητα.



Σχήμα 2.2: Παρουσιάζεται η 2^η περίπτωση γεωμετρίας, η οποία είναι για τριδιάστατη ροή (3D). Το χωρίο στο οποίο λαμβάνει μέρος η ροή του ρευστού πλαισιώνεται από μια επιφάνεια κύβου πλευράς $d=0.1\text{m}$.



Σχήμα 2.3: Παρουσιάζεται η 3^η περίπτωση γεωμετρίας, η οποία είναι επίσης για τριδιάστατη (3D) ροή. Το χωρίο στο οποίο λαμβάνει μέρος η ροή του ρευστού πλαισιώνεται από μια επιφάνεια ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου με πλευρές $(d_x, d_y, d_z) = (0.1, 0.1, 0.2) m$.

Οι οριακές συνθήκες του πρωτεύοντος προβλήματος παρουσιάζονται συνοπτικά στον Πίνακα 3.

	$p \left(\frac{kg}{m s^2} \right)$	$v_j \left(\frac{m}{s} \right)$	$T (K)$
S_{mw}	$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$	$(b_1, 0, b_2)$	300
S_{aw}	$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$	$(0, 0, 0)$	$\frac{\partial T}{\partial n} = 0$
S_{tw}	$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$	$(0, 0, 0)$	700

Πίνακας 3: Οι οριακές συνθήκες του πρωτεύοντος προβλήματος. Με b_1 και b_2 συμβολίζονται οι δύο μεταβλητές σχεδιασμού.

Στο όριο S_{mw} του κινούμενου τοιχώματος (moving wall) ισχύει η συνθήκη μη-εισχώρησης του ρευστού, εδώ, οι συνιστώσες της ταχύτητας κατά τον x_1 και x_3 άξονα είναι μη-μηδενικές, $(v_1 \neq 0, v_3 \neq 0)$ και αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος βελτιστοποίησης $(v_1, v_3) \equiv (b_1, b_2)$. Στα όρια S_{aw} και S_{tw} επιβάλλεται συνθήκη μη-ολίσθησης του ρευστού. Ως αποτέλεσμα, του συγκεκριμένου καθορισμού των συνιστωσών της ταχύτητας στα όρια, είναι η ανακυκλοφορία του ρευστού μέσα στο χωρίο η οποία προκαλείται από την κίνηση του S_{mw} . Βέβαια, για την κίνηση της πάνω πλευράς, S_{mw} , καταναλώνεται ισχύς, $W(w)$, η οποία είναι

ανάλογη του μέτρου της ταχύτητας $U\left(\frac{m}{s}\right)$ και ανάλογη της δύναμης $L(N)$ η οποία ασκείται στο κινούμενο τοίχωμα.

Στο όριο S_{mw} επιβάλλεται σταθερή τιμή θερμοκρασίας αλλά μικρότερη από την τιμή της θερμοκρασίας η οποία επιβάλλεται στο όριο S_{tw} του θερμού τοιχώματος (thermal wall). Επίσης στα όρια των αδιαβατικών τοιχωμάτων (adiabatic walls) επιβάλλεται μηδενική συνθήκη τύπου Neumann για τη θερμοκρασία, έτσι ώστε να μην υπάρχει ροή θερμότητας ως προς αυτά, $Q(w)=0$. Οπότε, η θερμοκρασιακή διαφορά, μεταξύ S_{mw} και του S_{tw} , προκαλεί ροή θερμότητας η οποία εισέρχεται μέσω του ορίου S_{tw} στο χωρίο και εξέρχεται από αυτό μέσω του S_{mw} .

Επίσης, οι οριακές συνθήκες του πρωτεύοντος προβλήματος είναι κοινές και για τις τρεις περιπτώσεις γεωμετρίας. Προφανώς, στην 1^η περίπτωση, όπου η ροή είναι διδιάστατη (2D), αναιρείται η τρίτη συνιστώσα της ταχύτητας, u_3 . Οπότε στο πρόβλημα βελτιστοποίησης για την 1^η περίπτωση, η μεταβλητή σχεδιασμού είναι μόνο η συνιστώσα της ταχύτητας κατα τον x_1 -άξονα που επιβλήθηκε στο όριο S_{mw} , $b \equiv u_{1,mw}$.

3. Ορισμός της αντικειμενικής συνάρτησης

Ως αντικειμενική συνάρτηση προς μεγιστοποίηση ορίζεται η

$$F = Q - \lambda W \quad (26)$$

όπου Q είναι η ροή θερμότητας, η οποία αποβάλλεται από το σύστημα μέσω του κινούμενου τοιχώματος (moving wall) και η οποία δίνεται από τη σχέση

$$Q = \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i dS \quad (27)$$

όπου n_i είναι οι καρτεσιανές συνιστώσες του μοναδιαίου κάθετου διανύσματος στην επιφάνεια. Το κινούμενο τοίχωμα είναι κάθετο στον άξονα x_2 , οπότε για το όριο S_{mw} ισχύει ότι $n_i = (0, 1, 0)$. Άρα η ροή θερμότητας Q υπολογίζεται από την εξής σχέση

$$Q = \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T}{\partial x_2} dS \quad (28)$$

Με W συμβολίζεται η ισχύς η οποία καταναλώνεται για την κίνηση του κινούμενου τοιχώματος. Γενικά για τον υπολογισμό της ισχύος W ισχύει

$$W = v_j L_j \quad (29)$$

όπου το L_j συμβολίζει τις καρτεσιανές συντεταγμένες της δύναμης η οποία ασκείται στο κινούμενο τοίχωμα. Η δύναμη L_j είναι ίση και αντίθετη με τη δύναμη της τριβής η οποία αναπτύσσεται μεταξύ του κινούμενου τοιχώματος και του ρευστού εξαιτίας των διατμητικών τάσεων. Οπότε, η L_j ορίζεται ως το ολοκλήρωμα του πεδίου των διατμητικών τάσεων στο όριο S_{mw} σύμφωνα με τη σχέση

$$L_j = \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_j}{\partial x_i} n_i dS \quad (30)$$

Άρα, η έκφραση ορισμού της ισχύος είναι

$$W = \int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} n_i dS \quad (31)$$

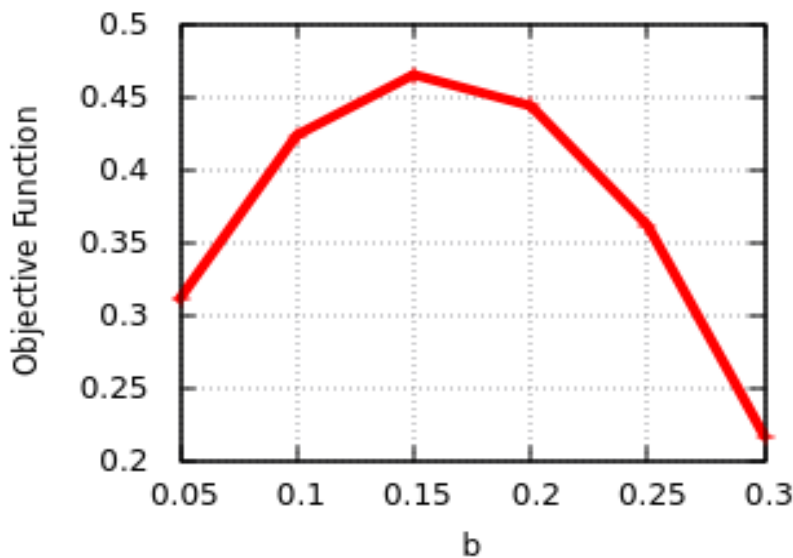
Στο όριο S_{mw} , για την κάθετη συνιστώσα της ταχύτητας ισχύει ότι $u_2 = 0$ και λαμβάνοντας υπόψη ότι $n_i = (0, 1, 0)$, η σχέση υπολογισμού της ισχύος W για τα προβλήματα τριδιάστατης ροής είναι

$$W = \int_{S_{mv}} \rho v u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dS + \int_{S_{mv}} \rho v u_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_2} dS \quad (32)$$

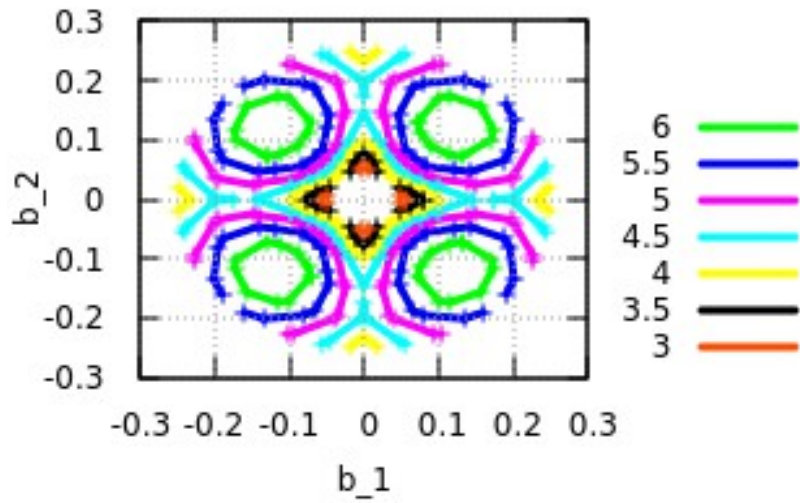
όπου στο πρόβλημα της διδιάστατης ροής παραλείπεται ο όρος που περιέχει την u_3 .

Επίσης, στη σχέση ορισμού της αντικειμενικής συνάρτησης, ο συντελεστής λ καθορίζει την σχετική βαρύτητα μεταξύ των δύο επιμέρους στόχων, οι οποίοι είναι η μεγιστοποίηση της ροής θερμότητας Q και η ελαχιστοποίηση της καταναλωμένης ισχύος W . Η τιμή του συντελεστή λ και στις τρεις περιπτώσεις γεωμετρίας, ισούται με 10^6 .

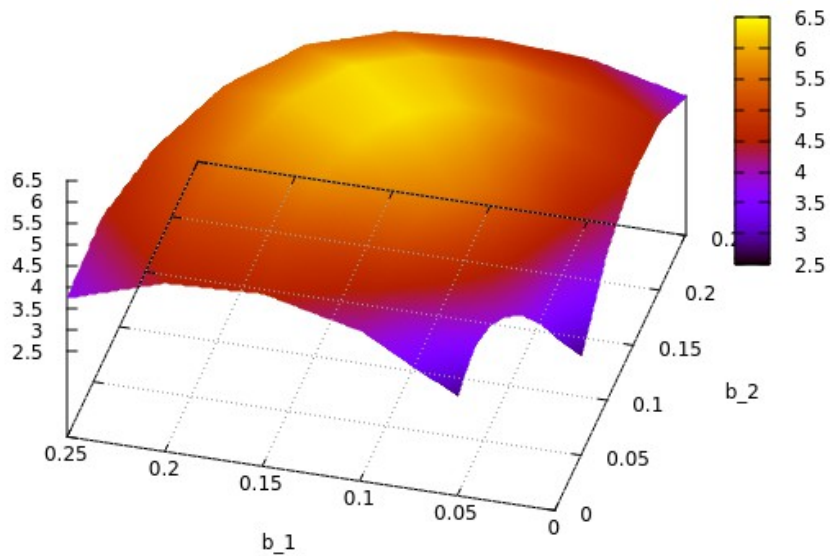
Στα σχήματα που ακολουθούν, για κάθε πρόβλημα, παρουσιάζεται η συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Τα συγκεκριμένα σχήματα προέκυψαν από δειγματοληψία μικρού αριθμού ισαπέχοντων σημείων. Οπότε τα σχήματα δεν αναπαριστούν με ακρίβεια την αντικειμενική συνάρτηση, παρόλα αυτά δίνουν μια εικόνα της ύπαρξης και της θέσης των ακροτάτων. Στη δεύτερη και τρίτη γεωμετρία, η δειγματοληψία έγινε στο πρώτο τεταρτημόριο του πεδίου τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού αφού, εξαιτίας της συμμετρίας, τα ίδια αποτελέσματα ισχύουν και στα υπόλοιπα τεταρτημόρια.



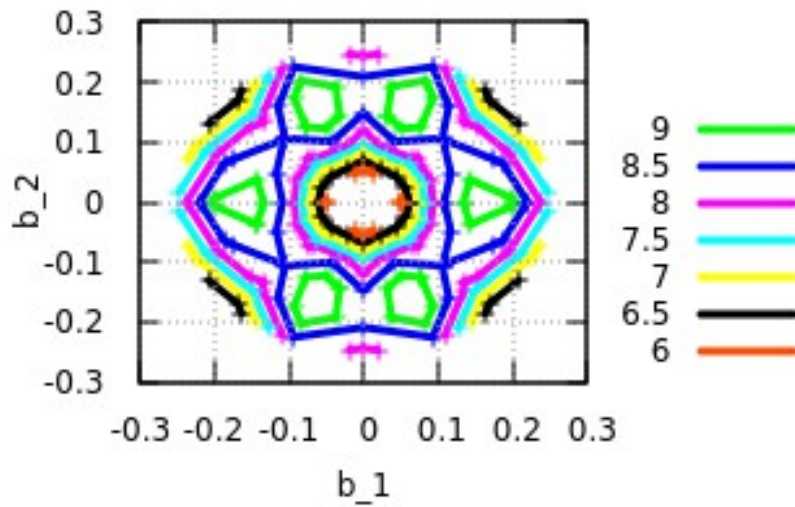
Σχήμα 3.1: Για την 1^η περίπτωση παρουσιάζονται οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τη μεταβλητή σχεδιασμού, όπου όπως προαναφέρθηκε είναι η συνιστώσα της ταχύτητας κατά τον x_1 -άξονα στο όριο S_{mv} . Παρατηρείται η ύπαρξη καθολικού ακρότατου (μέγιστου), το οποίο και θα αναζητηθεί με χρήση αιτιοκρατικής μεθόδου και της συνεχούς συζυγούς μεθόδου.



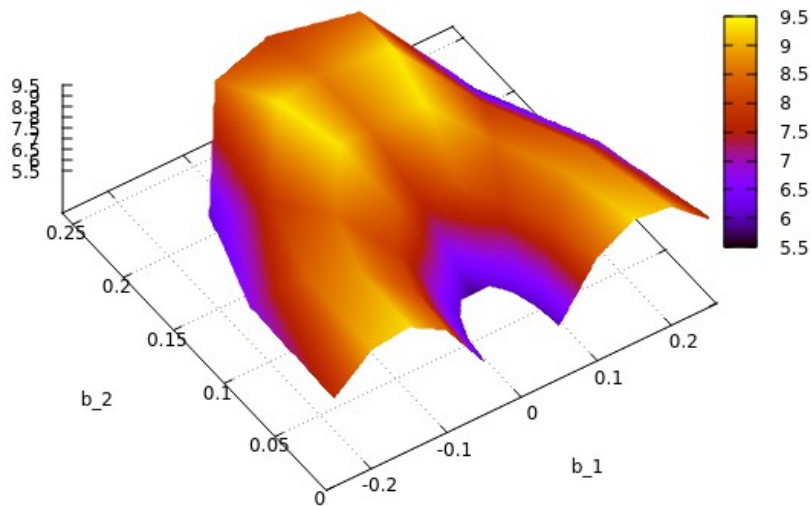
Σχήμα 3.2: Για την 2^η περίπτωση, με το κυβικό χωρίο ροής, παρουσιάζονται οι ισοσταθμικές καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Παρατηρείται η ύπαρξη τεσσάρων ακροτάτων, τα οποία είναι ισοδύναμα εξαιτίας της συμμετρίας του τετραγωνικού σχήματος του ορίου S_{mw} ως προς τους άξονες x_1 και x_3 .



Σχήμα 3.3: Για τη 2^η περίπτωση, με το κυβικό χωρίο ροής, η αντικειμενική συνάρτηση ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού στο πρώτο τεταρτημόριο.



Σχήμα 3.4: Ισοσταθμικές καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού για την 3^η περίπτωση για χωρίο μορφής ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου. Παρατηρείται η ύπαρξη έξι τοπικών ακροτάτων. Το δεξιό και το αριστερό είναι ισοδύναμα μεταξύ τους, επίσης ισοδύναμα μεταξύ τους είναι και τα τέσσερα κεντρικά τοπικά ακρότατα. Η ισοδυναμία προκύπτει εξαιτίας της συμμετρίας του ορθογώνιου σχήματος του ορίου S_{mw} ως προς τους άξονες x_1 και x_3 .



Σχήμα 3.5: Στην 3^η περίπτωση, για χωρίο ροής μορφής επιφάνειας ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου, η αντικειμενική συνάρτηση ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, στο πρώτο και στο δεύτερο τεταρτημόριο.

4. Μαθηματική διατύπωση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου

4.1. Εισαγωγή

Ως επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση ορίζεται:

$$F_{aug} = F + \int_{\Omega} q R^p d\Omega + \int_{\Omega} u_i R_i^v d\Omega + \int_{\Omega} T^a R^T d\Omega \quad (33)$$

όπου q , u_i και T^a είναι οι αντίστοιχες συζυγείς μεταβλητές των μεταβλητών του πρωτεύοντος προβλήματος p , v_i και T . Με Ω συμβολίζεται το χωρίο ροής.

Με το σύμβολο $\frac{\delta}{\delta b_n}$, συμβολίζεται η ολική παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

Γενικά, η τιμή κάθε μεταβλητής του πρωτεύοντος προβλήματος Φ εξαρτάται από τις μεταβλητές σχεδιασμού b_n και από το πεδίο των συντεταγμένων x_k , το οποίο με την σειρά του κατά περίπτωση μπορεί να εξαρτάται επίσης από τις μεταβλητές σχεδιασμού, οπότε $\Phi = \Phi(b_n, x_k(b_n))$. Έτσι, για την έκφραση της ολικής παραγώγου σύμφωνα με τον κανόνα της αλυσίδας ισχύει:

$$\frac{\delta \Phi}{\delta b_n} = \frac{\partial \Phi}{\partial b_n} + \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} \quad (34)$$

Με τη διαφορίση της επαυξημένης συνάρτησης στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = & \frac{\delta F}{\delta b_n} + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\delta q}{\delta b_n} R^p d\Omega}_{I1} + \int_{\Omega} q \frac{\delta R^p}{\delta b_n} d\Omega + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\delta u_i}{\delta b_n} R_i^v d\Omega}_{I2} + \int_{\Omega} u_i \frac{\delta R_i^v}{\delta b_n} d\Omega \\ & + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\delta T^a}{\delta b_n} R^T d\Omega}_{I3} + \int_{\Omega} T^a \frac{\delta R^T}{\delta b_n} d\Omega + \underbrace{\int_{\Omega} (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \frac{\delta(d\Omega)}{\delta b_n}}_{I4} \end{aligned} \quad (35)$$

Για τη διαφορίση του στοιχειώδη όγκου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού $\frac{\delta(d\Omega)}{\delta b_n}$, στην διδακτορική διατριβή του Δ. Παπαδημητρίου [27], αποδείχθηκε η σχέση

$$\frac{\delta(d\Omega)}{\delta b_n} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) d\Omega \quad (36)$$

Με αυτήν, το τελευταίο ολοκλήρωμα, $I4$, της σχέσης 35 γράφεται ως

$$I4 = \int_{\Omega} (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \frac{\delta(d\Omega)}{\delta b_n} = \int_{\Omega} (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) d\Omega$$

Εκτελώντας παραγοντική ολοκλήρωση προκύπτει:

$$I4 = \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_k} \left((qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) \right) d\Omega}_{I41} - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T)}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega}_{I42}$$

όπου το ολοκλήρωμα $I42$ απαλείφεται μιάς και $R^p = R_i^u = R^T = 0$. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Green, το $I41$ μετατρέπεται από χωρικό σε επιφανειακό ολοκλήρωμα. Οπότε:

$$I4 = \int_S (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS$$

Εδώ, η συζυγής μαθηματική διατύπωση αφορά περιπτώσεις προβλημάτων βελτιστοποίησης των οποίων το χωρίο, άρα και το πλέγμα, είναι ανεξάρτητο των μεταβλητών σχεδιασμού. Άρα ισχύει ότι

$$\frac{\delta x_k}{\delta b_n} = 0. \text{ Οπότε το ολοκλήρωμα } I4 \text{ μηδενίζεται.}$$

$$I4 = \int_S (qR^p + u_i R_i^v + T^a R^T) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS = 0 \quad (37)$$

Κατ' επέκταση, από το ότι $\frac{\delta x_k}{\delta b_n} = 0$, και σύμφωνα με τη σχέση 34, συμπεραίνεται ότι η ολική και η μερική παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού ταυτίζονται, άρα

$$\frac{\delta \Phi}{\delta b_n} \equiv \frac{\partial \Phi}{\partial b_n} \quad (38)$$

Επίσης τα ολοκληρώματα $I1$, $I2$ και $I3$ της σχέσης 35 μηδενίζονται εξαιτίας του ότι $R^p = R_i^u = R^T = 0$.

$$I1 = \int_{\Omega} \frac{\delta q}{\delta b_n} R^p d\Omega = 0 \quad , \quad I2 = \int_{\Omega} \frac{\delta u_i}{\delta b_n} R_i^v d\Omega = 0 \quad , \quad I3 = \int_{\Omega} \frac{\delta T^a}{\delta b_n} R^T d\Omega = 0 \quad (39)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις εξισώσεις 35, 37, 38 και 39, η έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας παίρνει τη μορφή

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = \frac{\partial F}{\partial b_n} + \underbrace{\int_{\Omega} q \frac{\partial R^p}{\partial b_n} d\Omega}_{T1} + \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega}_{T2} + \underbrace{\int_{\Omega} T^a \frac{\partial R^T}{\partial b_n} d\Omega}_{T3} \quad (40)$$

Στη συνέχεια, ακολουθεί η ανάπτυξη των ολοκληρωμάτων $T1$, $T2$ και $T3$ τα οποία εμφανίζονται στη σχέση 40.

Για την ανάπτυξη του ολοκληρώματος $T1$ προηγείται η διαφορίση της εξίσωσης συνέχειας της ροής, η οποία παρουσιάζεται σχέση 23, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

$$\frac{\partial R^p}{\partial b_n} = \frac{\partial}{\partial b_n} \left(-\frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right)$$

Εξαιτίας του ότι το χωρικό πεδίο είναι ανεξάρτητο των μεταβλητών σχεδιασμού, $\frac{\delta x_k}{\delta b_n} = 0$, όπως έχει προαναφερθεί, ισχύει:

$$\frac{\partial}{\partial b_n} (LU) = L \left(\frac{\partial U}{\partial b_n} \right) \quad (41)$$

όπου L οποιοσδήποτε τελεστής ο οποίος εκφράζει διαφορίση ως προς τις χωρικές συντεταγμένες και U οποιαδήποτε μεταβλητή του πρωτεύοντος προβλήματος. Δηλαδή, σύμφωνα με τη σχέση 41, δεν υπάρχει σειρά προτεραιότητας ως προς το ποιός διαφορικός τελεστής θα εφαρμόζεται πρώτος. Το τελευταίο θα χρησιμοποιηθεί αρκετές φορές στη συνέχεια.

Οπότε, για τη διαφορίση της εξίσωσης συνέχειας της ροής ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού ισχύει

$$\frac{\partial R^p}{\partial b_n} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \quad (42)$$

Σύμφωνα με τη σχέση 42, το ολοκλήρωμα $T1$ αναπτύσσεται ως

$$T1 = \int_{\Omega} q \frac{\partial R^p}{\partial b_n} d\Omega = \int_{\Omega} q \left(-\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) d\Omega = - \int_{\Omega} q \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) d\Omega$$

Εφαρμόζοντας παραγοντική ολοκλήρωση προκύπτει

$$T1 = - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(q \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T11} + \int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} d\Omega$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Green, το ολοκλήρωμα $T11$ μετατρέπεται από χωρικό σε επιφανειακό και έτσι προκύπτει η τελική έκφραση του ολοκληρώματος $T1$,

$$T1 = - \int_S q \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_i dS + \int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \quad (43)$$

Ομοίως, με την ανάπτυξη του ολοκληρώματος $T1$, έτσι και στην ανάπτυξη του ολοκληρώματος $T2$ προηγείται η διαφορίση των εξισώσεων ορμής, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Αυτή δίνει

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} &= \frac{\partial}{\partial b_n} \left(v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] \right) + \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right) \Rightarrow \\ \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} &= \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial b_n} \right) \end{aligned} \quad (44)$$

Οπότε, σύμφωνα με την σχέση 44, το ολοκλήρωμα $T2$ αναπτύσσεται ως εξής:

$$\begin{aligned} T2 &= \int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} u_i \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial b_n} \right) \right) d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} \left(u_i \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + u_i v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) - u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial b_n} \right) \right) d\Omega \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T2 = & \int_{\Omega} u_i \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega + \underbrace{\int_{\Omega} u_i v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T21} \\
& - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] d\Omega}_{T22} + \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T23}
\end{aligned} \tag{45}$$

Για τα επιμέρους ολοκληρώματα $T21$, $T22$ και $T23$ απαιτείται περαιτέρω ανάπτυξη. Το ολοκλήρωμα $T21$ αναπτύσσεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
T21 &= \int_{\Omega} u_i v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega = \\
& \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial (u_i v_j)}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \Rightarrow \\
T21 &= \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T211} - \underbrace{\int_{\Omega} v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} u_j \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega}_{T212}
\end{aligned}$$

Σύμφωνα με τη σχέση 23, όπου παρουσιάζεται η εξίσωση συνέχειας, το ολοκλήρωμα $T212$ απαλείφεται. Επίσης σύμφωνα με το θεώρημα Green, το ολοκλήρωμα $T211$ μετατρέπεται από χωρικό σε επιφανειακό. Οπότε, η ανάπτυξη του ολοκληρώματος $T21$ καταλήγει ως εξής:

$$T21 = \int_S u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS - \int_{\Omega} v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \tag{46}$$

Το ολοκλήρωμα $T22$, αναπτύσσεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
T22 &= - \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] d\Omega \\
&= - \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) \right] d\Omega \\
&= - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_i \left[v \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) \right] \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) \right] d\Omega \\
&= - \int_S u_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) n_j dS + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) \right] d\Omega}_{T221}
\end{aligned}$$

Το ολοκλήρωμα T_{221} αναπτύσσεται περαιτέρω ως εξής:

$$\begin{aligned}
T_{221} &= \int_{\Omega_F} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) \right) \right] d\Omega \\
&= \int_{\Omega_F} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega + \int_{\Omega_F} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) d\Omega \\
&= \int_{\Omega_F} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega + \int_{\Omega_F} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega \\
&= \int_{\Omega_F} v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega_F} v \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \\
&\quad + \int_{\Omega_F} v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega_F} v \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \\
&= \int_{S_F} v \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS - \int_{\Omega_F} v \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \\
&\quad + \int_{S_F} v \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS - \int_{\Omega_F} v \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \Rightarrow \\
T_{221} &= \int_S v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega
\end{aligned} \tag{47}$$

Έτσι, η τελική έκφραση του ολοκληρώματος T_{22} είναι η

$$\begin{aligned}
T_{22} &= - \int_S u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_S v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS \\
&\quad - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega
\end{aligned} \tag{48}$$

Το ολοκλήρωμα T_{23} αναπτύσσεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
T_{23} &= \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial b_n} \right) d\Omega \Rightarrow \\
T_{23} &= \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T_{231}} - \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial b_n} d\Omega
\end{aligned}$$

όπου το ολοκλήρωμα T_{231} μετατρέπεται από χωρικό σε επιφανειακό και οπότε έτσι προκύπτει η

τελική έκφραση

$$T23 = \int_s u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS - \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial b_n} d\Omega \quad (49)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις 45, 47, 48 και 49, η τελική έκφραση του ολοκληρώματος T2 διαμορφώνεται ως εξής:

$$\begin{aligned} T2 = & \int_{\Omega} u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} d\Omega + \int_s u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS \\ & - \int_{\Omega} v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega - \int_s u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_s v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS \\ & - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_s u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS - \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial b_n} d\Omega \end{aligned} \quad (50)$$

Διαφορίζοντας την ενεργειακή εξίσωση ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^T}{\partial b_n} &= \frac{\partial}{\partial b_n} \left(c_p v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] \right) \Rightarrow \\ \frac{\partial R^T}{\partial b_n} &= c_p \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial T}{\partial x_j} + c_p v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) - \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) \right] \end{aligned} \quad (51)$$

Μέσω αυτής, το ολοκλήρωμα $T3 = \int_{\Omega} T^a \frac{\partial R^T}{\partial b_n} d\Omega$ αναπτύσσεται ως

$$T3 = \int_{\Omega} c_p T^a \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial T}{\partial x_j} d\Omega + \underbrace{\int_{\Omega} c_p T^a v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{T31} - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) \right] d\Omega}_{T32} \quad (52)$$

Στη συνέχεια, αναπτύσσονται τα ολοκληρώματα T31 και T32 :

$$\begin{aligned} T31 &= \int_{\Omega} c_p T^a v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} c_p \frac{\partial}{\partial x_j} \left(T^a v_j \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega} c_p \frac{\partial (T^a v_j)}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \\ &= \int_s c_p T^a v_j \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_{\Omega} c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega - \underbrace{\int_{\Omega} c_p T^a \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega}_{T311} \end{aligned}$$

Σύμφωνα με την εξίσωση συνέχειας της ροής, στη σχέση 23, το ολοκλήρωμα $T31$ απαλείφεται και έτσι προκύπτει η τελική ανάπτυξη του ολοκληρώματος $T31$,

$$T31 = \int_S c_p T^a v_j \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \quad (53)$$

Στη συνέχεια, το ολοκλήρωμα $T32$ αναπτύσσεται ως

$$\begin{aligned} T32 &= - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) \right] d\Omega \\ &= - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[T^a v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) \right] d\Omega + \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) d\Omega \\ &= - \int_S \frac{c_p}{Pr} T^a v \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS + \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} \right] d\Omega - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T}{\partial b_n} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) d\Omega = \\ T32 &= - \int_S \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS + \int_S \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \end{aligned} \quad (54)$$

Άρα, η τελική έκφραση του ολοκληρώματος $T3$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} T3 &= \int_\Omega c_p T^a \frac{\partial v_j}{\partial b_n} \frac{\partial T}{\partial x_j} d\Omega + \int_S c_p T^a v_j \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \\ &\quad - \int_S \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS + \int_S \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \end{aligned} \quad (55)$$

Οπότε η έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας $\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n}$, όπως αυτή αναπτύχθηκε μέχρι στιγμής και χωρίς να έχει γίνει αντικατάσταση της αντικειμενικής συνάρτησης και της παραγώγου της, παρουσιάζεται στην επόμενη σχέση:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = & \frac{\partial F}{\partial b_n} - \int_s q \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_i dS + \int_\Omega \frac{\partial q}{\partial x_i} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_\Omega u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} d\Omega + \int_s u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS \\
& - \int_\Omega v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega - \int_s u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_s v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS \\
& - \int_\Omega \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_s u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS - \int_\Omega \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\partial p}{\partial b_n} d\Omega \\
& + \int_\Omega c_p T^a \frac{\partial T}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} d\Omega + \int_s c_p T^a v_j \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega \\
& - \int_s \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS + \int_s \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial b_n} n_j dS - \int_\Omega \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega
\end{aligned} \tag{56}$$

Στη συνέχεια, συγχωνεύονται τα χωρικά και επιφανειακά ολοκληρώματα της έκφρασης των παραγώγων ευαισθησίας. Η συγχώνευση γίνεται σύμφωνα με ποιο υπολογιστικά ακριβό όρο περιέχουν από τους εξής $\left(\frac{\partial u_i}{\partial b_n}, \frac{\partial p}{\partial b_n}, \frac{\partial T}{\partial b_n} \right)$, οι οποίοι είναι οι παράγωγοι των μεταβλητών κατάστασης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = & \frac{\partial F}{\partial b_n} + \int_s \left(-qn_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS \\
& - \int_s u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_s u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS \\
& + \int_s \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS - \int_s \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS \\
& + \underbrace{\int_\Omega \left(-\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial p}{\partial b_n} d\Omega}_{I_{FAE,R^a}} \\
& + \underbrace{\int_\Omega \left(\frac{\partial q}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + c_p T^a \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega}_{I_{FAE,R^b}} \\
& + \underbrace{\int_\Omega \left(-c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} - \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} d\Omega}_{I_{FAE,R^c}}
\end{aligned} \tag{57}$$

4.2. Διατύπωση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων

Η διατύπωση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων και των αντίστοιχων οριακών συνθηκών, είναι η απαλοιφή των ολοκληρωμάτων, τα οποία για να υπολογιστούν απαιτούν διαφορίση των μεταβλητών του πρωτεύοντος προβλήματος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Με αυτόν τον τρόπο, τα συγκεκριμένα ολοκληρώματα δεν συμμετέχουν στον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας $\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n}$.

Συγκεκριμένα η διατύπωση των συζυγών εξισώσεων γίνεται με την απαλοιφή των χωρικών ολοκληρωμάτων. Επίσης λαμβάνοντας υπόψη ότι η αντικειμενική συνάρτηση, εξ ορισμού δεν περιέχει χωρικά ολοκληρώματα, τότε μπορεί να γίνει σε αυτό το σημείο της διατύπωσης η εξαγωγή των συζυγών εξισώσεων. Οπότε, στη συνέχεια απαλοΐφονται τα χωρικά ολοκληρώματα I_{FAE,R^q} , I_{FAE,R^u} και I_{FAE,R^T} της σχέσης 57, μηδενίζοντας τους όρους ή τα αθροίσματα των όρων που περιέχονται σε αυτά. Οπότε έτσι προκύπτει το σύστημα των πεδιακών συζυγών εξισώσεων, Π.Σ.Ε. (field adjoint equations, F.A.E.):

$$\begin{aligned} R^p &= -\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \\ R_i^u &= \frac{\partial q}{\partial x_i} + u_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - v_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + c_p T^a \frac{\partial T}{\partial x_i} = 0 \\ R^{T^a} &= -c_p v_j \frac{\partial T^a}{\partial x_j} - \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} \right) = 0 \end{aligned} \quad (58)$$

Εφόσον έχουν απαλειφθεί τα χωρικά ολοκληρώματα που περιείχε η έκφραση υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας, η τελευταία παίρνει την εξής μορφή:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} &= \frac{\partial F}{\partial b_n} + \int_S \left(-q n_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS \\ &\quad - \int_S u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_S u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS \\ &\quad + \int_S \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS - \int_S \frac{c_p}{Pr} T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS \end{aligned} \quad (59)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 26, 27 και 31, οι οποίες παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 3, η έκφραση της αντικειμενικής συνάρτησης F γράφεται εκ νέου ως:

$$F = \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i dS - \lambda \int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} n_i dS \quad (60)$$

Με τη διαφορίση της αντικειμενικής συνάρτησης προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta b_n} \equiv \frac{\partial F}{\partial b_n} &= \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS - \lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} n_i dS \\ &\quad - \lambda \int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) n_i dS \end{aligned} \quad (61)$$

Τα ολοκληρώματα που προέκυψαν από τη διαφορίση της αντικειμενικής συνάρτησης, αφορούν μόνο το όριο S_{mw} . Ενσωματώνοντας τα στην έκφραση υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} &= \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS - \lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} n_i dS \\ &\quad - \lambda \int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) n_i dS + \int_S \left(-q n_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS \\ &\quad - \int_S u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS + \int_S u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS \\ &\quad + \int_S \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS - \int_S \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS \end{aligned} \quad (62)$$

Εφόσον για το όριο S ισχύει ότι $S = S_{mw} \cup S_{aw} \cup S_{tw}$, η έκφραση υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας παρουσιάζεται εκ νέου ως

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = & \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS}_{I01} - \lambda \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} n_i dS}_{I02} \\
& - \lambda \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) n_i dS}_{I03} + \underbrace{\int_{S_{mw}} \left(-qn_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS}_{I04} \\
& + \underbrace{\int_{S_{aw}} \left(-qn_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS}_{I05} + \underbrace{\int_{S_{tw}} \left(-qn_i + u_i v_j n_j + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS}_{I06} \\
& - \underbrace{\int_{S_{mw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I07} - \underbrace{\int_{S_{aw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I08} \\
& - \underbrace{\int_{S_{tw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I09} + \underbrace{\int_{S_{mw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I10} + \underbrace{\int_{S_{aw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I11} + \underbrace{\int_{S_{tw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I12} \\
& + \underbrace{\int_{S_{mw}} \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS}_{I13} + \underbrace{\int_{S_{aw}} \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS}_{I14} \\
& + \underbrace{\int_{S_{tw}} \left(c_p T^a v_j n_j + \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial T}{\partial b_n} dS}_{I15} \\
& - \underbrace{\int_{S_{mw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS}_{I16} - \underbrace{\int_{S_{aw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS}_{I17} - \underbrace{\int_{S_{tw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS}_{I18}
\end{aligned} \tag{63}$$

Στη συνέχεια, απαλείφονται τα ολοκληρώματα τα οποία μηδενίζονται εξαιτίας των οριακών συνθηκών του πρωτεύοντος προβλήματος.

Στα όρια S_{aw} και S_{tw} ισχύει ότι $\frac{\partial v_i}{\partial b_n} = 0$ εφόσον οι τιμές των συνιστωσών της ταχύτητας έχουν σταθερές τιμές εξαιτίας της συνθήκης της μη-ολίσθησης του ρευστού, $v_i = 0$. Οπότε, τα ολοκληρώματα $I05$ και $I06$ της σχέσης 63 απαλείφονται.

Επίσης, σταθερές είναι και οι τιμές της θερμοκρασίας T στα όρια S_{mw} και S_{tw} , άρα $\frac{\partial T}{\partial b_n} = 0$ και οπότε τα ολοκληρώματα $I13$ και $I15$ απαλείφονται.

Το ολοκλήρωμα $I17 = - \int_{S_{aw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS$, εξαιτίας της σχέσης 41, μπορεί να γραφεί εκ

νέου ως $I17 = - \int_{S_{aw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right) n_j dS$. Στο όριο S_{aw} έχει επιβληθεί μηδενική συνθήκη

τύπου Neumann, άρα ισχύει ότι $\frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0$, οπότε το ολοκλήρωμα $I17$ απαλείφεται.

Επιπρόσθετα, εξαιτίας της συνθήκης της μη-εισχώρησης του ρευστού, $v_j n_j = 0$, στα στερεά τοιχώματα, απαλείφεται ο όρος $u_i v_j n_j$ από το ολοκλήρωμα $I04$ και ο όρος $c_p T^a v_j n_j$ από το ολοκλήρωμα $I14$.

Οπότε, η έκφραση υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας αποτελείται με τους εναπομείναντες όρους:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = & \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS}_{I01} - \lambda \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} n_i dS}_{I02} \\
& - \lambda \underbrace{\int_{S_{mw}} \rho v v_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) n_i dS}_{I03} + \underbrace{\int_{S_{mw}} \left(-q n_i + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS}_{I04} \\
& - \underbrace{\int_{S_{mw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I07} - \underbrace{\int_{S_{aw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I08} \\
& - \underbrace{\int_{S_{tw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS}_{I09} + \underbrace{\int_{S_{mw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I10} + \underbrace{\int_{S_{aw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I11} + \underbrace{\int_{S_{tw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS}_{I12} \\
& + \underbrace{\int_{S_{aw}} \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \frac{\partial T}{\partial b_n} dS}_{I14} \\
& - \underbrace{\int_{S_{mw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS}_{I16} - \underbrace{\int_{S_{tw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS}_{I18}
\end{aligned} \tag{64}$$

4.3. Συζυγείς οριακές συνθήκες

Αρχικά, από τη συγχώνευση των ολοκληρωμάτων $I01$ και $I16$ προκύπτει

$$\begin{aligned}
 I01+I16 &= \int_{S_{mw}} \rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS - \int_{S_{mw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS \\
 &= \int_{S_{mw}} \left(\rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i - \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j \right) dS \\
 &= \int_{S_{mw}} \left(\rho \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i - \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i \right) dS \\
 &= \int_{S_{mw}} (\rho - T^a) \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_i dS
 \end{aligned} \tag{65}$$

Θέτοντας $\rho - T^a = 0$, τα ολοκληρώματα $I01$ και $I16$ απαλείφονται και για την τιμή της συζυγούς θερμοκρασίας στο S_{mw} ισχύει $T^a = \rho$.

Το ολοκλήρωμα $I18 = - \int_{S_{tw}} \frac{c_p}{Pr} v T^a \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T}{\partial b_n} \right) n_j dS$ απαλείφεται μηδενίζοντας τη συζυγή θερμοκρασία, $T^a = 0$ στο όριο S_{tw} .

Για την απαλοιφή του ολοκληρώματος $I14 = \int_{S_{aw}} \frac{c_p}{Pr} v \frac{\partial T^a}{\partial x_j} n_j \frac{\partial T}{\partial b_n} dS$, στο όριο S_{aw} τίθεται

μηδενική συνθήκη τύπου Neumann για τη συζυγή θερμοκρασία, $\frac{\partial T^a}{\partial x_j} = 0$.

Οι οριακές συνθήκες για τη συζυγή θερμοκρασία παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.

	S_{aw}	S_{aw}	S_{aw}
T^a	ρ	$\frac{\partial T^a}{\partial n} = 0$	0

Πίνακας 4: Οι οριακές συνθήκες για την συζυγή θερμοκρασία, T^a

Από τη συγχώνευση των ολοκληρωμάτων $I03$ και $I07$ προκύπτει:

$$\begin{aligned}
 I03+I07 &= -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v u_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_j}{\partial b_n} \right) n_i dS - \int_{S_{mw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS \\
 &= - \int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_j \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_i dS - \int_{S_{mw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS
 \end{aligned} \tag{66}$$

στην οποία αντικαθίσταται το μοναδιαίο διάνυσμα επιφάνειας $n_i=(0,1,0)$ για το όριο S_{mw} .

$$I03+I07=-\int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_1 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_2 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_3 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right) dS$$

$$- \int_{S_{mw}} u_1 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) dS - \int_{S_{mw}} u_2 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} u_3 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \right) dS \quad (67)$$

όπου, το όριο S_{mw} είναι κάθετο στον άξονα x_2 και έχει οριστεί σε αυτό ότι $u_2=0$, άρα

$$\frac{\partial v_2}{\partial x_1} = \frac{\partial v_2}{\partial x_3} = 0, \text{ οπότε}$$

$$I03+I07=-\int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_1 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_2 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} \lambda \rho v u_3 \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right) dS$$

$$- \int_{S_{mw}} u_1 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) dS - 2 \int_{S_{mw}} u_2 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} u_3 v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right) dS \quad (68)$$

$$= - \int_{S_{mw}} (\lambda \rho u_1 + u_1) v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) dS - \int_{S_{mw}} (\lambda \rho u_2 + 2u_2) v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right) dS$$

$$- \int_{S_{mw}} (\lambda \rho u_3 + u_3) v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right) dS$$

Θέτοντας $\lambda \rho u_1 + u_1 = 0$, $\lambda \rho u_2 + 2u_2 = 0$ και $\lambda \rho u_3 + u_3 = 0$, τα ολοκληρώματα $I03$ και $I07$ απαλείφονται. Οπότε, για τις συνιστώσες της συζυγούς ταχύτητας στο όριο S_{mw} ισχύει

$$u_j = (-\lambda \rho u_1, 0, -\lambda \rho u_3) \quad (69)$$

Για την απαλοιφή των ολοκληρωμάτων $I08 = - \int_{S_{aw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS$ και

$I09 = - \int_{S_{aw}} u_i v \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j dS$, επιβάλλεται συνθήκη μη-ολίσθησης ($u_i=0$) για τη συζυγή ροή.

Συνοπτικά, παρουσιάζονται οι οριακές συνθήκες για τη συζυγή ταχύτητα στον Πίνακα 5.

	S_{aw}	S_{aw}	S_{aw}
u_j	$(-\lambda \rho u_1, 0, -\lambda \rho u_3) \equiv (-\lambda \rho b_1, 0, -\lambda \rho b_2)$	$(0,0,0)$	$(0,0,0)$

Πίνακας 5: Οι οριακές συνθήκες για τις συνιστώσες της συζυγούς ταχύτητας, u_j .

Επίσης, σύμφωνα με τις οριακές συνθήκες της συζυγούς ταχύτητας οι οποίες έχουν επιβληθεί, προκύπτει ότι, για κάθε όριο, ισχύει η συνθήκη μη-εισχώρησης για τη συζυγή ροή, $u_j n_j = 0$.

Οπότε απαλείφονται τα ολοκληρώματα $I10 = \int_{S_{mw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS$, $I11 = \int_{S_{aw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS$ και

$$I12 = \int_{S_{tw}} u_i \frac{\partial p}{\partial b_n} n_i dS.$$

Για τη συζυγή πίεση (q), όπως και στο πρωτεύον πρόβλημα, επιβάλλεται μηδενική συνθήκη τύπου Neumann, $\frac{\partial q}{\partial n} = 0$.

Οι οριακές συνθήκες για τις συζυγείς μεταβλητές συνοψίζονται στον Πίνακα 6.

	q	u_j	T^a
S_{mw}	$\frac{\partial q}{\partial n} = 0$	$(-\lambda \rho b_1, 0, -\lambda \rho b_2)$	ρ
S_{aw}	$\frac{\partial q}{\partial n} = 0$	$(0, 0, 0)$	$\frac{\partial T^a}{\partial n} = 0$
S_{tw}	$\frac{\partial q}{\partial n} = 0$	$(0, 0, 0)$	0

Πίνακας 6: Οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος.

4.4. Παράγωγοι ευαισθησίας

Η σχέση υπολογισμού των παραγώνων ευαισθησίας όπως αυτή διαμορφώνεται με τα εναπομείναντα ολοκληρώματα από τη σχέση 64, είναι

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} n_j dS + \int_{S_{mw}} \left(-qn_i + v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS \quad (70)$$

Εφόσον στο όριο S_{mw} ισχύει ότι $\frac{\partial v_i}{\partial b_1} = [1, 0, 0]^T$ και $\frac{\partial v_i}{\partial b_2} = [0, 0, 1]^T$ στις περιπτώσεις τριδιάστατης ροής, τότε για κάθε παράγωγο ευαισθησίας ισχύει:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_1} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_1}{\partial x_j} n_j dS + \int_{S_{mw}} \left(-qn_1 + v \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_1} \right) n_j \right) dS \quad (71)$$

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_2} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_3}{\partial x_j} n_j dS + \int_{S_{mw}} \left(-qn_3 + v \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_3} \right) n_j \right) dS \quad (72)$$

Αντικαθιστώντας το μοναδιαίο επιφανειακό διάνυσμα του ορίου S_{mw} , $n_j = [0, 1, 0]^T$, προκύπτει:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_1} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_1}{\partial x_2} dS + \int_{S_{mw}} v \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) dS \quad (73)$$

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_2} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_3}{\partial x_2} dS + \int_{S_{mw}} v \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) dS \quad (74)$$

όπου στο όριο S_{mw} ισχύει ότι $\frac{\partial u_2}{\partial x_1} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = 0$, οπότε οι τελικές εκφράσεις για τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας στις περιπτώσεις τριδιάστατης ροής, είναι:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_1} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_1}{\partial x_2} dS + \int_{S_{mw}} v \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) dS \quad (75)$$

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_2} = -\lambda \int_{S_{mw}} \rho v \frac{\partial v_3}{\partial x_2} dS + \int_{S_{mw}} v \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) dS \quad (76)$$

5. Η επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης

Για τον προγραμματισμό του κώδικα με σκοπό την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης, έγινε η χρήση του ελεύθερου λογισμικού OpenFOAM (Open source Field Operation And Manipulation) [28, 29, 31, 32].

Στο OpenFOAM, υπάρχει η δυνατότητα επίλυσης προβλημάτων από ένα μεγάλο εύρος επιστημονικών περιοχών, όμως εξειδικεύεται σε προβλήματα της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, καθώς σε αυτό υπάρχουν ειδικοί επιλύτες για ένα μεγάλο εύρος ροών. Πέραν από τους επιλύτες υπάρχουν και άλλου είδους εργαλεία τα οποία χρησιμοποιεί ο χρήστης για την προεπεξεργασία ή την μεταεπεξεργασία δεδομένων. Επιπρόσθετα, παρέχεται η δυνατότητα στον χρήστη να επιλέξει από ένα μεγάλο εύρος το σχήμα διακριτοποίησης για κάθε όρο αλλά και τον επιλύτη του κάθε γραμμικού ή γραμμικοποιημένου συστήματος, το οποίο προκύπτει για κάθε διακριτοποιημένη διαφορική εξίσωση. Επίσης, όλα τα εργαλεία που έχουν προαναφερθεί παρέχονται μεν σε μορφή εκτελέσιμων αρχείων αλλά και σε μορφή ανοιχτού κώδικα ο οποίος είναι γραμμένος στη γλώσσα προγραμματισμού C++. Οπότε, ο χρήστης μπορεί να επέμβει στους κώδικες διάφορων εργαλείων και να τα προγραμματίσει όπως ο ίδιος επιθυμεί για τις δικές του ανάγκες.

Η μέθοδος διακριτοποίησης, η οποία χρησιμοποιείται στο λογισμικό OpenFOAM, είναι αυτή των πεπερασμένων όγκων [30], όπου χρησιμοποιούνται οι ολοκληρωματικές μορφές των καταστατικών εξισώσεων. Επίσης χρησιμοποιείται το θεώρημα Gauss για τη διατύπωση των σχημάτων διακριτοποίησης. Για τη συγκεκριμένη μέθοδο, το χωρίο χωρίζεται σε διακριτές περιοχές οι οποίες ορίζονται ως όγκοι ελέγχου ή κελιά. Τα κελιά πρέπει να γεμίζουν όλο το χωρίο του πεδίου ροής χωρίς να αλληλοκαλύπτονται μεταξύ τους. Κάθε κελί, εκτός από το κέντρο βάρους του, ορίζεται επίσης και από τις επιφάνειες που το πλαισιώνουν. Οι τιμές των μεταβλητών του πεδίου ροής αποθηκεύονται στα κέντρα βάρους των κελιών, τα οποία αποτελούν στοιχεία του αριθμητικού πλέγματος. Σε αυτήν την εργασία, για τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν χρησιμοποιήθηκε ομοιόμορφο ορθογωνικό πλέγμα, οπότε όλα τα κελιά ήταν εξάεδρα. Το αριθμητικό πλέγμα, υπολογίστηκε με τη χρήση του blockMesh, ο οποίος αποτελεί έναν από τους γενέτες πλέγματος του OpenFOAM, [28]. Τα σχήματα διακριτοποίησης που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται συνοπτικά στον Πίνακα 7.

Όρος	Σχήμα διακριτοποίησης	Ακρίβεια
Μεταφοράς	Gauss upwind	Πρώτης τάξης
Διάχυσης	Gauss linear	Δεύτερης τάξης

Πίνακας 7: Τα σχήματα διακριτοποίησης για τους όρους μεταφοράς και διάχυσης όπως αυτά αναφέρονται στο OpenFOAM, [28].

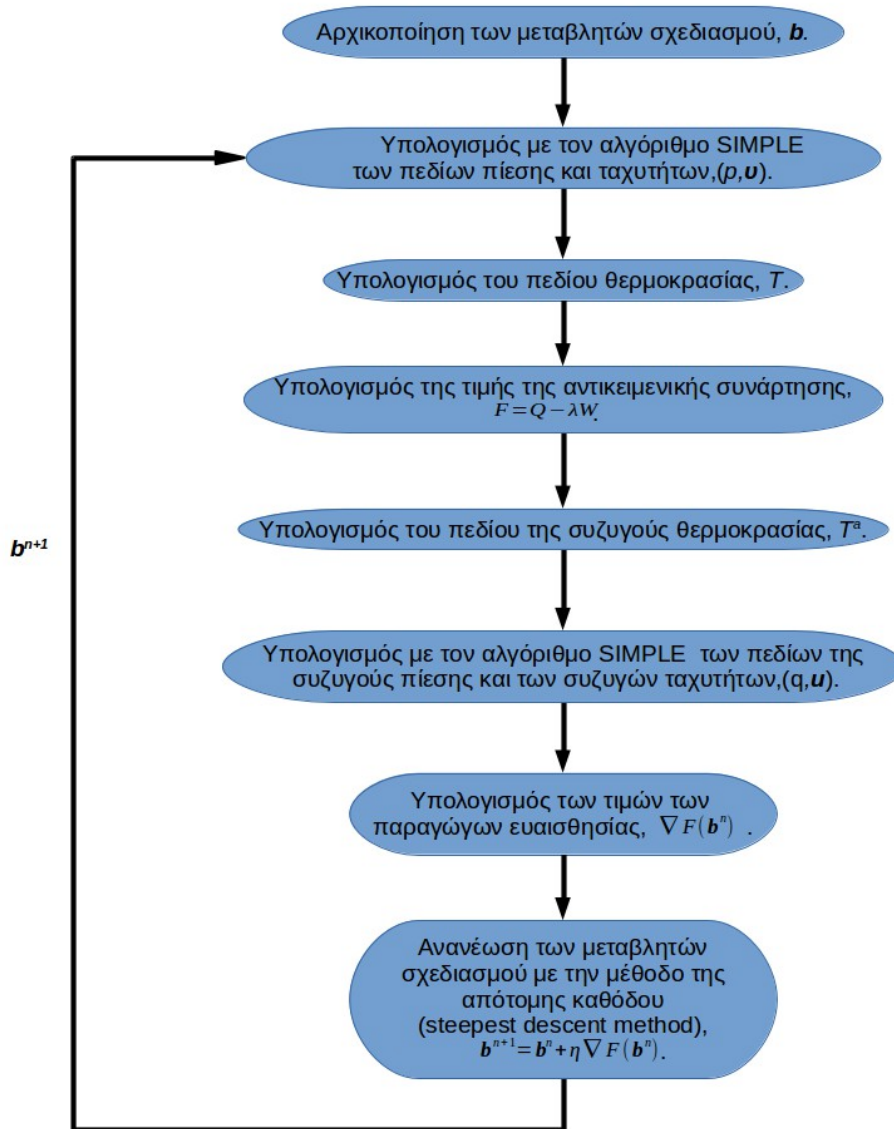
Στο πρωτεύον πρόβλημα, όπως και σε όλα τα προβλήματα ροής, για τον υπολογισμό του πεδίου της πίεσης δεν υπάρχει κάποια ρητή εξίσωση. Εξαιτίας του προηγούμενου χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος SIMPLE. Στη διατύπωση του συγκεκριμένου αλγόριθμου χρησιμοποιούνται, σε διακριτοποιημένη μορφή, οι εξισώσεις ορμής οι οποίες συνδιάζονται με την εξίσωση συνέχειας και έτσι δημιουργείται η ρητή εξίσωση πίεσης. Επίσης, η ενεργειακή εξίσωση του πρωτεύον προβλήματος λύνεται μετά από την επίλυση των πεδίων της ταχύτητας και του πεδίου της πίεσης, εξαιτίας του ότι η μεταβλητή της θερμοκρασίας δεν εμπλέκεται στον υπολογισμό των άλλων μεταβλητών.

Η επίλυση του συζυγούς προβλήματος είναι αρκετά παρόμοια με την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος, εξαιτίας της ομοιότητας των εξισώσεων τους. Συγκεκριμένα, για την επίλυση του πεδίου της συζυγούς πίεσης και των πεδίων της συζυγούς ταχύτητας χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος SIMPLE. Επίσης η επίλυση της συζυγούς ενεργειακής εξίσωσης, σε αντίθεση με το πρωτεύον, γίνεται πριν την επίλυση των άλλων συζυγών μεταβλητών. Το προηγούμενο συμβαίνει εξαιτίας του ότι στην συζυγή ενεργειακή εξίσωση πέραν της συζυγούς θερμοκρασίας δεν εμπλέκεται άλλη συζυγής μεταβλητή.

Οι επιλύτες που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση των πεδίων των μεταβλητών του πρωτεύον και του συζυγούς προβλήματος, παρουσιάζονται στον Πίνακα 8. Επίσης, στο σχήμα 5.1 παρουσιάζεται το διάγραμμα του κώδικα για την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης.

Μεταβλητές	Επιλύτης	Περιγραφή
p, q	GAMG	Γενικευμένος πολυπλεγματικός αλγόριθμος
T, T_a	BICCG	Αλγόριθμος ο οποίος χρησιμοποιεί τη μέθοδο δισυζυγών κλίσεων
u_i, u_i	smoothSolver	Αλγόριθμος ο οποίος χρησιμοποιεί τη μέθοδο Gauss-Seidel

Πίνακας 8: Παρουσιάζεται για κάθε μεταβλητή του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος, ο επιλύτης για τον υπολογισμό του πεδίου της. Επίσης, και για κάθε επιλύτη παρουσιάζεται η συνοπτική περιγραφή του όπως αυτή αναφέρεται στο OpenFOAM, [28].

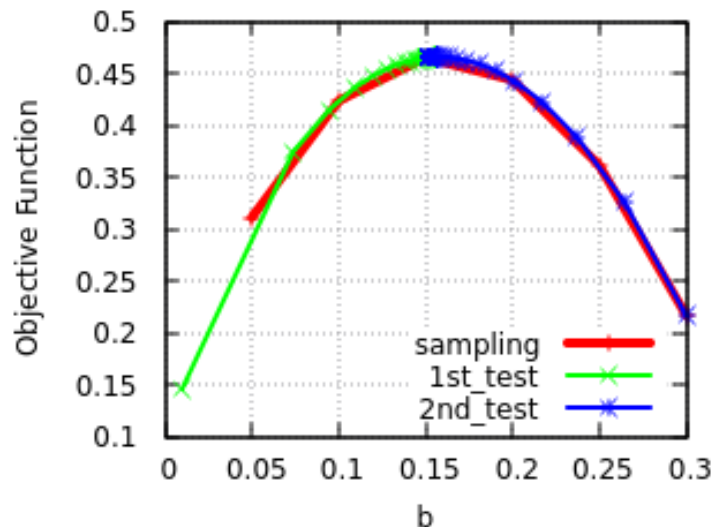


Σχήμα 5.1: Τα στάδια του κώδικα για την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης για κάθε κύκλο.

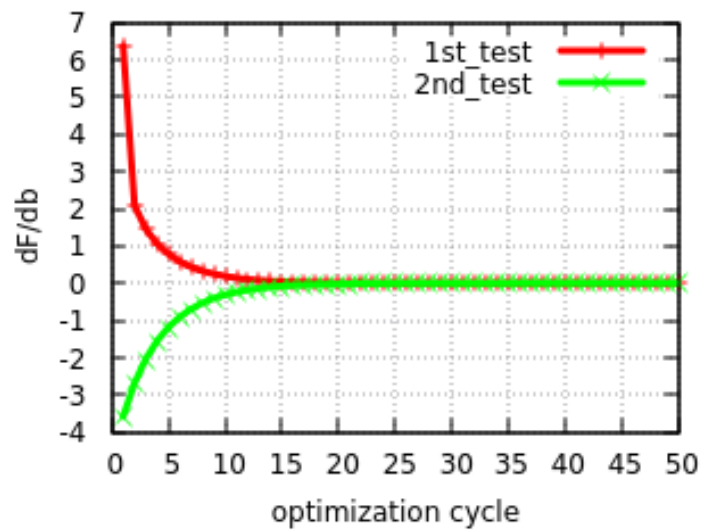
6. Αποτελέσματα

6.1. 2Δ Πρόβλημα- Τετραγωνικό χωρίο

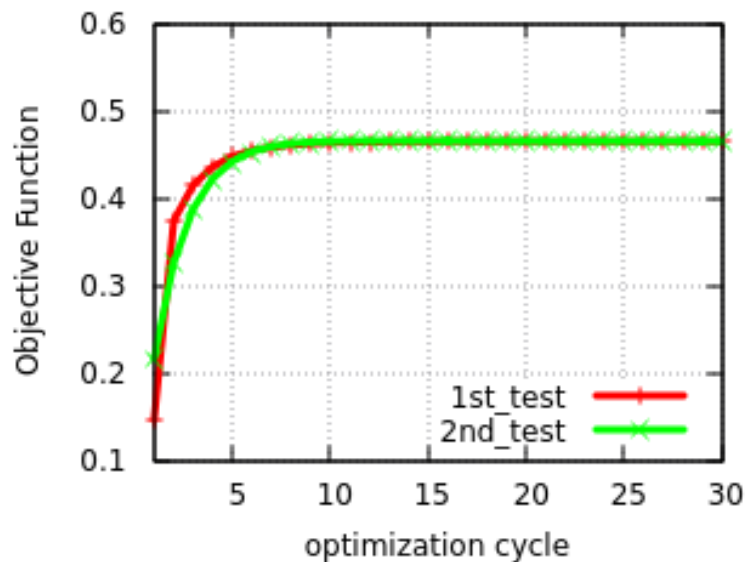
Για την 1^η περίπτωση, η οποία παρουσιάζεται στο σχήμα 2.1, έγιναν δύο δοκιμές του κώδικα βελτιστοποίησης. Οι δύο δοκιμές μεταξύ τους διέφεραν ως προς την αρχικοποίηση της μεταβλητής σχεδιασμού, η οποία όπως προαναφέρθηκε είναι η συνιστώσα της ταχύτητας κατά τον x_1 -άξονα στο όριο S_{mw} . Όπως φαίνεται στο σχήμα 6.1, οι αρχικές τιμές της μεταβλητής σχεδιασμού επιλέχθηκαν έτσι ώστε η ανίχνευση του τοπικού ακρότατου να ξεκινά από τα αριστερά του καθολικού ακρότατου στην 1^η δοκιμή και από τα δεξιά στην 2^η δοκιμή. Στον πίνακα 9 παρουσιάζονται συνοπτικά, για κάθε δοκιμή, οι αρχικές και οι τελικές τιμές της μεταβλητής σχεδιασμού της αντικειμενικής συνάρτησης. Η λήψη των τελικών αποτελεσμάτων γίνεται με το που επέλθει η σύγκλιση σε αυτά, γεγονός που δηλώνει την εύρεση ακροτάτου. Όπως φαίνεται στο σχήμα 6.3, για το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι αρκετοί 10 κύκλοι βελτιστοποίησης. Επίσης και στις δύο δοκιμές το βήμα, το οποίο χρησιμοποιείται στην μέθοδο της απότομης καθόδου, ήταν $\eta=0.01$. Η τιμή του βήματος ήταν η μέγιστη η οποία μπορούσε να χρησιμοποιηθεί καθώς, όταν δοκιμάστηκε με μεγαλύτερη τιμή, η μέθοδος απέκλινε. Επίσης στο σχήμα 6.2, ανά κύκλο βελτιστοποίησης παρουσιάζονται οι τιμές της παράγωγου ευαισθησίας για κάθε δοκιμή.



Σχήμα 6.1: Περίπτωση 1. Πορείες ανίχνευσης των δύο δοκιμών για την εύρεση του ακρότατου. Στον y-άξονα παριστάνεται η αντικειμενική συνάρτηση και στον x-άξονα η μεταβλητή σχεδιασμού. Με πράσινο χρώμα αναπαριστάται η πορεία της 1^{ης} δοκιμής και με μπλέ χρώμα της 2^{ης} δοκιμής. Η κόκκινη καμπύλη αναπαριστά την πρωταρχική δειγματοληψία η οποία έγινε με σκοπό την αντίληψη της συμπεριφοράς της αντικειμενικής συνάρτησης. Επίσης όπως παρατηρείται οι δύο πορείες καταλήγουν στο ίδιο σημείο.



Σχήμα 6.2: Περίπτωση 1. Τιμές των παραγώγων ευαισθησίας ως προς τους κύκλους βελτιστοποίησης. Η πράσινη γραμμή αντιστοιχεί στη δεύτερη δοκιμή και η κόκκινη στην πρώτη δοκιμή. Παρατηρείται η μείωση των απόλυτων τιμών των παραγώγων ευαισθησίας μέχρι τον μηδενισμό τους.



Σχήμα 6.3: Περίπτωση 1. Για κάθε δοκιμή παρουσιάζεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης σε κάθε κύκλο βελτιστοποίησης. Παρατηρείται σύγκλιση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης από τον 10^ο κύκλο βελτιστοποίησης. Επίσης γίνεται αντιληπτό το ότι και στις δύο δοκιμές η αντικειμενική συνάρτηση συγκλίνει στην ίδια τιμή.

	η	$b^0\left(\frac{m}{s}\right)$	$F^0\left(\frac{W}{z}\right)$	$b^{final}\left(\frac{m}{s}\right)$	$F^{final}\left(\frac{W}{z}\right)$
1 ^η Δοκιμή	0.01	0.01	0.14626	0.151544	0.4654407
2 ^η Δοκιμή	0.01	0.3	0.216701	0.151544	0.4654407

Πίνακας 9: Περίπτωση 1. Αρχικοποίηση και βέλτιστες λύσεις για την κάθε δοκιμή.

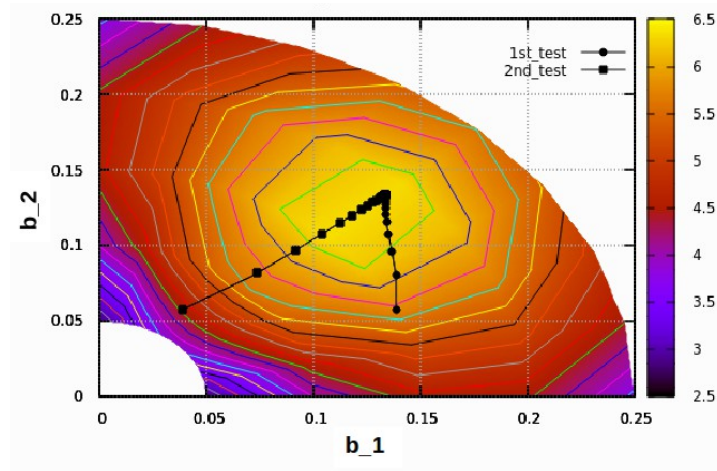
6.2. 3Δ Πρόβλημα- Κυβικό χωρίο

Για τη δεύτερη γεωμετρία, όπως προαναφέρθηκε, οι συνιστώσες της ταχύτητας κατά τον x_1 και x_3 άξονα στο όριο S_{mw} αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού. Σύμφωνα με το σχήμα 3.2, οι γωνίες στις οποίες εμφανίζονται τα ακρότατα ταυτίζονται με τις γωνίες των διαγωνίων του τετραγωνικού σχήματος του κινούμενου τοίχους. Οι αρχικές τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού επιλέχθηκαν από το πρώτο τεταρτημόριο με σκοπό την εύρεση της βέλτιστης λύσης σε αυτό. Το αποτέλεσμα που προκύπτει στο πρώτο τεταρτημόριο ισχύει και στα άλλα τεταρτημόρια, εξαιτίας της συμμετρίας.

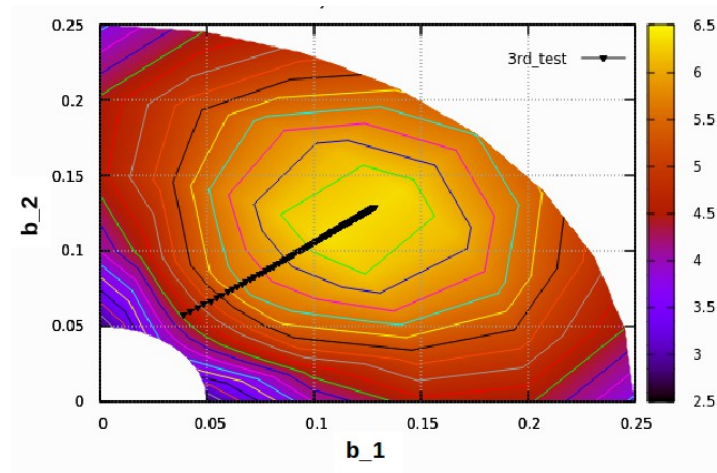
Συνολικά, έγιναν τρεις δοκιμές του κώδικα βελτιστοποίησης. Η πρώτη και η δεύτερη διαφέρουν μεταξύ τους ως προς την αρχικοποίηση του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού. Για την τρίτη δοκιμή, επιλέχθηκε η ίδια αρχικοποίηση με τη δεύτερη αλλά με διαφορετική τιμή του βήματος της απότομης καθόδου. Τα στοιχεία κάθε δοκιμής παρουσιάζονται συνοπτικά στον πίνακα 10. Οι πορείες ανίχνευσης του ακρότατου παρουσιάζονται στα σχήματα 6.4 και 6.5. Οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ανα κύκλο βελτιστοποίησης και για τις τρεις δοκιμές παρουσιάζονται στο σχήμα 6.6.

	η	$b_n^0=(b_1^0, b_2^0)$	$F^0(W)$	$b_n^{final}=(b_1^{final}, b_2^{final})$	$F^{final}(W)$
1 ^η Δοκιμή	0.001	(0.1385, 0.0574)	5.75945	(0.1338, 0.1338)	6.379
2 ^η Δοκιμή	0.001	(0.0385, 0.0574)	4.60556	(0.1338, 0.1338)	6.379
3 ^η Δοκιμή	0.0001	(0.0385, 0.0574)	4.60556	(0.1283, 0.1291)	6.404

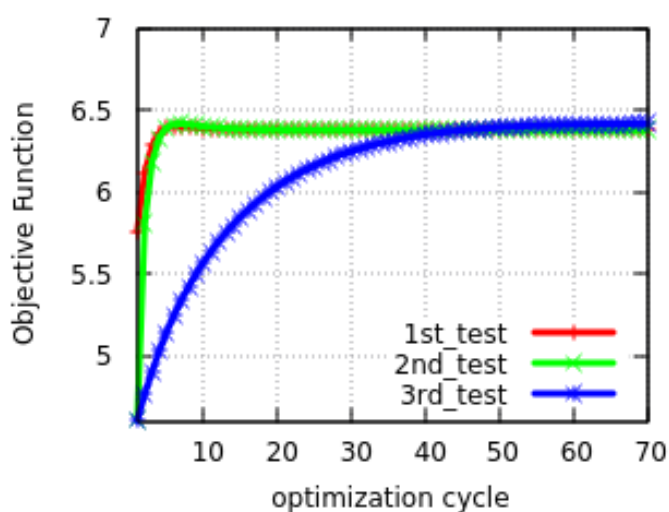
Πίνακας 10: Περίπτωση 2. Αρχικοποίηση και βέλτιστες λύσεις για κάθε δοκιμή.



Σχήμα 6.4: Περίπτωση 2. Κατά τον x και y -άξονα παρουσιάζονται οι τιμές των μεταβλητών b_1 και b_2 αντίστοιχα. Στο φόντο του σχήματος παρουσιάζεται κατά προσέγγιση η αντικειμενική συνάρτηση από τιμές της πρωταρχικής δειγματοληψίας. Με κύκλο και με τετράγωνο συμβολίζονται τα σημεία των πορειών ανίχνευσης της πρώτης και της δεύτερης δοκιμής αντίστοιχα. Σε κάθε πορεία ανίχνευσης, η απόσταση μεταξύ των σημείων αρχικά είναι διακριτή και καθώς πλησιάζουν στο ακρότατο μειώνεται.



Σχήμα 6.5: Περίπτωση 2. Κατά τον x και y -άξονα παρουσιάζονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού b_1 και b_2 αντίστοιχα. Στο φόντο του σχήματος παρουσιάζεται κατά προσέγγιση η αντικειμενική συνάρτηση από τιμές της πρωταρχικής δειγματοληψίας. Με τρίγωνο συμβολίζονται τα σημεία της πορείας ανίχνευσης της τρίτης δοκιμής. Παρατηρείται ότι τα σημεία είναι πολύ κοντά μεταξύ τους.



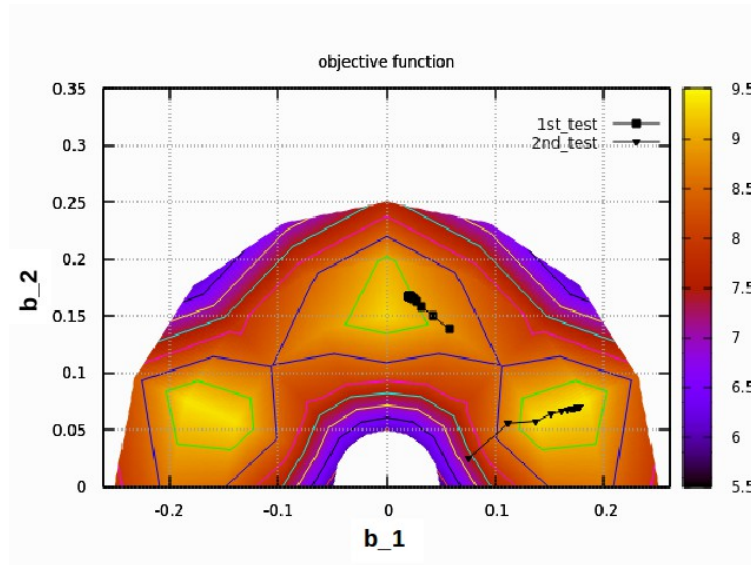
Σχήμα 6.6: Περίπτωση 2. Τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ανα κύκλο βελτιστοποίησης για κάθε δοκιμή. Συγκεκριμένα η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί στην πρώτη δοκιμή, η πράσινη γραμμή αντιστοιχεί στην δεύτερη και η μπλε γραμμή αντιστοιχεί στην τρίτη. Παρατηρείται ότι στην τρίτη δοκιμή η πορεία ανίχνευσης φθάνει πιο κοντά στο ακρότατο από ότι στις άλλες δοκιμές. Επίσης η σύγκλιση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης στην τρίτη δοκιμή επέρχεται πολύ πιο αργά σε σχέση με τις άλλες δοκιμές, στις οποίες όπως φαίνεται οι 10 κύκλοι βελτιστοποίησης είναι αρκετοί.

6.3. 3D Πρόβλημα- Παραλληλεπίπεδο χωρίο

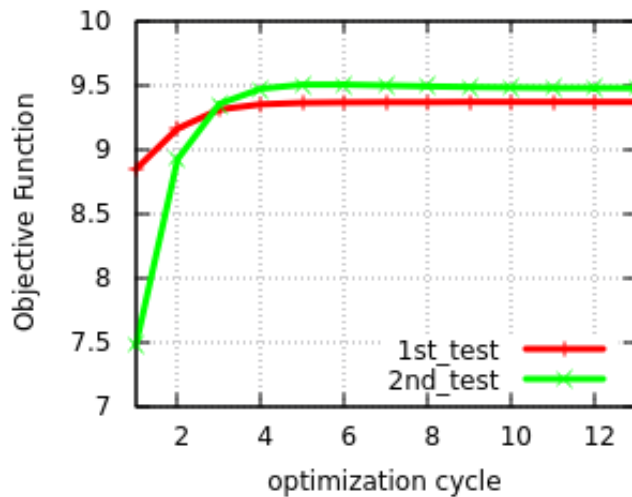
Επίσης και σε αυτή την περίπτωση γεωμετρίας η διερεύνηση για την βέλτιστη λύση έγινε στο πρώτο τεταρτημόριο. Η πρωταρχική δειγματοληψία έδειξε την ύπαρξη ενός ακρότατου εντός του τεταρτημορίου και ένα δεύτερο ακρότατο στο σύνορο με το δεύτερο τεταρτημόριο, σχήμα 3.4. Οπότε, για αυτήν την περίπτωση, έγιναν δύο δοκιμές με επιλεγμένη αρχικοποίηση έτσι ώστε να διερευνηθεί ποιο από τα δύο ακρότατα αποτελεί το καθολικό για το πρώτο τεταρτημόριο. Στο σχήμα 6.7 παρουσιάζονται οι πορείες ανίχνευσης και στο σχήμα 6.8 παρουσιάζονται οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τους κύκλους βελτιστοποίησης για κάθε δοκιμή. Επίσης, στον πίνακα 11, παρουσιάζονται συνοπτικά τα στοιχεία και τα αποτελέσματα κάθε δοκιμής.

	η	$b_n^0 = (b_1^0, b_2^0)$	$F^0(W)$	$b_n^{final} = (b_1^{final}, b_2^{final})$	$F^{final}(W)$
1 ^η Δοκιμή	0.001	(0.1385, 0.0574)	8.84266	(0.1675, 0.0202)	9.36753
2 ^η Δοκιμή	0.001	(0.025, 0.075)	7.47112	(0.0699, 0.1767)	9.47347

Πίνακας 11: Περίπτωση 3. Αρχικοποίηση και βέλτιστες λύσεις για κάθε δοκιμή.



Σχήμα 6.7: Περίπτωση 3. Κατά τον x και y -άξονα παρουσιάζονται οι τιμές των μεταβλητών b_2 και b_1 αντίστοιχα. Στο φόντο του σχήματος παρουσιάζεται κατά προσέγγιση η αντικειμενική συνάρτηση από τιμές της πρωταρχικής δειγματοληψίας. Με τετράγωνο και τρίγωνο συμβολίζονται τα σημεία των πορειών ανίχνευσης της πρώτης δοκιμής και της δεύτερης δοκιμής αντίστοιχα.



Σχήμα 6.8: Παρουσιάζονται οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τους κύκλους βελτιστοποίησης, για κάθε δοκιμή. Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί στην πρώτη δοκιμή και η πράσινη γραμμή αντιστοιχεί στην δεύτερη δοκιμή. Παρατηρείται ότι, στη δεύτερη δοκιμή η αντικειμενική συνάρτηση συγκλίνει σε υψηλότερη τιμή από ότι στην πρώτη. Επίσης, παρατηρείται ότι και στις δύο δοκιμές η σύγκλιση επέρχεται αρκετά γρήγορα.

7. Σύνοψη-Συμπεράσματα

Σε αυτήν την εργασία, προγραμματίστηκε κώδικας για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης, στον οποίο χρησιμοποιείται η συνεχής συζυγής μέθοδος για τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας. Οι τιμές των παραγώγων ευαισθησίας απαιτούνται από τη μέθοδο της απότομης καθόδου για την ανανέωση των τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού. Τα προβλήματα βελτιστοποίησης που επιλύει ο συγκεκριμένος κώδικας αφορούν προβλήματα ροής συγκεκριμένου τύπου γεωμετρίας, για συγκεκριμένη αντικειμενική συνάρτηση. Οι μεταβλητές σχεδιασμού, στην ουσία, ήταν το μέτρο και η γωνία της ταχύτητας του κινούμενου τοιχώματος, τα οποία εκφράζονταν από τις συνιστώσες της ταχύτητας του. Επίσης μελετήθηκαν τρεις περιπτώσεις διαφορετικής γεωμετρίας του συγκεκριμένου τύπου. Και στις τρεις περιπτώσεις έγινε μία πρωταρχική δειγματοληψία με σκοπό την προσεγγιστική περιγραφή της συμπεριφοράς της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

Στην πρώτη περίπτωση γεωμετρίας το πρόβλημα βελτιστοποίησης χαρακτηρίζεται ως εκφυλισμένο εφόσον είχε μόνο το μέτρο της ταχύτητας ως μεταβλητή σχεδιασμού εξαιτίας του ότι η ροή του ρευστού ήταν διδιάστατη. Οπότε ο σκοπός των δοκιμών του κώδικα βελτιστοποίησης, σε αυτήν τη γεωμετρία, ήταν η πιστοποίησή του. Συγκεκριμένα έγιναν δύο δοκιμές του κώδικα με διαφορετικές αρχικοποιήσεις της μεταβλητής σχεδιασμού. Οι αρχικοποιήσεις έγιναν με σκοπό στην πρώτη δοκιμή η πορεία ανίχνευσης να ξεκινά από τα αριστερά του ακρότατου και, στη δεύτερη δοκιμή, να ξεκινάει από τα δεξιά. Η εκτίμηση της περιοχής στην οποία βρίσκεται το τοπικό ακρότατο έγινε μέσω της πρωταρχικής δειγματοληψίας. Ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας ήταν σωστός, καθώς στην πρώτη δοκιμή οι τιμές οι οποίες προέκυπταν ήταν θετικές και μειώνονταν με το πέρας των κύκλων βελτιστοποίησης μέχρι τον μηδενισμό τους. Το ίδιο συνέβηκε και στην δεύτερη δοκιμή με την διαφορά ότι προέκυπταν αρνητικές τιμές για τις παραγώγους ευαισθησίας, σχήμα 6.2. Όπως παρατηρήθηκε στα σχήματα 6.1 και 6.3, και στις δύο δοκιμές εντοπίστηκε το ακρότατο στο ίδιο σημείο ή, αλλιώς, η ίδια λύση του προβλήματος βελτιστοποίησης. Οπότε ο κώδικας επιβεβαιώθηκε και μπορούσε να επεκταθεί για προβλήματα με τριδιάστατη την ροή του ρευστού.

Η προκαταρκτική δειγματοληψία στη δεύτερη γεωμετρία, έλαβε μέρος μόνο στο πρώτο τεταρτημόριο του πεδίου τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού. Εξαιτίας της συμμετρίας του τετραγωνικού σχήματος του κινούμενου τοίχους δεν ήταν απαραίτητη η δειγματοληψία από τα υπόλοιπα τεταρτημόρια. Από την προσεγγιστική περιγραφή της συμπεριφοράς της αντικειμενικής συνάρτησης, υπήρξε η υπόθεση ότι το ακρότατο εμφανίζεται στην κατεύθυνση την οποία υποδεικνύει η γωνία της διαγωνίου του τετραγώνου, δηλαδή στις 45 μοίρες. Συνολικά, για αυτήν τη γεωμετρία, έγιναν τρεις δοκιμές του κώδικα βελτιστοποίησης. Οι δύο πρώτες δοκιμές είχαν διαφορετική αρχικοποίηση του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού αλλά χρησιμοποιήθηκε ίδια τιμή για το βήμα της απότομης καθόδου. Οι πορείες ανίχνευσης των δύο πρώτων δοκιμών είχαν την ίδια κατάληξη, δηλαδή εντόπισαν την ίδια βέλτιστη λύση η οποία επιβεβαιώνει την

υπόθεση καθώς υποδεικνύει διάνυσμα της ταχύτητας γωνίας 45 μοιρών.

Στη δεύτερη γεωμετρία, έγινε και μία τρίτη δοκιμή, η οποία ως προς την δεύτερη είχε κοινή αρχικοποίηση αλλά μικρότερη τιμή βήματος, συγκεκριμένα κατα μία τάξη μεγέθους. Η πορεία ανίχνευσης της τρίτης δοκιμής προσέγγισε ελαφρώς καλύτερα το ακρότατο. Από το προηγούμενο εξάγεται το συμπέρασμα ότι η λύση είναι ευαίσθητη ως προς την επιλογή της τιμής του βήματος και αυτό αποτελεί γνωστό χαρακτηριστικό της μεθόδου της απότομης καθόδου. Επίσης όπως παρουσιάζεται στο σχήμα, η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης στην τρίτη δοκιμή είναι πολύ πιο αργή σε σχέση δεύτερη δοκιμή. Ως συνέπεια της αργής σύγκλισης είναι το αυξανόμενο υπολογιστικό κόστος. Το τελευταίο λειτουργεί αποτρεπτικά για τη χρησιμοποίηση μικρότερης τιμής βήματος από αυτήν που χρησιμοποιήθηκε στη δεύτερη δοκιμή.

Στην τρίτη γεωμετρία, από την πρωταρχική δειγματοληψία στο πρώτο τεταρτημόριο εκτιμήθηκε η ύπαρξη δύο ακρότατων. Συγκεκριμένα το ένα ακρότατο είναι εντός του πρώτου τεταρτημορίου και το άλλο επάνω στο σύνορο με το δεύτερο τεταρτημόριο. Οπότε, με σκοπό να βρεθεί το καθολικό ακρότατο στο τεταρτημόριο, έγιναν δύο δοκιμές με διαφορετική αρχικοποίηση του διανύσματος των μεταβλητών. Οι αρχικοποιήσεις επιλέχθηκαν έτσι ώστε οι πορείες ανίχνευσης να κατευθυνθούν προς τις περιοχές όπου εμφανίζονταν τα ακρότατα. Στην πρώτη δοκιμή, η υπόθεση της τοποθέτησης του ενός ακρότατου επάνω στο σύνορο δεν επιβεβαιώθηκε καθώς αυτό εντοπίστηκε κοντά στο σύνορο αλλά εντός του τεταρτημορίου, σχήμα 6.7. Παρόλα αυτά το καθολικό ακρότατο εντοπίστηκε με τη δεύτερη δοκιμή, στην περιοχή που αρχικά είχε εκτιμηθεί η τοποθέτηση ακρότατου εντός του τεταρτημορίου.

Βιβλιογραφία

- 1: Chapman D.R. (1979) Computational Aerodynamics Development and Outlook, AIAA Journal, Vol 17, No. 12, pp.1293-1313
- 2: John F. Wendt Computational fluid dynamics- An introduction, 3rd edn
- 3: Bertsekas D (1996) Constrained optimization and lagrange multiplier methods, 1st edn. Athena Scientific, Belmont
- 4: Mohammadi B, Pironneau O (2001) Applied shape optimization for fluids. Oxford University Press, Oxford
- 5: Nocedal J, Wright S (1999) Numerical optimization. Springer, Berlin,
- 6: Back T (1996) Evolutionary algorithms in theory and practice. Evolution strategies, evolutionary programming, genetic algorithms. Oxford University Press, Oxford
- 7: Davis L (1991) Handbook of genetic algorithms. Van Nostrand Reinhold, New York
- 8: Fainekos G, Giannakoglou K (2003) Inverse design of airfoils based on a novel formulation of the ant colony optimization method, Inverse problems in engineering, Vol. 11, No.1, pp. 21-38
- 9: Asouti V, Giannakoglou K (2009) Aerodynamic optimization using a parallel asynchronous evolutionary algorithm controlled by strongly interacting demes. Eng Optim 41(3):241–257
- 10: Giannakoglou K (2002) Design of optimal aerodynamic shapes using stochastic optimization methods and computational intelligence. Prog Aerosp Sci 38(1):43–76
- 11: Γιαννάκογλου Κ (2006) Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική, 4η Έκδοση, Αθήνα
- 12: Νικόλας Καζαζάκης (2008) Βελτιστοποίηση Υπερηχητικού Επιβατικού Αεροσκάφους με Χρήση της Μεθόδου Μιγαδικών Μεταβλητών, Διπλωματική Εργασία, Αθήνα
- 13: Newman J, Anderson W, Whitfield D (1998) Multidisciplinary sensitivity derivatives using complex variables. MSSU-COE-ERC-98-08
- 14: Turgeon E, Pelletier D, Borggaard J, Etienne S (2007) Application of a sensitivity equation method to the $k - \epsilon$ model of turbulence. Optim Eng 8:341–372
- 15: Papadimitriou D, Giannakoglou K (2007) Direct, adjoint and mixed approaches for the computation of Hessian in airfoil design problems. Int J Numer Methods Fluids 56(10):1929–1943
- 16: Papadimitriou D, Giannakoglou K (2013) Third-order sensitivity analysis for robust aerodynamic design using continuous adjoint. Int J Numer Methods Fluids 71(5):652–670
- 17: Jameson A (1988) Aerodynamic design via control theory. J Sci Comput 3:233–260
- 18: Pironneau O (1984) Optimal shape design for elliptic systems. Springer, New York
- 19: Kontoleonos E, Papoutsis-Kiachagias E, Zymaris A, Papadimitriou D, Giannakoglou K (2013) Adjoint-based constrained topology optimization for viscous flows, including heat transfer. Eng Optim 45(8):941–961
- 20: Papoutsis-Kiachagias E, Kyriacou S, Giannakoglou K (2014) The continuous adjoint method for the design of hydraulic turbomachines. Comput Methods Appl Mech Eng 278:621–639
- 21: Papoutsis-Kiachagias E, Zymaris A, Kavvadias I, Papadimitriou D, Giannakoglou K (2014) The continuous adjoint approach to the $k - \epsilon$ turbulence model for shape optimization and optimal active control of turbulent flows. Eng Optim.

- 22: Papadimitriou D, Giannakoglou K (2007) A continuous adjoint method with objective function derivatives based on boundary integrals for inviscid and viscous flows. *J Comput Fluids* 36(2):325–341
- 23: Giles M, Duta M, Muller J, Pierce N (2003) Algorithm developments for discrete adjoint methods. *AIAA J* 41(2):198–205
- 24: Ghia U, Ghia K, Shin C (1982), High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method, *Journal of Computational Physics*, Vol. 48, pp. 387-411.
- 25: E. Erturk, Discussions on Driven Cavity Flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2009, Vol 60, pp 275-294
- 26: <http://www.cavityflow.com/>
- 27: Παπαδημητρίου Δ (2007) Συζυγείς διατυπώσεις για την ανάλυση-σχεδίαση πτερυγώσεων στροβιλομηχανών και τη βέλτιστη προσαρμογή πλέγματος με a posteriori εκτίμηση σφάλματος, διδακτορική διατριβή
- 28: <http://cfd.direct/>
- 29: <http://www.openfoam.com/>
- 30: Versteeg H.K, Malalasekera W (1995) An introduction to computational fluid dynamics- The finite volume method
- 31: OpenFOAM User's Guide
- 32: OpenFOAM Programmer's Guide