



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής
& Βελτιστοποίησης

Προγραμματισμός της Μεθόδου του Ιδιο-Γενικευμένου
Διαχωρισμού (Proper Generalized Decomposition) για την
Αριθμητική Επίλυση της 2Δ Εξίσωσης Burgers και της
Συζυγούς της για Χρήση στη Βελτιστοποίηση

Διπλωματική Εργασία

Μύρων Σαμψάκης-Μπακόπουλος

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου , Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Ιούλιος 2018

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ορισμένα άτομα που με βοήθησαν με οποιονδήποτε τρόπο κατά την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας.

Αρχικά, πρέπει να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα Καθηγητή κ. Κυριάκο Γιαννάκογλου για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με το συγκεκριμένο θέμα, για τη συνεχή υποστήριξη αλλά και τον αμέτρητο χρόνο που αφιέρωσε ώστε να με κατευθύνει προς τη σωστή πορεία όταν είχα «κολλήσει», και είχα ανάγκη τη βοήθειά του.

Επίσης, ευχαριστώ τα μέλη της ΜΠΥΡ&B/ΕΜΠ, για την προθυμία τους να μου λύσουν οποιεσδήποτε απορίες και κυρίως τον Κωνσταντίνο Σαμούχο και τον Γιάννη Βρυώνη για την επίλυση διάφορων επιστημονικών αποριών και τεχνικών θεμάτων.

Τέλος, δεν θα μπορούσα να παραλείψω να ευχαριστήσω τους γονείς μου, που παρά τις μεγάλες δυσκολίες της περιόδου, με στήριξαν όλον αυτόν τον καιρό για να ξεπεράσω τα διάφορα εμπόδια και να καταφέρω να φέρω την εργασία εις πέρας.





Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής
& Βελτιστοποίησης

Προγραμματισμός της Μεθόδου του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού
(Proper Generalized Decomposition) για την Αριθμητική Επίλυση της 2Δ
Εξίσωσης Burgers και της Συζυγούς της για Χρήση στη Βελτιστοποίηση

Διπλωματική Εργασία
του Μύρωνος Σαμφάκη-Μπακοπούλου

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ
Αθήνα, 2018

Περίληψη

Η διπλωματική εργασία πραγματεύεται τη χρήση της μεθόδου του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού (Proper Generalized Decomposition-PGD) για την πρόλεξη πεδίων ως λύσεις πεπλεγμένων μερικών διαφορικών εξισώσεων (ΜΔΕ). Η μέθοδος αυτή ανήκει στην κατηγορία των μεθόδων Μοντέλων Μειωμένης Τάξης (Reduced Order Models-ROMs), μια οικογένεια μεθόδων που δύναται να ελαττώσουν την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ και μνήμη για την επίλυση ενός προβλήματος με πολλές παραμέτρους. Σύμφωνα με το PGD, ένα πολυπαραμετρικό πρόβλημα το οποίο συμβατικά θα απαιτούσε την επίλυση κάποιων ΜΔΕ, μπορεί να υποβαθμιστεί ώστε η λύση του να προκύψει ως λύση κάποιων ανεξάρτητων μεταξύ τους 1Δ ΣΔΕ. Στη συνέχεια, αυτές οι συναρτήσεις, σε μορφή αθροίσματος γινομένων, θα δώσουν μια προσέγγιση των πεδίων που αποτελούν λύση της εξίσωσης.

Η εργασία χωρίζεται σε δύο βασικά μέρη τα οποία είναι όμως άκρως αλληλένδετα. Το πρώτο μέρος πραγματεύεται τη λειτουργία της μεθόδου για την επίλυση του 2Δ συστήματος εξισώσεων Burgers, αρχικά σε καρτεσιανό και, στη συνέχεια, σε καμπυλόγραμμο πλέγμα. Στο δεύτερο μέρος, η μέθοδος PGD εξετάζεται ως προς την αποδοτικότητά της στην επίλυση των συζυγών πεδίων των 2Δ εξισώσεων Burgers, με σκοπό τη χρήση του στη συνεχή συζυγή μέθοδο, για χρήση στη βελτιστοποίηση.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει όχι μόνο η ελάττωση της απαιτούμενης μνήμης κατά την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος αλλά και κατά την επίλυση του συζυγούς πεδίου για τον υπολογισμό των παραγώγων συναρτήσεων κόστους σε προβλήματα βελτιστοποίησης. Δεδομένου των μεγάλων απαιτήσεων μνήμης της συζυγούς μεθόδου ενός χρονικά μη-μόνιμου προβλήματος, το PGD δύναται να ελαττώσει σημαντικά τόσο την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ για τον υπολογισμό του συζυγούς πεδίου και την απαιτούμενη μνήμη, προσφέροντας τη δυνατότητα χρήσης της συζυγούς μεθόδου σε μεγάλης κλίμακας προβλήματα.



National Technical University of Athens
School of Mechanical Engineering
Fluids Section
Laboratory of Thermal Turbomachines
Parallel CFD & Optimization Unit

Programming of the Proper Generalized Decomposition (PGD) Method for the Numerical Solving of the 2D Burgers Equation and its Adjoint for Applications in Optimization Methods

Diploma Thesis

by Myron Sampsakis-Bakopoulos

Supervisor: K. C. Giannakoglou, Professor NTUA
Athens, 2018

Abstract

This diploma thesis is concerned with the implementation of the **Proper Generalized Decomposition - PGD** method for the numerical solution of 2D partial differential equations (PDEs). PGD belongs in a wider group of methods known as Reduced Order Models (ROMs). Their aim is to lower the computational cost and memory required for the numerical solution of a multi-dimensional problem governed by a single PDE or a system of PDEs. According to the PGD, a multi-dimensional problem, can be reformulated so that its solution is achieved by a number of far simpler ODEs, each of which is a function of a single dimension. These functions -as solutions to these ODEs- in the form of a sum of multiples, is able to produce an approximation to the solution to the governing PDEs.

This diploma thesis is thematically split into two parts, which are however fully interrelated. The first part consists of the application of the PGD method as a solver to the 2D system of the Burgers equations, initially in a cartesian and, then, a curvilinear grid. The second part involves the application of PGD as a solver in the adjoint problem of the above system, for use in the continuous adjoint optimization procedure (with a selected objective function).

Attention is paid not only to the reduced memory requirements during the solution of the primal (the 2D Burgers equations, herein) problem, but also during the solution of the adjoint field, for the computation of the sensitivity derivatives, for use in optimization problems. Since an unsteady adjoint problem has exceptionally high memory requirements, PGD can vastly reduce the required computational cost and memory needed for the computation of the adjoint field.

Ακρωνύμια

ΕΜΠ	Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
ΕΘΣ	Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
ΜΠΥΡΒ	Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής Βελτιστοποίησης

ΥΡΔ	Υπολογιστική Ρευστοδυναμική
ΜΔΕ	Μερική /-ές Διαφορική/-ές Εξίσωση /-εις
ΣΔΕ	Συνήθης /-εις Διαφορική /-εις Εξίσωση /-εις
1Δ	Μιας διάστασης (μονοδιάστατο)
2Δ	Δύο διαστάσεων (διδιάστατο)

NTUA	National Technical University of Athens
PCopt	Parallel CFD & Optimization unit

CFD	Computational Fluid Dynamics
PDE	Partial Differential Equation
ODE	Ordinary Differential Equation
FAE	Field Adjoint Equation
PGD	Proper Generalized Decomposition



Περιεχόμενα

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Μοντέλα Μειωμένης Τάξης	1
1.2	Βελτιστοποίηση με Χρήση της Συζυγούς Μεθόδου	3
1.3	Στόχος και Δομή Εργασίας	3
2	Επίλυση των 2Δ Εξισώσεων Burgers με Χρήση PGD σε Ορθοκανονικό Πλέγμα	7
2.1	Επίλυση με Χρήση PGD	8
2.2	Υπολογισμός του Πεδίου u	11
2.3	Υπολογισμός του Πεδίου v	14
2.4	Εφαρμογή Οριακών Συνθηκών	16
2.4.1	Τύπου Dirichlet	17
2.4.2	Τύπου Μηδενικής Neumann	21
2.5	Μέθοδοι Διακριτοποίησης	22
2.6	Σύγκλιση Εσωτερικών Επαναλήψεων	24
2.7	Σύγκλιση Βάσης - Κριτήρια Τερματισμού Κύκλων	24
2.8	Έλεγχος Τάξης Μεγέθους των Βάσεων	25
3	Επίλυση με PGD των 2Δ Εξισώσεων Burgers σε Ορθοκανονικό Πλέγμα	27
3.1	Επιλύσεις για Διάφορους Αριθμούς Re και Διαστάσεις Πλέγματος	29
3.1.1	$Re=1$, Πλέγμα 101×101	30
3.1.2	$Re=1$, Πλέγμα 201×201	32
3.1.3	$Re=50$, Πλέγμα 101×101	34
3.1.4	$Re=50$, Πλέγμα 201×201	36
3.1.5	$Re=1000$, Πλέγμα 101×101	38
3.1.6	$Re=1000$, Πλέγμα 201×201	40
3.2	Αποτελέσματα-Σχολιασμοί	42
3.2.1	Απαιτούμενη μνήμη	43
4	Επίλυση των 2Δ Εξισώσεων Burgers σε Καμπυλόγραμμο Πλέγμα με PGD	45
4.1	Υπολογισμός του Πεδίου u	47
4.2	Υπολογισμός του Πεδίου v	51
5	Παράδειγμα Επίλυσης ΜΔΕ με PGD σε Καμπυλόγραμμο Πλέγμα	57
5.1	Πλέγμα με Πυκνώσεις	57
5.1.1	Παράδειγμα 1ο	59
5.1.2	Παράδειγμα 2ο	60
5.1.3	Παράδειγμα 3ο	61

5.2	Καμπυλόγραμμα Πλέγμα	62
5.2.1	Παράδειγμα 4ο	63
5.2.2	Παράδειγμα 5ο	64
5.2.3	Παράδειγμα 6ο	65
5.3	Αποτελέσματα-Σχολιασμοί	66
5.3.1	Απαιτούμενη Μνήμη	66
6	Προγραμματισμός της Συζυγούς Μεθόδου στη 2Δ Εξίσωση Burgers με PGD	69
6.1	Διατύπωση Πρωτεύοντος Προβλήματος	70
6.2	Οριακές Συνθήκες και Παράγωγοι Ευαισθησίας	76
6.3	Επίλυση Συζυγούς Προβλήματος με PGD	78
6.3.1	Οριακές Συνθήκες στο PGD	81
6.4	Εφαρμογή-Αποτελέσματα	84
7	Σύνοψη-Συμπεράσματα-Προτάσεις για Περαιτέρω Μελέτη	91
	Παραρτήματα	93
A'	Παράρτημα: Προβολή Galerkin	93
B'	Παράρτημα: Εκ των Υστέρων Συμπύεση Πεδίων με PGD	94
B'.1	Στρατηγική Εναλλασσόμενων Κατευθύνσεων	94
	Βιβλιογραφία	97

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Μοντέλα Μειωμένης Τάξης

Τα τελευταία χρόνια, οι υπολογιστικές μέθοδοι εξελίσσονται με εκθετικά αυξανόμενους ρυθμούς, τόσο από τη μεριά των υπολογιστικών μοντέλων, όσο και από την ισχύ των ίδιων των υπολογιστικών συστημάτων στα οποία αυτά εκτελούνται. Αυτή η πρόοδος έχει καταστήσει εφικτή την προσομοίωση πλήθους φαινομένων με εξαιρετική ακρίβεια, συμπεριλαμβανομένων και πληθώρας προβλημάτων της επιστήμης της μηχανολογίας. Από αυτά δεν θα μπορούσαν να λείπουν τα προβλήματα της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, δηλαδή της πρόλεξης ροών. Παρόλα αυτά, συνεχίζει να υπάρχει ένα μεγάλο πλήθος προβλημάτων τα οποία – λόγω της διάστασης του χωρίου στο οποίο βρίσκονται η λύση - θεωρούνται δυσεπίλυτα, λόγω των τεράστιων απαιτήσεων μνήμης.

Ένας συνήθης λόγος για τον οποίον εμφανίζεται μια τέτοια πρόκληση, οφείλεται στο ότι αρκετά μοντέλα για να περιγράψουν ορθά τα φαινόμενα που μελετούν, απαιτούν τη χρήση πολλών ανεξάρτητων μεταβλητών, δηλαδή πολλών βαθμών ελευθερίας -πέραν των ιδιαίτερα πυκνών πλεγμάτων και μικρών χρονικών βημάτων-. Οι μεταβλητές αυτές ορίζουν έναν διανυσματικό χώρο, με κάποιο σημείο του χώρου αυτού να αποτελεί τη λύση του προβλήματος που μελετάται. Με την αύξηση των ανεξάρτητων μεταβλητών, αυξάνεται και ο «όγκος» του χώρου που πρέπει να ερευνηθεί για να βρεθεί η λύση. Στα περισσότερα προβλήματα, η απαίτηση σε υπολογιστική ισχύ και μνήμη (RAM) αυξάνεται εκθετικά με τον αριθμό των ανεξάρτητων μεταβλητών, καθιστώντας μια ακριβή μοντελοποίηση (με πολλές ανεξάρτητες μεταβλητές) ίσως και απαγορευτική.

Ο προφανής τρόπος να αντιμετωπισθεί το πρόβλημα αυτό είναι να χρησιμοποιηθούν ακόμα μεγαλύτερα πολυεπεξεργαστικά συστήματα. Κάτι τέτοιο αντιμετωπίζει το πρόβλημα από την οπτική πλευρά της ισχύος των διαθέσιμων υπολογιστικών συστημάτων, με σημαντική όμως αύξηση του κόστους. Ένας εναλλακτικός τρόπος να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα αυτό είναι από την πλευρά της μεθόδου επίλυσης. Ανάμεσα στους διαθέσιμους τρόπους που εμφανίζονται συνεχώς στις υπολογιστικές μεθόδους, είναι τα **Μοντέλα Μειωμένης Τάξης (Reduced Order Models – ROMs)** [1]. Η αρχή αυτών των μοντέλων, έγκειται στο ότι η λύση ενός προβλήματος, μπορεί να αναζητηθεί σε έναν χώρο αρκετά μικρότερων διαστάσεων. Συνεπώς, ένα πολυπαραμετρικό πρόβλημα, μπορεί να διατυπωθεί με τη χρήση πολλών, απλούστερων, και σημαντικά ευκολότερα επιλύσιμων προβλημάτων.

Μια τέτοια μέθοδος που έχει αναπτυχθεί σχετικά πρόσφατα, είναι η **Μέθοδος του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού (Proper Generalized Decomposition-PGD)** [2],[3],[4], στην οποία στηρίζεται η διπλωματική αυτή εργασία.

Η βασική ιδέα της μεθόδου αυτής είναι πως ένα πολυδιάστατο πρόβλημα, του οποίου λύση ανήκει σε ένα πεδίο στον χώρο των q διαστάσεων, μπορεί να προσεγγιστεί από την άθροιση μικρού αριθμού

N γινομένων 1Δ συναρτήσεων, καθεμία από τις οποίες εξαρτάται αποκλειστικά και μόνο από μια συντεταγμένη του πολυδιάστατου χώρου. Συνεπώς, το πεδίο δύναται να γραφεί ως εξής:

$$u(x_1, x_2, \dots, x_q) \approx \sum_{i=1}^N X_i^1(x_1) X_i^2(x_2) \dots X_i^q(x_q) \quad (1.1)$$

$$u(x_1, x_2, \dots, x_q) \approx \sum_{i=1}^N \prod_{j=1}^q X_i^j(x_j)$$

Από εδώ και στο εξής, η συγκεκριμένη μορφή θα αναφέρεται ως **διαχωρισμένη μορφή (seperated form)**, καθώς το πεδίο διαχωρίζεται σε ένα άθροισμα γινομένων βάσεων. Επίσης, σε κάθε περίπτωση, ο κάτω δείκτης μιας συνάρτησης, θα δηλώνει τον αύξοντα αριθμό της βάσης στην οποία ανήκει.

Η μέθοδος PGD μπορεί να συμβάλει με δύο τρόπους στην αντιμετώπιση «πολυδιάστατων» πεδίων:

- Ανακατασκευή ενός ήδη γνωστού πεδίου, υπολογισμένου αριθμητικά επάνω σε δομημένο πλέγμα, χρονικά μόνιμου ή μη-μόνιμου, σε διαχωρισμένη μορφή μέσω της μεθόδου PGD. Αυτός ο τρόπος ελαττώνει σημαντικά το μέγεθος αποθήκευσης του πεδίου.
- Επίλυση των ΜΔΕ σε διαχωρίσιμη μορφή, με επαναληπτικό τρόπο. **Το πεδίο λύνεται εξ αρχής σε διαχωρίσιμη μορφή.** Σε αυτόν τον τρόπο θα εστιάσει η διπλωματική εργασία, με τη χρήση της ανακατασκευής ενός πεδίου να θεωρείται δεδομένη [2],[5], Παράρτημα Β' και να χρησιμοποιείται όπου χρειάζεται χωρίς ιδιαίτερη έμφαση.

Όπως θα αναλυθεί διεξοδικά στην εργασία, το δεύτερο πρόβλημα έγκειται στον υπολογισμό των συναρτήσεων βάσης που περιγράφουν το ζητούμενο πεδίο (από εδώ και στο εξής θα καλούνται **συναρτήσεις βάσης**). Για τον υπολογισμό τους απαιτείται η επίλυση των προκυπτουσών νέων ΣΔΕ, με σημαντικά μικρότερη απαίτηση υπολογιστικού κόστους και μνήμης από την αντίστοιχη ΜΔΕ που θα απαιτείτο για τον υπολογισμό του πεδίου με κάποιον συμβατικό τρόπο.

Σε ένα πρόβλημα ρευστομηχανικής, καθώς υπάρχουν όροι συναγωγής, απαιτείται να οριστεί ένας τρόπος, ένα σχήμα παραγωγίσιμης, το οποίο -βάσει κάποιου κριτηρίου- θα κατευθύνει την πληροφορία της ροής (ταχύτητα, πίεση, ενέργεια) προς την σωστή διεύθυνση, ώστε να πραγματοποιείται η επίλυση με τον σωστό τρόπο, υπακούοντας στους νόμους της φυσικής. Σε έναν συμβατικό επιλύτη αυτός ο τρόπος είναι -σε επίπεδο εξίσωσης- η κατεύθυνση (και το πρόσημο) της μεταφέρουσας ποσότητας (ταχύτητα), ενώ σε ένα σύστημα εξισώσεων, όπως αυτό που προκύπτει από τη διατύπωση των συντηρητικών εξισώσεων (λ.χ. Euler), η κατεύθυνση ροής της πληροφορίας ορίζεται από το πρόσημο των ιδιοτιμών του Ιακωβιανού μητρώου [6], και επιτυγχάνεται με τη χρήση ενός ανάντι (upwind) σχήματος διακριτοποίησης για τους όρους μεταφοράς.

Μέγιστο ενδιαφέρον έχει η μελέτη του τρόπου διάδοσης της πληροφορίας κατά την επίλυση ενός πεδίου μέσω PGD, δεδομένου ότι πλέον παύει να υπάρχει φυσικό υπόβαθρο στους περισσότερους όρους, αλλά καθαρά μαθηματικό. Ένα μεγάλο μέρος της επιτυχίας της χρήσης της μεθόδου PGD στη χρήση της ως επιλύτη προβλημάτων ΥΡΔ έγκειται στην επιτυχή διατύπωση ενός τρόπου που θα καθορίζει το σχήμα διακριτοποίησης, σύμφωνα με αυτό ενός συμβατικού επιλύτη.

Τα τελευταία χρόνια έχει δοθεί έμφαση στην εφαρμογή της μεθόδου PGD, είτε για επίλυση ενός πεδίου σε πρόβλημα που διέπεται από ΜΔΕ, είτε για τη βέλτιστη «συμπύεση», δηλαδή τον διαχωρισμό ενός πεδίου σε βάσεις με σκοπό την ελάττωση του απαιτούμενου αποθηκευτικού χώρου. Έχουν γίνει μελέτες όσον αφορά τη χρήση της μεθόδου για την παραμετρική μελέτη φαινομένων μεταφοράς θερμότητας με παραμέτρους τις ιδιότητες των υλικών, την παραμόρφωση υλικών υπό διάφορες διεγέρσεις αλλά και τη μελέτη της συμπεριφοράς υλικών με ιδιαίτερη μικροδομή [2],[3],[4].

1.2 Βελτιστοποίηση με Χρήση της Συζυγούς Μεθόδου

Στις αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης, είναι αναγκαίος ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας, δηλαδή της κλίσης της συνάρτησης στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Σε αυτό το πεδίο βρίσκει εφαρμογή και η μέθοδος PGD. Η συνεχής συζυγής μέθοδος [7], έμφαση στην ανάπτυξη της οποίας έχει δοθεί ιδιαίτερα στη ΜΠΥΡ&B/ΕΜΠ, δύναται να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση των παραγώγων αυτών με κύριο πλεονέκτημα την ανεξαρτησία του υπολογιστικού κόστους από τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού. Η ιδιαιτερότητα της συζυγούς μεθόδου, και ο λόγος της άμεσης συσχέτισής της με το PGD έγκειται στο ότι για να υπολογιστούν οι ζητούμενες παράγωγοι ευαισθησίας απαιτείται η επίλυση ΜΔΕ για τον υπολογισμό του συζυγούς πεδίου. Κατά τη χρήση της συζυγούς μεθόδου απαιτείται η εύρεση των συζυγών πεδίων, τα οποία είναι τόσα όσα και οι εξισώσεις που περιγράφουν το ευθύ/πρωτεύον πρόβλημα. Η ιδιαιτερότητα ενός συζυγούς προβλήματος, ειδικά για χρονικά μεταβαλλόμενες ροές, έγκειται κυρίως στις οριακές συνθήκες του στο χρόνο (αρχικές συνθήκες). Μάλιστα, στην περίπτωση ενός χρονικά μεταβλητού προβλήματος, κατά το οποίο απαιτείται ένας αριθμός χρονικών βημάτων, ενώ στο ευθύ πρόβλημα οι οριακές συνθήκες δίνονται κατά τη χρονική στιγμή $t = t_0$ (αρχική συνθήκη), στο συζυγές πεδίο συμβαίνει το αντίστροφο, δηλαδή επιβάλλονται «αρχικές συνθήκες» στο πέρας του χρόνου υπολογισμού. Έτσι κατά την επίλυση ενός συζυγούς πεδίου, η χρονική πληροφορία μεταφέρεται αντίστροφα στον χρόνο. Σκοπός της συζυγούς μεθόδου είναι, εν τέλει, η εύρεση των παραγώγων ευαισθησίας, οι οποίες είναι συναρτήσεις των συζυγών πεδίων. Για να επιλυθεί λοιπόν το συζυγές πεδίο, γίνεται ολοκλήρωση των ΜΔΕ σε όλες τις διαστάσεις του προβλήματος, συμπεριλαμβανομένου και του χρόνου. Όμως, με την επιβολή των «αρχικών» συνθηκών του συζυγούς πεδίου στον τελικό χρόνο υπολογισμού, απαιτείται η πλήρης, σε κάθε βήμα, επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος για τον υπολογισμό του συζυγούς προβλήματος, απαγορεύοντας έτσι τον ταυτόχρονο υπολογισμό τους. Κάτι τέτοιο απαιτεί την πλήρη αποθήκευση όλων των πεδίων σε πολλά αν όχι όλα τα χρονικά βήματα, με την απαιτούμενη μνήμη να είναι σημαντικά υψηλή.

Κάτι τέτοιο, σε ένα χρονικά μη-μόνιμο πρόβλημα, τοποθετεί τις αρχικές συνθήκες του συζυγούς πεδίου στο τέλος του χρόνου υπολογισμού, καθιστώντας την αποθήκευση (ή τον επανυπολογισμό) όλων των στιγμιοτύπων της λύσης αναγκαία για να μπορέσουν να υπολογιστούν οι παράγωγοι ευαισθησίας -οι οποίες είναι συνάρτηση ολόκληρου του πεδίου-. Σε ένα πραγματικό πρόβλημα, τα χρονικά βήματα ενδέχεται να είναι πολλές χιλιάδες, και το πλέγμα του υπολογισμού ιδιαίτερα πυκνό, καθιστώντας την απαίτηση σε αποθηκευτικό χώρο απαγορευτική. Σε αυτό το στάδιο, η επίλυση του συζυγούς πεδίου με τη μέθοδο του PGD προσφέρει διέξοδο στο δυσεπίλυτο αυτό πρόβλημα.

1.3 Στόχος και Δομή Εργασίας

Η διπλωματική εργασία βασίζεται στις αρχές της μεθόδου PGD για την πρόλεξη πεδίων, ως λύσεων ΜΔΕ. Μπορεί να χωριστεί σε δύο βασικά κομμάτια. Στο πρώτο, ελέγχεται η χρήση της μεθόδου όσον αφορά τη δυνατότητα επίλυσης πεπλεγμένων πεδίων που διέπονται από ΜΔΕ, και η αποδοτικότητά της, όσον αφορά την ελάττωση της απαιτούμενης μνήμης. Στο δεύτερο μέρος, αναπτύσσεται η συζυγής μέθοδος για την εφαρμογή βελτιστοποίησης, η επίλυση της οποίας γίνεται

μέσω της μεθόδου PGD. Στο πλαίσιο της εργασίας αναλύονται τα ακόλουθα:

- Αναπτύχθηκε, διατυπώθηκε μαθηματικά και προγραμματίστηκε η μέθοδος με χρήση του PGD, που επιλύει πεπλεγμένα πεδία βασισμένα στη 2Δ εξίσωση Burgers σε καρτεσιανό πλέγμα σε γλώσσα προγραμματισμού *Fortran 77*.
- Επεκτάθηκε περαιτέρω σε σχέση με τις ήδη υπάρχουσες τεχνικές, η μέθοδος και ο τρόπος χρήσης της με διάφορα είδη οριακών συνθηκών, και αναδείχθηκε ικανή για την επίλυση προβλημάτων που διέπονται από παρόμοιες εξισώσεις και οριακές συνθήκες. Στα διάφορα παραδείγματα χρήσης του κώδικα, έγινε εμφανές το αυξανόμενο κέρδος σε μνήμη της μεθόδου με το μέγεθος του πλέγματος.
- Διατυπώθηκε μαθηματικά, και προγραμματίστηκε η συζυγής μέθοδος για χρήση με λογισμικό βελτιστοποίησης για αντίστροφο σχεδιασμό σε προβλήματα που περιγράφονται από το σύστημα των 2Δ εξισώσεων Burgers.
- Προγραμματίστηκε η ίδια μέθοδος για επίλυση με τη χρήση του PGD, διατηρώντας όλα τα διαχειριζόμενα πεδία σε διαχωρισμένη μορφή, ελαττώνοντας σημαντικά την απαιτούμενη μνήμη. Στην συνέχεια, στις εφαρμογές που χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος αυτή, συγκρίθηκαν τα αποτελέσματά της με άλλες συμβατικές μεθόδους βελτιστοποίησης ή παραλλαγές της, όπως η μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών (Finite Differences), και η επίλυση του συζυγούς πεδίου με κάποια συμβατική μέθοδο, και αναδείχθηκε η επιτυχία της μεθόδου στη διαχείριση προβλημάτων της μορφής αυτής.

Η δομή της διπλωματικής εργασίας είναι η εξής:

- **Κεφάλαιο 2:**

Αναπτύσσεται η μέθοδος PGD για την επίλυση του 2Δ συστήματος εξισώσεων Burgers, που βασίζεται στη διαχωρισμένη επίλυση του πεδίου για την κατασκευή προσεγγιστικής αναπαράστασής του σε ορθοκανονικό χωρικό πλέγμα. Περιγράφεται με λεπτομέρεια η μέθοδος και ο αλγόριθμος που τη διέπει. Επίσης, παρουσιάζεται ο τρόπος επιβολής διαφόρων ειδών οριακών συνθηκών σε ένα διαχωρισμένο πεδίο, με σκοπό τη χρήση τους σε προβλήματα που λύνονται με τη χρήση του PGD.

- **Κεφάλαιο 3:**

Γίνεται εφαρμογή των παραπάνω μέσω του προγράμματος που γράφηκε για διάφορες παραλλαγές του προβλήματος (διαφορετικός αριθμός Re , και διάσταση πλέγματος). Επιδεικνύεται η οικονομία σε μνήμη που επιτυγχάνεται λόγω της χρήσης της μεθόδου αυτής. Τέλος, διατυπώνονται συμπεράσματα όσον αφορά τα κέρδη μνήμης και τις περιπτώσεις όπου συμφέρει -ή όχι- η χρήση της μεθόδου για την επίλυση πεδίων.

- **Κεφάλαιο 4:**

Διατυπώνεται μαθηματικά η προγραμματισθείσα μέθοδος PGD για την επίλυση του 2Δ συστήματος της εξίσωσης Burgers για καμπυλόγραμμο πεδίο.

- **Κεφάλαιο 5:**

Με τη χρήση του κώδικα που αναπτύχθηκε στο Κεφάλαιο 4, πραγματοποιούνται μελέτες και υπολογισμοί, διατυπώνονται ορισμένα συμπεράσματα και γίνεται αναφορά στα πλεονεκτήματα και τις αδυναμίες της μεθόδου ως επιλύτη σε καμπυλόγραμμο πλέγματα.

- **Κεφάλαιο 6:**

Διατυπώνεται μαθηματικά, αναπτύσσεται και επαληθεύεται η χρήση της μεθόδου PGD στην επίλυση συζυγών πεδίων με σκοπό τον αντίστροφο σχεδιασμό (βελτιστοποίηση) ενός προβλήματος που διέπεται από το 2Δ σύστημα εξισώσεων Burgers. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με άλλες μεθόδους, με στόχο την εξαγωγή συμπερασμάτων για τα σφάλματα που εισάγονται κατά τη χρήση του PGD στη βελτιστοποίηση.

- **Κεφάλαιο 7:**

Συνοψίζονται συμπεράσματα που αφορούν τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν στη διπλωματική

εργασία και διατυπώνονται προτάσεις σχετικά με την περαιτέρω ανάπτυξη/εφαρμογή της μεθόδου στο μέλλον και τις δυνατότητες επέκτασής της.

Κεφάλαιο 2

Επίλυση των 2Δ Εξισώσεων Burgers με Χρήση PGD σε Ορθοκανονικό Πλέγμα

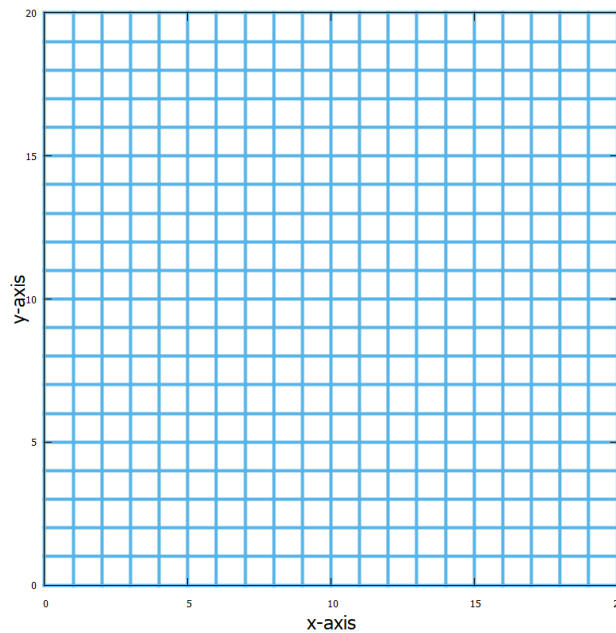
Έχει ήδη αναπτυχθεί εκτενώς σε προηγούμενες εργασίες [5], δημοσιεύσεις [8] και βιβλία [2], η χρήση της μεθόδου του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού για την εκ των υστέρων συμπίεση πεδίων (2Δ και 3Δ), τα οποία έχουν προκύψει ως λύσεις ΜΔΕ με χρήση κάποιας συμβατικής μεθόδου. Οι συγκεκριμένες μέθοδοι χρησιμοποιούν έναν επιλύτη που διαχειρίζεται τις εξισώσεις στην πλήρη, φυσική μορφή τους και, στη συνέχεια, επεξεργάζονται κάθε πεδίο, χωρίζοντάς το σε υπο-διαστάσεις, ελαττώνοντας σημαντικά τον αποθηκευτικό χώρο που καταλαμβάνει. Πέραν τούτου όμως, η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την ίδια την επίλυση προβλημάτων που διέπονται από ΜΔΕ. Σε συνήθεις εφαρμογές της Υπολογιστικής Μηχανικής, πόσο μάλλον της ΥΡΔ, απαιτείται η επίλυση μη-γραμμικών προβλημάτων, με ένα τεράστιο πλήθος αγνώστων ποσοτήτων. Για τη συμβατική επίλυση των εξισώσεων αυτών απαιτείται χωρική διακριτοποίηση του υπολογιστικού χωρίου (πολλές φορές της τάξης των μερικών εκατομμυρίων κόμβων ή κελιών/κυψελών).

Σε πολλές περιπτώσεις, όμως, μια καλή προσέγγιση της λύσης του προβλήματος που διέπεται από τη ΜΔΕ, βρίσκεται σε ένα υποσύνολο σημαντικά μικρότερης διάστασης από την πλήρη διάσταση του προβλήματος. Τα ROMs αξιοποιούν αυτό ακριβώς το χαρακτηριστικό, προσεγγίζοντας τη μειωμένη τάξη της λύσης του προβλήματος αρκετές φορές ταχύτερα από ότι με συμβατικές μεθόδους. Η μείωση του χρόνου εκτέλεσης αλλά και της απαιτούμενης μνήμης γίνεται πιο εμφανής με την αύξηση των ελεύθερων μεταβλητών.

Σε περιπτώσεις αριθμητικής επίλυσης ενός προβλήματος με πολλές ελεύθερες μεταβλητές (πολλούς αγνώστους), διατυπωμένο σε χώρο μεγάλης διάστασης, η μέθοδος PGD αποδομεί το πρόβλημα (ΜΔΕ), σε αρκετά απλούστερα, μονοδιάστατα προβλήματα (ΣΔΕ). Με αυτόν τον τρόπο αξιοποιείται η μειωμένη τάξη της λύσης, προσεγγίζοντας τη λύση του προβλήματος σημαντικά πιο γρήγορα από ότι με μια συμβατική μέθοδο.

Σε αυτό το κεφάλαιο, αναλύεται η μέθοδος της επίλυσης του συστήματος των 2Δ μη-γραμμικών εξισώσεων Burgers (2.1) με χρήση του PGD σε ορθοκανονικό πλέγμα (Σχήμα 2.1).

$$\begin{aligned} u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$



Σχήμα 2.1: Ορθοκανονικό πλέγμα, διάστασης $20m \times 20m$, με 21 κόμβους ανά κατεύθυνση.

Καθώς το σύστημα εξισώσεων Burgers αποτελείται από δύο ΜΔΕ, οι δύο άγνωστοι είναι τα δύο πεδία u και v . Όπως θα αναλυθεί παρακάτω, σε αντίθεση με μια συμβατική μέθοδο επίλυσης εξισώσεων, ο υπολογισμός ενός πεδίου με τη χρήση του PGD γίνεται βηματικά και επαναληπτικά, με κάθε βήμα να προσεγγίζει όλο και περισσότερο την πραγματική λύση. Ο τρόπος προσέγγισης του προβλήματος, έχει την ευελιξία να δέχεται πληθώρα τύπου οριακών συνθηκών. Κατά κύριο λόγο, στη διπλωματική εργασία χρησιμοποιούνται οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet στην είσοδο και στα στερεά τοιχώματα και τύπου μηδενικής Neumann στην έξοδο του πεδίου.

2.1 Επίλυση με Χρήση PGD

Η αρχική παρουσίαση της μεθόδου πραγματοποιείται στην επίλυση του συστήματος των 2Δ εξισώσεων Burgers, που περιέχει όρους οι οποίοι εμφανίζονται συχνά σε φαινόμενα ρευστομηχανικής. Η αρχική διατύπωση αφορά σε ένα απλό, ορθοκανονικό (δομημένο) πλέγμα, για να γίνουν ευκολότερα αντιληπτές οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται. Οι εξισώσεις (2.1) περιέχουν όρους διάχυσης (diffusion terms) και αγωγής (ή όροι μεταφοράς, convection terms), με τον αριθμό Reynolds να λειτουργεί ως παράμετρος στάθμισης μεταξύ των δύο, συνεπώς καθιστώντας την ιδιαίτερα σημαντική στον έλεγχο της μεθόδου PGD, διότι επιβεβαιώνει τη λειτουργία της γενικότερα σε προβλήματα ρευστομηχανικής, ανοίγοντας παράλληλα τον δρόμο για τη χρήση της μεθόδου λ.χ. στις εξισώσεις Euler ή Navier-Stokes. Το πρώτο βήμα της διαδικασίας είναι η αντικατάσταση της έκφρασης του πεδίου ροής u και v με την αντίστοιχη έκφραση κατά PGD,

όπου τα δύο πεδία αυτά θα αναπτυχθούν σε αθροίσματα βάσεων:

$$\begin{aligned} u(x, y) &= \sum_{i=1}^N X_{ui}(x)Y_{ui}(y) \\ v(x, y) &= \sum_{i=1}^N X_{vi}(x)Y_{vi}(y) \end{aligned} \quad (2.2)$$

όπου N ο συνολικός αριθμός χρησιμοποιούμενων βάσεων. Η λογική του PGD έχει ως εξής: Κάθε πεδίο μπορεί να δομηθεί από ένα άθροισμα γινομένων 1Δ , **διακριτοποιημένων** συναρτήσεων, ίσων στο πλήθος με τη διάσταση του προβλήματος (χώρος και χρόνος). Το άθροισμα αυτό δομείται σταδιακά, με κάθε στάδιο να ονομάζεται **κύκλος εμπλουτισμού** ή απλά **κύκλος**. Εντός αυτού του κύκλου, απαιτείται να υπολογισθούν οι κατάλληλες 1Δ συναρτήσεις, οι οποίες ούσες πεπλεγμένες, απαιτούν επαναληπτική διαδικασία για την εύρεσή τους. Η διαδικασία αυτή, από εδώ, και στο εξής θα ονομάζεται **εσωτερική επανάληψη** ή απλώς **επανάληψη**.

Δεδομένου ότι, μέσω των εξισώσεων (2.1), τα δύο πεδία είναι πεπλεγμένα, οι επιπλέον βάσεις θα προστίθενται ταυτόχρονα και στα δύο πεδία, καθώς είναι προφανές πως η αλλαγή στο ένα πεδίο επιφέρει αλλαγή και στο άλλο.

Η επίλυση του πεδίου γίνεται λοιπόν σταδιακά, όπως και στην περίπτωση της εκ των υστέρων συμπίεσης (Παράρτημα Β') σε κάποιον (ελπίζοντας σχετικά χαμηλό) αριθμό κύκλων. Η μέθοδος για τον υπολογισμό των συναρτήσεων-βάσεων αυτών είναι επαναληπτική ανά κύκλο και η διαδικασία που ακολουθεί αναφέρεται στην p επανάληψη κατά τον κύκλο υπολογισμού της n -οστής βάσης, θεωρώντας πως οι προηγούμενες $n - 1$ βάσεις είναι πλήρως γνωστές. Η τρέχουσα (p) επανάληψη και οι σχετιζόμενες με αυτή συναρτήσεις-βάσεις, θα συμβολίζεται με τον όρο *new*, και η προηγούμενη ($p - 1$) επανάληψη, με τον όρο *old*.

Συνεπώς, εμφανίζονται δύο ξεχωριστές διαδικασίες κατά τη διάρκεια επίλυσης του πεδίου:

- **Κύκλοι**, με εισαγωγή νέας ομάδας συναρτήσεων-βάσεων και
- **Επανάληψεις**, για τη σύγκλιση αυτών των συναρτήσεων-βάσεων, στο εσωτερικό κάθε κύκλου

Πριν ξεκινήσει η επίλυση του συστήματος των μη-γραμμικών εξισώσεων μέσω PGD, απαιτείται αυτό να γραμμικοποιηθεί. Κάτι τέτοιο μπορεί να γίνει με δύο διαφορετικούς τρόπους: είτε γραμμικοποιώντας πριν γίνει η ανάπτυξη των όρων του γινομένου, κατά τη λογική:

$$uu = (u_i + u_n)(u_i + u_n) \approx (u_i + u_n)u_i$$

όπου ο δείκτης i δηλώνει το πεδίο ως έχει προκύψει από τους $n - 1$ κύκλους, και ο δείκτης n την διόρθωση που επιφέρει ο τρέχων κύκλος, είτε μετά:

$$uu = (u_i + u_n)(u_i + u_n) = u_i u_i + 2u_i u_n + u_n u_n \approx u_i u_i + 2u_i u_n$$

Σε κάθε περίπτωση, θεωρείται πως η διόρθωση που επιφέρει ο κάθε κύκλος είναι μικρή σε σχέση με το ήδη υπάρχον πεδίο, δηλαδή: $u_n < u_i$. Στη διπλωματική εργασία χρησιμοποιείται ο πρώτος τρόπος. Εάν γίνει άμεση αντικατάσταση των μεγεθών αυτών στην εξίσωση (2.1), θα προκύψει ένα μη-γραμμικό σύστημα διαφορικών εξισώσεων λόγω των όρων μεταφοράς. Έτσι, οι όροι μεταφοράς γραμμικοποιούνται και προσεγγίζονται στη μορφή PGD ως (λ.χ. ο όρος $u \frac{\partial u}{\partial x}$):

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = u_{n-1} \frac{\partial u_n}{\partial x} = \left[\sum_{i=1}^{n-1} X_i(x)Y_i(y) \right] \left[\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i(x)}{\partial x} Y_i(y) + \frac{\partial X_n(x)}{\partial x} Y_n(y) \right] \quad (2.3)$$

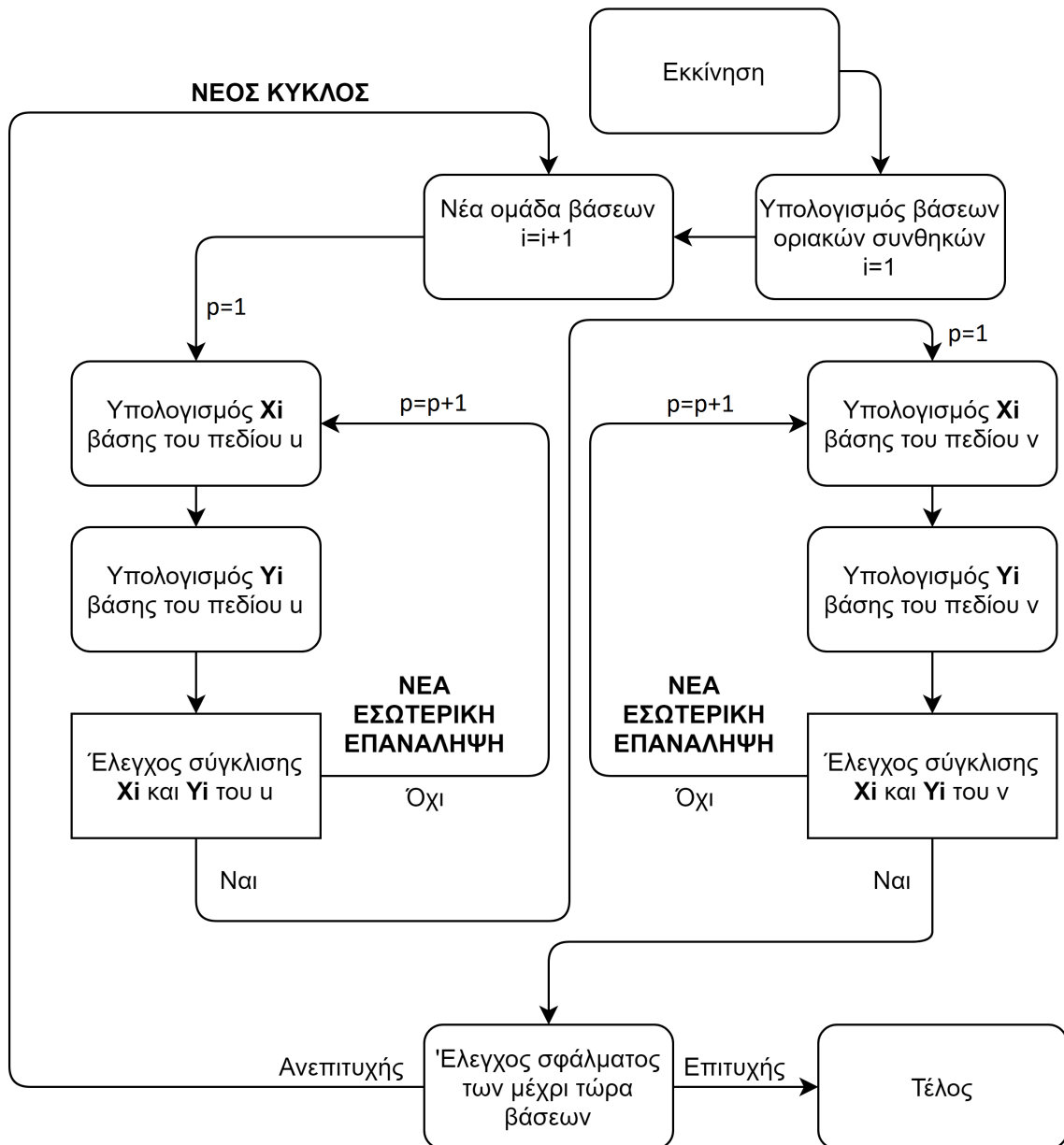
Από εδώ και στο εξής, οι μεταβλητές εντός των συναρτήσεων θα παραλείπονται ($X_i(x) \equiv X_i, Y_i(y) \equiv Y_i$). Στους όρους μεταφοράς, η μεταφέρουσα ποσότητα δεν λαμβάνεται στην πλήρη μορφή της αλλά προσεγγίζεται ως η τιμή του πεδίου που έχει ήδη υπολογισθεί από όλους τους προηγούμενους όρους, με τον μόνον άγνωστο στον όρο αυτόν του γινομένου να είναι μέσα στην παράγωγο. Μετά από επαρκή αριθμό κύκλων, θα έχει προστεθεί ένας επαρκής αριθμός ομάδων βάσεων και αναμένεται τα δύο πεδία να μην αλλάζουν σημαντικά, συνεπώς το τελικό πεδίο θα προσεγγίζει αυτό που θα προέκυπτε από την πλήρη επίλυση των μη-γραμμικών εξισώσεων.

Ο παραπάνω τρόπος, πέραν της γραμμικοποίησης της εξίσωσης, απεμπλέκει -ανά κύκλο- τις δύο εξισώσεις του συστήματος. Συνεπώς, μπορεί να επιλυθεί η πρώτη εξίσωση χωριστά από τη δεύτερη, εκτελώντας δύο επαναληπτικές διαδικασίες, με δύο πεπλεγμένες εξισώσεις στην καθεμία, αντί για μια διαδικασία με τέσσερις πεπλεγμένες εξισώσεις.

Όπως και για τη συμπίεση ενός δεδομένου πεδίου (Παράρτημα Β') γίνεται η χρήση της προβολής Galerkin (Παράρτημα Α'), έτσι και εδώ, για να βρεθούν οι συναρτήσεις που να ελαχιστοποιούν το υπόλοιπο των δύο εξισώσεων, γίνεται χρήση της προβολής Galerkin.

Ένα χαρακτηριστικό της μεθόδου PGD είναι ότι οι εξισώσεις και οι οριακές συνθήκες μπορούν να διατυπωθούν ανεξάρτητα και να γίνει η διαχείρισή τους ως διαφορετικές οντότητες, που «αλληλεπιδρούν» κατά την επίλυση του πεδίου. Η εφαρμογή των εξισώσεων που αναπτύσσονται σε αυτήν την ενότητα γίνεται με την επιβολή οριακών συνθηκών τύπου Dirichlet και Neumann (2.4), όπως αυτή διατυπώνεται στα αντίστοιχα κεφάλαια εφαρμογών (Κεφ. 3, Κεφ. 5). Μπορούν όμως να εφαρμοστούν οποιεσδήποτε οριακές συνθήκες, με τις εξισώσεις που περιγράφουν το πεδίο στους εσωτερικούς κόμβους να παραμένουν αμετάβλητες. Περαιτέρω ανάλυση του θέματος πραγματοποιείται στην Ενότητα 2.4. Η ανάλυση που ακολουθεί, αφορά τον n -οστό κύκλο, θεωρώντας πως όλες οι προηγούμενες συναρτήσεις βάσης εκτός της τρέχουσας είναι γνωστές από την επαναληπτική διαδικασία.

Εν συντομία, ο αλγόριθμος επίλυσης παρουσιάζεται στο σχήμα 2.2, του οποίου η λογική μπορεί να γενικευτεί για οποιοδήποτε σύστημα ΜΔΕ.



Σχήμα 2.2: Αλγόριθμος επίλυσης 2D συστήματος εξισώσεων Burgers.

2.2 Υπολογισμός του Πεδίου u

Για την διατύπωση των εξισώσεων υπολογισμού του πεδίου u θα χρησιμοποιηθεί η πρώτη (κατά x) εξίσωση του συστήματος εξισώσεων (2.1). Αντικαθιστώντας τη μορφή του πεδίου κατά PGD για τις πρώτες n βάσεις και γραμμικοποιώντας τους όρους όπως προαναφέρθηκε, προκύπτει η έκφραση της εξίσωσης για τη n -οστή βάση. Θεωρείται πως όλες οι προηγούμενες $n - 1$ βάσεις

έχουν ήδη υπολογιστεί. Είναι:

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{i=1}^{n-1} X_{ui} Y_{ui} \right] \left[\frac{\partial X_{un}}{\partial x} Y_{un} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_{ui}}{\partial x} Y_{ui} \right] + \\
& + \left[\sum_{i=1}^{n-1} X_{vi} Y_{vi} \right] \left[X_{un} \frac{\partial Y_{un}}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} X_{ui} \frac{\partial Y_{ui}}{\partial y} \right] = \\
& = \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 X_{un}}{\partial x^2} Y_{un} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 X_{ui}}{\partial x^2} Y_{ui} \right] + \frac{1}{Re} \left[X_{un} \frac{\partial^2 Y_{un}}{\partial y^2} + \sum_{i=1}^{n-1} X_{ui} \frac{\partial^2 Y_{ui}}{\partial y^2} \right]
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Για να υπολογισθούν οι ζητούμενες συναρτήσεις -στη συγκεκριμένη περίπτωση, η X_{un} και η Y_{un} - χρησιμοποιείται η προβολή Galerkin, με συνάρτηση βάσης τις $u^* = Y_{un}$ και $v^* = X_{un}$ αντίστοιχα, και ολοκλήρωση της προκύπτουσας έκφρασης στη διεύθυνση y και x , αντίστοιχα.

Στο τρέχον στάδιο, οι μοναδικοί άγνωστοι είναι οι δύο συναρτήσεις X_{un} και Y_{un} . Ο υπολογισμός τους θα γίνει με τη χρήση των εσωτερικών επαναλήψεων που προαναφέρθηκαν, δηλαδή θα υπολογισθεί το X_{un}^{new} από το Y_{un}^{old} , και το Y_{un}^{new} από το X_{un}^{new} , με τους όρους *new* και *old* να αναφέρονται στις συναρτήσεις που έχουν υπολογιστεί στην τρέχουσα επανάληψη και στην προηγούμενη αντίστοιχα, όντας ταυτόσημοι με τους όρους p και $p - 1$. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ο υπολογισμός κάθε ομάδας βάσεων γίνεται απεμπλεγμένα ανά πεδίο u και v . Έτσι, γίνεται να χωριστεί μαθηματικά η διαδικασία σε δύο βήματα ανά υπολογισμό πεδίου, δηλαδή δύο βήματα για το πεδίο u (υπολογισμός X_{un} και Y_{un}) και άλλα δύο βήματα για το πεδίο v (υπολογισμός X_{vn} και Y_{vn}), δίνοντας τελικά τέσσερα βήματα, τα οποία ανά δύο δομούν μια εσωτερική επανάληψη. Από εδώ και στο εξής, όλοι οι όροι αναφέρονται στο πεδίο που αναζητείται (u ή v) στο τρέχον βήμα, εκτός και αν οι δείκτες τους δηλώνουν διαφορετικά.

• **Βήμα 1ο, εύρεση $X_{un}^{new}(x)$, από $Y_{un}^{old}(y), X_{vn}^{old}(x), Y_{vn}^{old}(y)$**

Εφαρμόζοντας την προβολή Galerkin στην εξίσωση (2.4) με συνάρτηση βάρος την $u^* = Y_{un}^{old}$ και ολοκληρώνοντας στην y κατεύθυνση και με αναδιάταξη των όρων λαμβάνεται:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_i Y_n^2 dy X_i \frac{\partial X_n}{\partial x} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i Y_j dy \frac{\partial X_j}{\partial x} X_i + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{vi} \frac{\partial Y_n}{\partial y} dy X_{vi} X_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{vj} \frac{\partial Y_i}{\partial y} dy X_{vj} X_i = \\
& = \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \frac{\partial^2 X_n}{\partial^2 x} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial^2 x} + \\
& + \frac{1}{Re} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial^2 y} dy X_n + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_i}{\partial^2 y} dy X_i
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Τελικώς, θέτοντας:

$$\begin{aligned} A_x &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_i Y_n^2 dy X_i & B_x &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{vi} \frac{\partial Y_n}{\partial y} dy X_{vi} \\ C &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy & D &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial^2 y} dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} RHS_x &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i Y_j dy \frac{\partial X_j}{\partial x} X_i - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{vj} \frac{\partial Y_i}{\partial y} dy X_{vj} X_i + \\ &+ \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial^2 x} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_i}{\partial^2 y} dy X_i \end{aligned}$$

όπου ο δείκτης x δηλώνει πως το μέγεθος είναι συνάρτηση της μεταβλητής αυτής, προκύπτει η $\Sigma\Delta E$ που περιγράφει τη συνιστώσα X_n του μεγέθους u (δηλαδή το X_{un}):

$$\boxed{(B_x - D) X_n + A_x \frac{\partial X_n}{\partial x} - C \frac{\partial^2 X_n}{\partial^2 x} = RHS_x} \quad (2.6)$$

η οποία μπορεί να διακριτοποιηθεί με πεπερασμένες διαφορές και το αντίστοιχο σχήμα διακριτοποίησης (βλ. Ενότητα 2.5) και να επιλυθεί με τις αντίστοιχες οριακές συνθήκες.

- **Βήμα 2ο, εύρεση $Y_{un}^{new}(y)$, από $X_{un}^{new}(x)$, $X_{un}^{old}(x)$, $Y_{vn}^{old}(y)$**

Ομοίως με πριν, εφαρμογή της προβολής Galerkin στην εξίσωση 2.4 με συνάρτηση βάσης την $u^* = X_n$ και ολοκλήρωση κατά τη διεύθυνση x , προκύπτει:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i \frac{\partial X_n}{\partial x} dx Y_i Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_i \frac{\partial X_j}{\partial x} dx Y_i Y_j + \\ &+ \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n^2 X_{vi} dx Y_{vi} \frac{\partial Y_n}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_{vi} X_j dx Y_{vi} \frac{\partial Y_j}{\partial y} = \\ &= \frac{1}{Re} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} dx Y_n + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n \frac{\partial X_i}{\partial x} dx Y_i + \\ &+ \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Θέτοντας ως:

$$\begin{aligned} A_y &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i \frac{\partial X_n}{\partial x} dx Y_i & B_y &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n^2 X_{vi} dx Y_{vi} \\ C &= \frac{1}{Re} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} dx & D &= \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_y = & - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_i \frac{\partial X_j}{\partial x} dx Y_i Y_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} X_n X_{vi} X_j dx Y_{vi} \frac{\partial Y_j}{\partial y} + \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n \frac{\partial X_i}{\partial x} dx Y_i + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2}
\end{aligned}$$

προκύπτει η ΣΔΕ υπολογισμού της συνιστώσας Y_n του μεγέθους u (δηλαδή το Y_{un}):

$$\boxed{(A_y - C) Y_n + B_y \frac{\partial Y_n}{\partial y} - D \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} = RHS_y} \quad (2.8)$$

που μπορεί να διακριτοποιηθεί και να επιλυθεί με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.

Όπως αναφέρθηκε, τα δύο παραπάνω βήματα θα δομήσουν μια εσωτερική επανάληψη, επιλύοντας διαδοχικά τις εξισώσεις (2.6) και (2.8) έως ότου επιτευχθεί σύγκλιση, όπως αυτή αναφέρεται στην αντίστοιχη Ενότητα 2.6.

2.3 Υπολογισμός του Πεδίου v

Με όμοιο τρόπο, αναπτύσσεται η ΣΔΕ που περιγράφει το πεδίο v , με τη χρήση της κατά y εξίσωσης Burgers του συστήματος. Με αντικατάσταση των κατά PGD μορφών στα πεδία u και v , προκύπτει:

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{i=1}^{n-1} X_{ui} Y_{ui} \right] \left[\frac{\partial X_{vn}}{\partial x} Y_{vn} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_{vi}}{\partial x} Y_{vi} \right] + \\
& + \left[\sum_{i=1}^{n-1} X_{vi} Y_{vi} \right] \left[X_{vn} \frac{\partial Y_{vn}}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} X_{vi} \frac{\partial Y_{vi}}{\partial y} \right] = \\
& = \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 X_{vn}}{\partial x^2} Y_{vn} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 X_{vi}}{\partial x^2} Y_{vi} \right] + \frac{1}{Re} \left[X_{vn} \frac{\partial^2 Y_{vn}}{\partial y^2} + \sum_{i=1}^{n-1} X_{vi} \frac{\partial^2 Y_{vi}}{\partial y^2} \right]
\end{aligned} \quad (2.9)$$

Όπως και πριν, γίνεται χρήση της προβολής Galerkin, με συνάρτηση βάσης την $v^* = Y_n$ και ολοκλήρωση κατά την y κατεύθυνση όταν αναζητείται η X_n , και την $v^* = X_n$ και ολοκλήρωση κατά την x κατεύθυνση όταν αναζητείται η συνάρτηση Y_n :

- **Βήμα 3ο**, εύρεση $X_{vn}^{new}(x)$, από $Y_{vn}^{old}(y)$, $X_{un}^{new}(x)$, $Y_{un}^{new}(y)$

Εφαρμόζοντας την προβολή Galerkin στην εξίσωση (2.9), με συνάρτηση βάσης την $v^* = Y_{vn}^{old}$

και με ολοκλήρωση κατά την y κατεύθυνση, προκύπτει:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui} \frac{\partial X_n}{\partial x} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{ui} Y_j dy X_{ui} \frac{\partial X_j}{\partial x} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_i \frac{\partial Y_n}{\partial y} Y_n dy X_i X_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_i \frac{\partial Y_j}{\partial y} Y_n dy X_i X_j = \\
& = \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} + \\
& + \frac{1}{Re} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} dy X_n + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n dy \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} X_i
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Θέτοντας ως:

$$\begin{aligned}
A_x &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui} & B_x &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_i \frac{\partial Y_n}{\partial y} Y_n dy X_i \\
C &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy & D &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} dy
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_x &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_{ui} Y_j dy X_{ui} \frac{\partial X_j}{\partial x} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_y Y_i \frac{\partial Y_j}{\partial y} Y_n dy X_i X_j + \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n dy X_i
\end{aligned}$$

λαμβάνεται η $\Sigma\Delta\epsilon$ που περιγράφει τη συνιστώσα X_n του μεγέθους v (δηλαδή το X_{vn}):

$$\boxed{(B_x - D) X_n + A_x \frac{\partial X_n}{\partial x} - C \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} = RHS_x} \tag{2.11}$$

- **Βήμα 4ο, εύρεση $Y_{vn}^{new}(y)$, από $X_{vn}^{new}(x)$, $X_{un}^{new}(x)$, $Y_{un}^{new}(y)$**

Με όμοιο τρόπο με πριν, εφαρμόζοντας την προβολή Galerkin στην εξίσωση (2.9), με συνάρτηση βάσης αυτή τη φορά την $v^* = X_{vn}^{new}$ και με ολοκλήρωση κατά τη x κατεύθυνση, λαμβάνεται:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_i X_n^2 dx Y_i \frac{\partial Y_n}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_i X_j dx \frac{\partial Y_j}{\partial y} Y_i + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_{ui} \frac{\partial X_n}{\partial x} dx Y_{vi} Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_{uj} \frac{\partial X_i}{\partial x} dx Y_{vj} Y_i = \\
& = \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} + \\
& + \frac{1}{Re} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} dx Y_n + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} dx Y_i
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Θέτοντας:

$$\begin{aligned}
 A_y &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_i X_n^2 dx Y_i & B_y &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_{vi} \frac{\partial X_n}{\partial x} dx Y_{vi} \\
 C &= \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx & D &= \frac{1}{Re} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_n}{\partial^2 x} dx \\
 RHS_y &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_i X_j dx \frac{\partial Y_j}{\partial y} Y_i - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_x X_n X_{vj} \frac{\partial X_i}{\partial x} dy Y_{vj} Y_i + \\
 &\quad + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial^2 y} + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_i}{\partial^2 x} dx Y_i
 \end{aligned}$$

κλείνει ο κύκλος υπολογισμού με την επίλυση της ΣΔΕ που υπολογίζει τη συνάρτηση Y_n του μεγέθους v (δηλαδή το Y_{vn}):

$$\boxed{(B_y - D) Y_n + A_y \frac{\partial Y_n}{\partial y} - C \frac{\partial^2 Y_n}{\partial^2 y} = RHS_y} \quad (2.13)$$

Παρατηρείται πως οι εξισώσεις που υπολογίζουν τα X_{un}, Y_{vn} είναι πλήρως συμμετρικές. Ομοίως και οι εξισώσεις υπολογισμού των Y_{un}, X_{vn} . Σε προγραμματιστικό επίπεδο, αυτή η ιδιότητα διευκολύνει σημαντικά την επίλυσή τους, καθώς μπορεί να χρησιμοποιηθούν οι ίδιες ρουτίνες κώδικα, με αντίστροφα ορίσματα (λ.χ. μια ρουτίνα για τα X_{un}, Y_{vn} και άλλη μια για τα Y_{un}, X_{vn}).

2.4 Εφαρμογή Οριακών Συνθηκών

Οι προαναφερθείσες ΜΔΕ συμπληρώνονται από τις αντίστοιχες οριακές συνθήκες τους, οι οποίες έχουν απλώς αναφερθεί, χωρίς ακόμα να δίνεται έμφαση σε αυτές ή να αναλύεται ο τρόπος επιβολής τους.

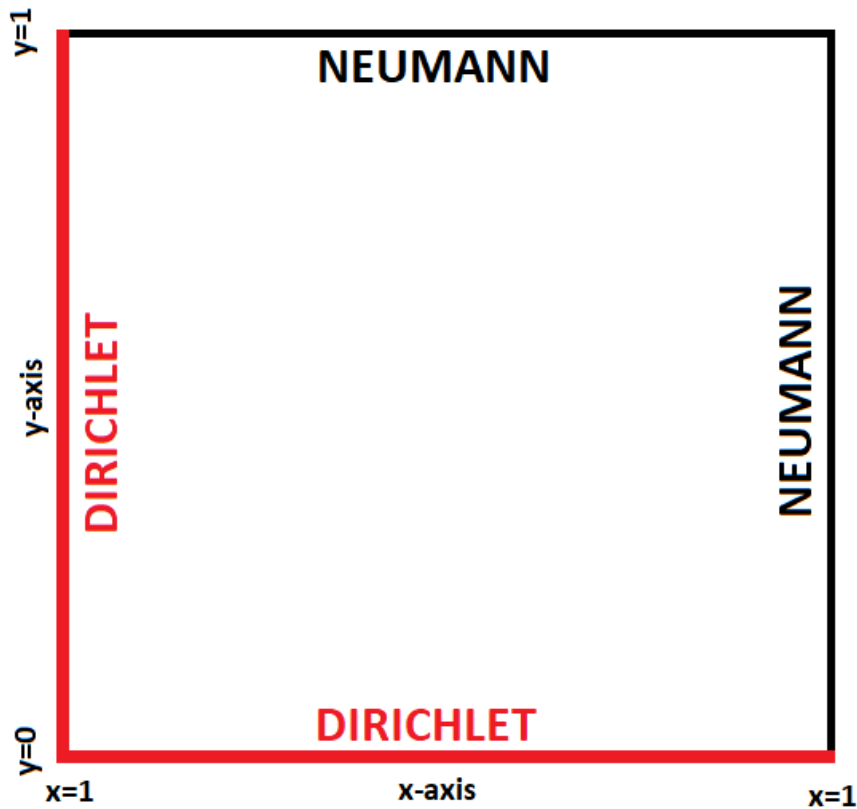
Η διαφορά με το πολυδιάστατο πρόβλημα που διέπεται από τις οριακές συνθήκες που επιβάλλουν οι νόμοι της φυσικής είναι ότι, πλέον, πρέπει να εφαρμοστούν οι ίδιες οριακές συνθήκες σε πολλά 1Δ προβλήματα.

Όπως έχει προαναφερθεί, στην «είσοδο» του πεδίου εφαρμόζονται οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet, και Neumann στην «έξοδο».

Παρακάτω, αναπτύσσεται ο τρόπος με τον οποίον επιβάλλονται οριακές συνθήκες ενός προβλήματος στο PGD.

2.4.1 Τύπου Dirichlet

Ας υποθεθεί, για ευκολία κατανόησης, πως το πεδίο στο οποίο επιβάλλονται οι οριακές συνθήκες είναι το χωρίο $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3 (περίπτωση δανεισμένη από τα παραδείγματα που θα ακολουθήσουν στο Κεφ. 3):



Σχήμα 2.3: Συμβολικό πεδίο των θέσεων των οριακών συνθηκών σε ορθοκανονικό πλέγμα, όμοιο με αυτό που θα χρησιμοποιηθεί στο Κεφ. 3.

Οι οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet επιβάλλουν μια γνωστή τιμή σε οριακούς κόμβους του υπολογιστικού πεδίου, δηλαδή (λ.χ. στην είσοδο ενός πεδίου, όπου $x = 0$):

$$u(0, y) = f_y(y) \quad (2.14)$$

με τη συνάρτηση $f_y(y)$ να έχει ή όχι σταθερή τιμή. Ο απλούστερος τρόπος να εφαρμοστεί η οριακή συνθήκη αυτή είναι να αφιερωθεί ένας αριθμός ζευγών βάσεων πριν εκκινήσει ο πρώτος κύκλος, δηλαδή να χρησιμοποιηθούν κάποιες βάσεις, οι οποίες θα ικανοποιούν πλήρως ΜΟΝΟ τις συνοριακές συνθήκες. Στην περίπτωση που έχουμε ένα παραλληλόγραμμο χωρίο, στο οποίο τα πεδία u και v διέπονται από οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet κατά μήκος του αριστερά και κάτω ορίου του σχήματος 2.3 (αυτά τα όρια θα ονομάζονται «είσοδος», όπως γίνεται στο παράδειγμα που ακολουθεί, Κεφ. 3), πρέπει να επιβληθούν οι εξής οριακές συνθήκες στις πλευρές αυτές:

$$\begin{aligned} u(0, y) &= c_1(y) \\ v(0, y) &= c_2(y) \\ u(x, 0) &= c_3(x) \\ v(x, 0) &= c_4(x) \end{aligned} \quad (2.15)$$

όπου τα c_i είναι γνωστές συναρτήσεις. Ο πιο απλός τρόπος να δημιουργηθεί ένα πεδίο που να σέβεται τις συνθήκες αυτές ασχέτως με το τι τιμές λαμβάνει στα άλλα όρια και στο εσωτερικό, είναι να χρησιμοποιηθεί ένα ζεύγος βάσεων ανά μεταβλητή για το αριστερό όριο και άλλο ένα ζεύγος βάσεων ανά μεταβλητή για το κάτω όριο, ως εξής:

- Όριο $x = 0$:

$$X_{u1}(x) = \begin{cases} 1, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad X_{v1}(x) = \begin{cases} 1, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases}$$

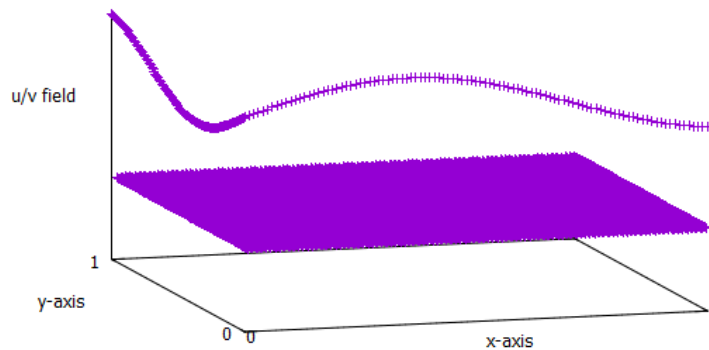
$$Y_{u1}(y) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_1(0), & y = 0 \\ c_1(y), & y \neq 0 \end{cases} \quad Y_{v1}(y) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_2(0), & y = 0 \\ c_2(y), & y \neq 0 \end{cases}$$

- Όριο $y = 0$:

$$X_{u2}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_3(0), & x = 0 \\ c_3(x), & x \neq 0 \end{cases} \quad X_{v2}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}c_4(0), & x = 0 \\ c_4(x), & x \neq 0 \end{cases}$$

$$Y_{u2}(y) = \begin{cases} 1, & y = 0 \\ 0, & y \neq 0 \end{cases} \quad Y_{v2}(y) = \begin{cases} 1, & y = 0 \\ 0, & y \neq 0 \end{cases}$$

Έτσι, το πεδίο που θα προκύψει από τις δύο πρώτες βάσεις θα έχει την μορφή (κατά αντιστοιχία με το παράδειγμα που παρουσιάζεται στο Κεφάλαιο 3) του σχήματος 2.4:



Σχήμα 2.4: Πεδίο οριακών συνθηκών τύπου *Dirichlet* από τις δύο πρώτες βάσεις του προβλήματος 3. Προσοχή στην ασυνέχεια που εισάγεται στις δύο πλευρές της εισόδου!

Ο όρος $\frac{1}{2}$ προστίθεται στα σημεία της θέσης $(0, 0)$ ώστε να υπάρχει ίση συνεισφορά από τους όρους που δομούν τις οριακές συνθήκες στην πλευρά $(0, y)$ και στη $(x, 0)$, δεδομένου πάντα ότι η οριακή συνθήκη εισόδου είναι συνεχής στο σημείο αυτό. Με αναδόμηση του πεδίου που δίνουν οι δύο ομάδες των παραπάνω δύο πρώτων βάσεων προκύπτει ένα πεδίο το οποίο έχει μηδενική τιμή παντού, εκτός από τα όρια στα οποία έχουν επιβληθεί οι συνθήκες *Dirichlet*, οι οποίες ικανοποιούνται πλήρως. Στη συνέχεια, σε όλες τις επόμενες βάσεις, στην πλευρά στην οποία έχουν επιβληθεί οι συνθήκες *Dirichlet*, θα επιβληθεί μηδενική τιμή στην αντίστοιχη συνάρτηση

βάσης, δηλαδή θα είναι:

$$\begin{aligned} Y_{ui}(0) = X_{ui}(0) &= 0, \quad i \geq 3 \\ Y_{vi}(0) = X_{vi}(0) &= 0, \quad i \geq 3 \end{aligned}$$

Αν και εξαιρετικά απλός στην χρήση, ο τρόπος αυτός ενδέχεται σε ορισμένες περιπτώσεις, λόγω της ασυνέχειας που εμφανίζεται στο πεδίο (2.4) (δηλαδή την ύπαρξη μη-μηδενικού μεγέθους είσοδο και μηδενικού στο εσωτερικό) να προκαλέσει προβλήματα κατά την επίλυση. Συνεπώς, προτείνονται και εναλλακτικοί τρόποι επιβολής των οριακών συνθηκών.

Εναλλακτικός τρόπος 1

Ο προαναφερθείς τρόπος μηδενίζει στα άκρα όλες τις συναρτήσεις-βάσεις (εκτός των δύο πρώτων) που σταδιακά δομούν τη λύση. Παρόλα αυτά, κάτι τέτοιο δύναται να βελτιωθεί περαιτέρω αξιοποιώντας την ιδιότητα του PGD να βελτιώνει σταδιακά τη λύση με την προσθήκη επιπλέον ομάδων βάσεων. Έτσι, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο ακόλουθος τρόπος. Έστω λοιπόν πως εφαρμόζεται συνθήκη τύπου Dirichlet μόνο στην αριστερή πλευρά του ορθογωνικού χωρίου, εκεί δηλαδή όπου $x = 0$, και ισχύει:

$$u(0, y) = c_1(y)$$

ή σε μορφή κατά PGD :

$$X_n(0)Y_n(y) + \sum_{i=1}^{n-1} X_i(0)Y_i(y) = c_1(y)$$

Υποθέτοντας πως οι $n - 1$ βάσεις είναι ήδη υπολογισμένες, πρέπει να βρεθεί η τιμή του $X_n(0)$ η οποία ικανοποιεί την εξίσωση, ή με λογική προβολής Galerkin, να ελαχιστοποιήσει το σφάλμα της. Με εφαρμογή της μεθόδου, δηλαδή με πολλαπλασιασμό με την άλλη συνάρτηση που δομεί το πεδίο του νέου κύκλου (Y_n) και ολοκλήρωση κατά την y διεύθυνση, λαμβάνεται η ακόλουθη μορφή:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n(y)Y_i(y)dy X_i(0) + \int_y Y_n^2(y)dy X_n(0) = \int_y Y_n(y)c_1(y)dy$$

Και με όλα τα μεγέθη γνωστά εκτός της τιμής του $X_n(0)$, η τιμή αυτή υπολογίζεται ως:

$$X_n(0) = \frac{\int_y Y_n(y)c_1(y)dy - \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n(y)Y_i(y)dy X_i(0)}{\int_y Y_n^2(y)dy}$$

Με αυτόν τον τρόπο, αντί να ικανοποιούνται πλήρως οι οριακές συνθήκες με τις πρώτες δύο βάσεις, ικανοποιούνται κατά τη σταδιακή δόμηση του πεδίου, παράλληλα με τους εσωτερικούς κόμβους. Έτσι, δεν χρειάζεται να αφιερωθεί ένας αριθμός βάσεων για την επιβολή οριακών συνθηκών. Δηλαδή εν τέλει πραγματοποιούνται δύο προβολές Galerkin, μια για τις οριακές συνθήκες, και μια για τους εσωτερικούς κόμβους. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, ο βαθμός ικανοποίησης των οριακών συνθηκών να καθορίζεται από το σφάλμα σύγκλισης που ορίζει ο χρήστης (Ενότητα 2.7), και να μην είναι δεδομένος όπως στην προηγούμενη μέθοδο. Ο συγκεκριμένος τρόπος δεν χρησιμοποιείται στην εργασία αυτή, αλλά προτείνεται για μελλοντικές εφαρμογές.

Εναλλακτικός τρόπος 2

Για τους λόγους που προαναφέρθηκαν, ο αρχικός τρόπος επιβολής οριακών συνθηκών παρουσιάζει ορισμένα προβλήματα σε κάποιες περιπτώσεις λόγω της ασυνέχειας που εμφανίζεται στο πεδίο. Αν και οι δύο προηγούμενοι τρόποι είναι πολύ αποδοτικοί από την άποψη της απαιτούμενης μνήμης (ο πρώτος χρειάζεται μόνο δύο (2) επιπλέον ζεύγη βάσεων για να διατυπώσει τις οριακές συνθήκες, ενώ ο δεύτερος κανένα επιπλέον ζεύγος), αξίζει να αναφερθεί και άλλος ένας τρόπος επιβολής οριακών συνθηκών, λιγότερο αποδοτικός από πλευρά μνήμης, αλλά πιο ασφαλής, που έχει προταθεί και παλαιότερα [2]:

Έστω πως το προς επίλυση πρόβλημα περιγράφεται από την εξίσωση:

$$\begin{cases} R(u(x, y)) = 0, & \forall (x, y) \in \Omega \\ u(x, y) = f(x, y), & \forall (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.16)$$

όπου με $\partial\Omega$ συμβολίζεται το όριο του χωρίου.

Το πεδίο που προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης (2.16), δύναται να γραφεί ως επαλληλία δύο διαφορετικών πεδίων, δηλαδή:

$$u(x, y) = u_1(x, y) + u_2(x, y) \quad (2.17)$$

για τα οποία θα ισχύει:

$$u_1(x, y) = f(x, y), \forall (x, y) \in \partial\Omega \quad (2.18)$$

$$\begin{cases} R(u_1(x, y) + u_2(x, y)) = 0, & \forall (x, y) \in \Omega \\ u_2(x, y) = 0, & \forall (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.19)$$

Όπως φαίνεται, η εξίσωση περιγραφής του πρώτου πεδίου αφήνει αυθαίρετη τιμή στο εσωτερικό του. Ένας τρόπος να ικανοποιηθούν οι παραπάνω δύο εξισώσεις είναι ο προαναφερθείς, κάνοντας δηλαδή χρήση ενός αριθμού βάσεων που ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες. Για να αρθεί όμως η ασυνέχεια στο πεδίο 2.4, αντί μηδενικής τιμής στο εσωτερικό του πεδίου που περιγράφεται από την εξίσωση (2.18), μπορεί το εσωτερικό του να ικανοποιήσει κάποια άλλη εξίσωση, στην οποία υπάρχει συνέχεια, λ.χ. Laplace. Με τη λύση της εξίσωσης (2.18), και έχοντας ένα συνεχές πεδίο το οποίο ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες, δύναται πλέον το πεδίο αυτό να συμπιεσθεί με τον τρόπο που αναφέρεται στο αντίστοιχο Παράρτημα Β' με τη χρήση m βάσεων:

$$u_1(x, y) = \sum_{j=1}^m X_j Y_j \quad (2.20)$$

Επόμενο στάδιο αποτελεί η συνέχεια της επίλυσης κατά τον PGD τρόπο που έχει αναφερθεί έως τώρα, λύνοντας πλέον την εξίσωση (2.19) με μηδενικές οριακές συνθήκες, με τη μόνη διαφορά πως η διαδικασία εμπλουτισμού θα εκκινήσει από τη βάση $m + 1$, δηλαδή στον n -οστό κύκλο της επίλυσης, το πεδίο θα περιγράφεται από την εξίσωση:

$$u(x, y) = \underbrace{\sum_{j=1}^m X_j Y_j}_{u_1} + \underbrace{\sum_{i=m+1}^{n-1} X_i Y_i + X_n Y_n}_{u_2} \quad (2.21)$$

Το πλεονέκτημα αυτού του τρόπου είναι ότι δίνει εξαρχής ένα ομαλό πεδίο (σε αντίθεση με τον πρώτο), το οποίο ικανοποιεί πλήρως τις οριακές συνθήκες (σε αντίθεση με τον δεύτερο), θυσιάζοντας όμως έναν αριθμό βάσεων. Να σημειωθεί πως αν οι οριακές συνθήκες για ένα πρόβλημα που περιέχει παραπάνω από ένα μεγέθη (λ.χ. u, v), είναι αρκετά διαφορετικές, ενδέχεται τα πεδία που θα προκύψουν να μην είναι στον ίδιο βαθμό διαχωρίσιμα, απαιτώντας για την εκ των υστέρων συμπίεση τους διαφορετικό αριθμό βάσεων, κάτι το οποίο πρέπει να ληφθεί υπόψη σε όλες τις εξισώσεις.

2.4.2 Τύπου Μηδενικής Neumann

Οι οριακές συνθήκες τύπου Neumann επιβάλλουν συγκεκριμένη τιμή (εδώ μηδενική) στην παράγωγο του πεδίου σε κάποιο όριό του. Εάν λ.χ. εφαρμοστούν σε ένα πεδίο $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ στο δεξί όριο (όπως δηλαδή φαίνεται και στο σχήμα 2.4), τότε θα ισχύει:

$$\frac{\partial u(1, y)}{\partial x} = 0$$

Ο πιο προφανής τρόπος εφαρμογής της συνοριακής συνθήκης αυτής (μηδενικής Neumann) είναι κάθε ομάδα βάσεων, συμπεριλαμβανομένου όσων χρησιμοποιήθηκαν με τον προαναφερθέντα τρόπο για επιβολή οριακών συνθηκών Dirichlet, να ικανοποιεί ξεχωριστά τη συνθήκη, δηλαδή:

$$\frac{\partial X_i(1, y)}{\partial x} = 0, \quad i = 1, n \quad (2.22)$$

Εναλλακτικός τρόπος

Ο εναλλακτικός τρόπος, όπως και στις προηγούμενες εφαρμογές, είναι τις οριακές συνθήκες να τις ικανοποιεί το σύνολο των βάσεων αθροιστικά, και όχι κάθε ομάδα βάσεων ξεχωριστά. Εάν δηλαδή σε κάποιο όριο του χωρίου (λ.χ. στο δεξί, όπου $x = 1$) επιβληθεί οριακή συνθήκη Neumann, δηλαδή:

$$\frac{\partial u(1, y)}{\partial x} = f_y^*(y)$$

όπου $f_y^*(y)$ όχι απαραίτητα μηδενικό, και γραφόμενο κατά PGD είναι:

$$\frac{\partial u(1, y)}{\partial x} = Y_n(y) \frac{\partial X_n(1)}{\partial x} + \sum_{i=1}^{n-1} Y_i(y) \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} = f_y^*(y)$$

Εφαρμόζοντας όπως και πριν την προβολή Galerkin λαμβάνεται η σχέση:

$$\int_y (Y_n(y))^2 dy \frac{\partial X_n(1)}{\partial x} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n(y) Y_i(y) dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} = \int_y Y_n(y) f_y^*(y) dy$$

της οποίας ο μόνος άγνωστος είναι η τιμή της παραγώγου στο άκρο του πεδίου

$$\frac{\partial X_n(1)}{\partial x} = \frac{\int_y Y_n(y) f_y^*(y) dy - \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n(y) Y_i(y) dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x}}{\int_y (Y_n(y))^2 dy}$$

Η συγκεκριμένη τιμή της παραγώγου της n -οστής βάσης δεν θα είναι εν γένει μηδενική, αλλά θα είναι τέτοια, ώστε το πεδίο ως άθροισμα n όρων να ικανοποιεί στο σημείο αυτό, όσο περισσότερο γίνεται τη συνθήκη Neumann. Είναι εμφανές πως ο συγκεκριμένος τρόπος μπορεί να επιβάλλει συνθήκες Neumann διάφορες της μηδενικής ($f_y^*(y) \neq 0$), σε αντίθεση με τον προαναφερθέντα.

2.5 Μέθοδοι Διακριτοποίησης

Ένα εξαιρετικά σημαντικό πεδίο στην ΥΡΔ είναι ο τρόπος με τον οποίον θα μεταδοθεί η πληροφορία της ροής μέσα σε αυτή. Λόγω της ύπαρξης όρων αγωγής/μεταφοράς, το είδος της ροής θα αλλάξει τον τρόπο επιβολής των οριακών συνθηκών. Κύριο παράδειγμα, στις 2Δ εξισώσεις Euler αποτελεί η διαφορά μεταξύ υποηχητικής και υπερηχητικής ροής. Στην πρώτη περίπτωση, στην είσοδο του πεδίου ροής επιβάλλονται τρεις οριακές συνθήκες, ενώ μια επιβάλλεται στην έξοδο, συνήθως με τη μορφή στατικής πίεσης. Αντίθετα, στην περίπτωση της υπερηχητικής ροής, όλες οι οριακές συνθήκες επιβάλλονται στην είσοδο του πεδίου. Κάτι τέτοιο μπορεί να εξηγηθεί με τον εξής απλό τρόπο. Η μετάδοση της οποιασδήποτε πληροφορίας σε ένα πεδίο, γίνεται μέσω του ρευστού, με την ταχύτητα του ήχου στο ρευστό αυτό. Σε μία υπερηχητική ροή, η πληροφορία στην έξοδο του πεδίου δεν «προλαβαίνει» ποτέ να φτάσει μέσα σε αυτό, συνεπώς δεν μπορεί να οριστεί σε αυτό το σημείο κάποια οριακή συνθήκη. Δεδομένης λοιπόν της ύπαρξης όλων των οριακών συνθηκών στην είσοδο του πεδίου, θα ήταν λάθος να χρησιμοποιηθεί μια διακριτοποίηση της παραγώγου του όρου μεταφοράς η οποία θα λαμβάνει πληροφορία από το πίσω μέρος του πεδίου. Έτσι, απαιτείται ένα κριτήριο το οποίο θα μπορεί να καθορίσει τον τύπο της διακριτοποίησης της παραγώγου ανάλογα με τα χαρακτηριστικά της ροής στον εκάστοτε κόμβο.

Στις εξισώσεις Euler κάτι τέτοιο γίνεται με τη χρήση των ιδιοτιμών του Ιακωβιανού μητρώου σε κάθε σημείο. Μια θετική ιδιοτιμή μεταφράζεται σε μεταφορά της πληροφορίας κατά την «θετική» κατεύθυνση, άρα χρήση πίσω παραγωγίσης, και το αντίθετο. Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή ως Flux Vector Splitting-FVS [6], και χρησιμοποιεί τα φυσικά μεγέθη της ροής ως παραμέτρους επιλογής του σχήματος παραγωγίσης.

Στην εργασία αυτή, δηλαδή στο 2Δ σύστημα Burgers, παρόλο που δεν υπάρχει με την αυστηρή έννοια του όρου ροή ρευστού, λόγω της ύπαρξης των όρων μεταφοράς, επιβάλλεται να γίνει χρήση ενός σχήματος παραγωγίσης, έτσι ώστε οι όροι αυτοί να μοντελοποιηθούν ορθά, και να υπάρξει επιτυχής μεταφορά της πληροφορίας της «ροής», άρα και επίλυση του πεδίου. Το κυριότερο πρόβλημα στο PGD έγκειται στο ότι ποτέ δεν λύνεται το πεδίο απευθείας, αλλά υπολογίζονται σταδιακά οι βάσεις που το δομούν, συνεπώς αλλάζουν τα μεγέθη που υπόκεινται σε παραγωγή (άρα και διακριτοποίηση), καθώς η επίλυση γίνεται επάνω σε συνιστώσες, και όχι στο ίδιο το πεδίο.

Ένας τρόπος που υπακούει στους προηγούμενους κανόνες κατεύθυνσης της πληροφορίας, είναι η χρήση του προσήμου του μεταφερόμενου μεγέθους για καθορισμό του τύπου της διακριτοποίησης, δηλαδή:

- Εάν στον όρο μεταφοράς $u \frac{\partial u}{\partial x}$ ο όρος u είναι θετικός, τότε η παράγωγος, με πρώτη τάξης ακρίβεια, θα διακριτοποιηθεί ως:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \quad (2.23)$$

- Αντίθετα, εάν ο όρος u είναι αρνητικός, τότε η παράγωγος, πάλι με πρώτη τάξης ακρίβεια,

διακριτοποιείται ως:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \quad (2.24)$$

Ο παραπάνω τρόπος μπορεί να «μεταφερθεί» στο PGD, χρησιμοποιώντας το πρόσημο του μεγέθους με το οποίο πολλαπλασιάζεται η παράγωγος του όρου μεταφοράς, δηλαδή, αν ο όρος είναι ο $A_x \frac{\partial X_n}{\partial x}$ τότε:

$$A_x \frac{\partial X_n}{\partial x} = \begin{cases} A_x \frac{X_n(x) - X_n(x - \Delta x)}{\Delta x}, & A_x(x) > 0 \\ A_x \frac{X_n(x + \Delta x) - X_n(x)}{\Delta x}, & A_x(x) < 0 \end{cases} \quad (2.25)$$

Προσοχή!: Στην εφαρμογή του PGD σε καμπυλόγραμμο πλέγμα, δηλαδή όταν:

$$A_\xi \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} = \begin{cases} A_\xi \frac{\Xi_n(\xi) - \Xi_n(\xi - \Delta \xi)}{\Delta \xi}, & A_\xi(\xi) > 0 \\ A_\xi \frac{\Xi_n(\xi + \Delta \xi) - \Xi_n(\xi)}{\Delta \xi}, & A_\xi(\xi) < 0 \end{cases} \quad (2.26)$$

δεν θα προέρχονται όλοι οι όροι πρώτης παραγώγου από όρους μεταφοράς.

Είναι εμφανές πως στην πρώτη περίπτωση, δηλαδή με θετική ταχύτητα, η πληροφορία στο πεδίο «ροής» μεταφέρεται με τη διεύθυνση της ταχύτητας. Αντίθετα, εάν η ταχύτητα είναι αρνητική, γίνεται το αντίθετο, δηλαδή η πληροφορία «ταξιδεύει» από το πίσω μέρος του πεδίου προς τα μπροστά. Ομοίως και στην περίπτωση του PGD (2.25), όπου όμως πλέον, παύουν να έχουν ισχύ τα φυσικά μεγέθη, και ως κριτήριο χρησιμοποιείται το μέγεθος που εμφανίζεται μπροστά στην παράγωγο της κατά PGD εξίσωσης.

Όσον αφορά τους όρους 2ης παραγώγου, αυτοί μοντελοποιούνται όλοι (ανεξαρτήτως αν είναι η τρέχουσα βάση ή των προηγούμενων κύκλων) μέσω κεντρικών διαφορών, δηλαδή, για το μέγεθος λ.χ. X_n :

$$\frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} = \frac{X_n(x + \Delta x) - 2X_n(x) + X_n(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (2.27)$$

Επίσης, οι όροι της πρώτης παραγώγου στους όρους μεταφοράς των προηγούμενων βάσεων, υπολογίζονται και αυτοί μέσω κεντρικών διαφορών όταν απαιτούνται για τον υπολογισμό των επομένων βάσεων (παρόλο που για τον υπολογισμό των ίδιων χρησιμοποιήθηκε το παραπάνω σχήμα διακριτοποίησης, δηλαδή είτε προς είτε πίσω παραγωγή):

$$\frac{\partial X_n}{\partial x} = \frac{X_n(x + \Delta x) - X_n(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (2.28)$$

Οι παραπάνω τρόποι διακριτοποίησης χρησιμοποιούνται καθόλη την εργασία αυτή, δηλαδή στο ορθοκανονικό πλέγμα (Κεφ.3), στο καμπυλόγραμμο (Κεφ.5), αλλά και στην επίλυση του συζυγούς προβλήματος (Κεφ. 6).

Η παραπάνω μέθοδος διακριτοποίησης στο PGD ενδέχεται να χρειαστεί να αναθεωρηθεί, και να επαναδιατυπωθεί μετά από διερεύνηση σε άλλα προβλήματα σε μελλοντικές εφαρμογές (λ.χ. εξισώσεις Euler, Navier-Stokes).

2.6 Σύγκλιση Εσωτερικών Επαναλήψεων

Δεδομένου ότι η διαδικασία υπολογισμού στο στάδιο των εσωτερικών επαναλήψεων (όταν η ομάδα των νέων βάσεων καλείται να συγκλίνει) περιλαμβάνει επαναληπτική διαδικασία, πρέπει να τεθεί ένα κριτήριο για να τερματιστεί όταν θα έχει επιτευχθεί η επιθυμητή ακρίβεια στο κάθε στάδιο.

Για τη σύγκλιση των εσωτερικών επαναλήψεων, το απλούστερο και πιο συνηθισμένο κριτήριο είναι της μορφής:

$$\begin{aligned} \log_{10} \sqrt{\int_x (X_n^{new}(x) - X_n^{old}(x))^2 dx} < \epsilon \\ \log_{10} \sqrt{\int_y (Y_n^{new}(y) - Y_n^{old}(y))^2 dy} < \epsilon \end{aligned} \quad (2.29)$$

όπου ϵ η ανοχή του σφάλματος (στην συγκεκριμένη εργασία, $\epsilon = -12$). Όταν ικανοποιηθούν οι παραπάνω εξισώσεις για το πρόβλημα που λύνεται, η διαδικασία εμπλουτισμού προχωρά στην επόμενη ομάδα βάσεων, δηλαδή στον επόμενο κύκλο, εκχωρώντας τις $X_n^p(x), Y_n^p(y)$ στις $X_n(x), Y_n(y)$ αντίστοιχα.

2.7 Σύγκλιση Βάσης - Κριτήρια Τερματισμού Κύκλων

Οι κύκλοι κατά τον υπολογισμό των πεδίων, δηλαδή η διαδικασία εμπλουτισμού του αθροίσματος με βάσεις, τερματίζονται όταν έχει προστεθεί ένας προκαθορισμένος από τον χρήστη αριθμός βάσεων, ή όταν ικανοποιηθεί ένα κριτήριο που έχει οριστεί. Το κριτήριο αυτό μπορεί να οριστεί με διάφορους τρόπους. Ένας από αυτούς είναι η σχετική βαρύτητα που ο νέος όρος έχει στη λύση, δηλαδή το πόσο θα αλλάξει ο νέος όρος (αν λ.χ. παραλειφθεί) την ήδη υπάρχουσα λύση του αθροίσματος των προηγούμενων βάσεων με τη χρήση της κατάλληλης νόρμας:

$$e(m) = \log_{10} \left\{ \frac{\|X_n(x)Y_n(y)\|}{\|\sum_{i=1}^{n-1} X_i(x)Y_i(y)\|} \right\} \quad (2.30)$$

Ο παραπάνω ορισμός απαιτεί την αναδόμηση όλων των $n-1$ όρων από τις 1Δ συναρτήσεις-βάσεις τους, το οποίο υπολογιστικά αποτελεί μειονέκτημα. Ένας παρόμοιος ορισμός κριτηρίου που δεν περιλαμβάνει τον επιπλέον αυτό αριθμό πράξεων, είναι να οριστεί η σχετική βαρύτητα που θα έχει ο τελευταίος όρος επί του πρώτου όρου (εκτός αυτών που δομούν τις οριακές συνθήκες), δεδομένου ότι στις περισσότερες περιπτώσεις, αυτοί δίνουν τη μεγαλύτερη πληροφορία για την αναδόμηση του πεδίου. Συνεπώς, το κριτήριο μπορεί να οριστεί και ως:

$$e^*(m) = \log_{10} \left\{ \frac{\|X_n(x)Y_n(y)\|}{\|X_{k+1}(x)Y_{k+1}(y)\|} \right\} \quad (2.31)$$

όπου $k + 1$ ο αριθμός του κύκλου στον οποίο γίνεται η πρώτη επίλυση με PGD (k ο αριθμός των βάσεων που χρησιμοποιούνται για την αποτύπωση οριακών συνθηκών).

Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιηθεί εξολοκλήρου η πρώτη διατύπωση του κριτηρίου. Για τις ανάγκες της εργασίας, θα ονομαστεί «**Σχετικό σφάλμα βάσεως**», παρόλο που δεν είναι με την αυστηρή έννοια σφάλμα, αλλά -όπως και ένα σφάλμα- ικανοποιείται όταν η τιμή του γίνει αρκετά μικρή.

2.8 Έλεγχος Τάξης Μεγέθους των Βάσεων

Η μέθοδος PGD δομεί σταδιακά το πεδίο ροής ως ένα γινόμενο q βάσεων, όπου q η διάσταση του πεδίου. Η διαδικασία για να υπολογιστεί η n -οστή βάση είναι επαναληπτική, κάτι που σημαίνει πως λαμβάνονται υπόψη και όλες οι προηγούμενες υπολογισμένες βάσεις της επανάληψης στην επίλυση. Επειδή η διόρθωση του πεδίου που θα προσφέρει κάθε ομάδα βάσεων αποτελείται από ένα γινόμενο συναρτήσεων, μπορεί να παρατηρηθεί μετά από δοκιμές το εξής πρόβλημα:

Κατά την επίλυση, ενδέχεται, κατά τη διάρκεια μιας εσωτερικής επανάληψης, μια βάση να ελαττωθεί σε μέγεθος. Αυτό άμεσα σημαίνει πως η πεπλεγμένη της βάση στην επαναληπτική διαδικασία, για να προσδώσει τη σωστή διόρθωση στο πεδίο θα αυξηθεί σε μέγεθος, ώστε το τελικό πεδίο να διατηρήσει μια σταθερή τιμή. Στο επόμενο στάδιο της επαναληπτικής διαδικασίας, η επόμενη βάση (δηλαδή η πρώτη σε περίπτωση ενός προβλήματος με δύο ελεύθερες μεταβλητές), θα «δει» την προηγούμενη σε μεγαλύτερη τάξη μεγέθους, και θα ελαττωθεί σε μέγεθος ακόμα περισσότερο, προσπαθώντας να αποδώσει τη σωστή τελική διόρθωση στο πεδίο. Είναι προφανές πως η διαδικασία αυτή αποτρέπει την κάθε βάση από το να συγκλίνει σε κάποια σταθερή συνάρτηση (το γινόμενό τους βέβαια συγκλίνει), γεγονός που -σε συνδυασμό με τις εξαιρετικά υψηλές και χαμηλές τιμές των βάσεων- να οδηγεί στην απόκλιση της διαδικασίας επίλυσης λόγω αριθμητικών σφαλμάτων, φαινόμενο το οποίο όντως παρατηρήθηκε κατά την ανάπτυξη της μεθόδου. Μια τέτοια συμπεριφορά είναι σχετικά αναμενόμενη, καθώς η προβολή Galerkin έχει σκοπό να δομήσει ένα νέο πεδίο, το $u_n = X_n(x)Y_n(y)$, το οποίο όταν προστεθεί στο ήδη υπάρχον ($u_{n-1} = \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i$) έχει σκοπό να ελαχιστοποιήσει το σφάλμα σε σχέση με τη τελική λύση του προβλήματος. Η ελαχιστοποίηση όμως καθορίζει τις τιμές του πεδίου, και όχι τις συνιστώσες που το δομούν, αφήνοντας έτσι έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας κατά την επίλυση. Κάτι τέτοιο μπορεί να αντιμετωπισθεί διατηρώντας την τάξη μεγέθους όλων των βάσεων που δομούν ένα πεδίο ίδια:

Έστω πως μελετάται ένα πρόβλημα με δύο ελεύθερες παραμέτρους, με την λύση να δομείται από το άθροισμα των συναρτήσεων βάσεων $X_i(x), Y_i(y)$. Σε κάποιο στάδιο της επαναληπτικής διαδικασίας, είναι γνωστές οι τιμές των $X_n(x), Y_n(y)$. Όπως αναφέρθηκε, η τάξη μεγέθους των βάσεων της τρέχουσας εσωτερικής επανάληψης πρέπει να είναι ίδια. Αρχικά, υπολογίζεται το RMS (Root Mean Square) της κάθε βάσης, το οποίο σε διακριτή μορφή είναι:

$$\begin{aligned} RMS_{X_n} &= \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_x} (X_n(i))^2}}{n_x} \\ RMS_{Y_n} &= \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_y} (Y_n(i))^2}}{n_y} \end{aligned} \quad (2.32)$$

όπου n_x και n_y ο αριθμός των κόμβων της κάθε βάσης. Με δεδομένα τα δύο παραπάνω μεγέθη, μπορεί να υπολογισθεί η διορθωμένη (κανονικοποιημένη) μορφή της κάθε συνάρτησης ως:

$$\begin{aligned} X_n^{corr}(x) &= \frac{\sqrt{RMS_{X_n} RMS_{Y_n}}}{RMS_{X_n}} X_n(x) \\ Y_n^{corr}(y) &= \frac{\sqrt{RMS_{X_n} RMS_{Y_n}}}{RMS_{Y_n}} Y_n(y) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Είναι εμφανές πως η μέθοδος αυτή αλλάζει μόνο το απόλυτο μέγεθος των τιμών της κάθε συνάρτησης, χωρίς να αλλάζει την τελική λύση, καθώς:

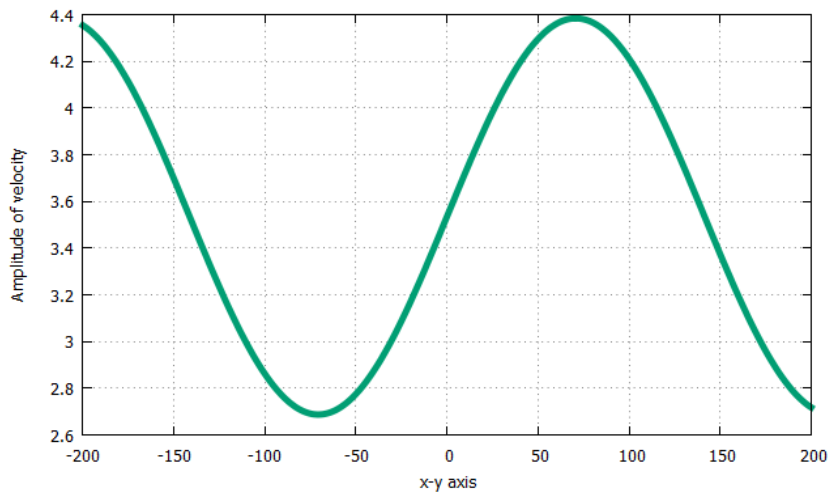
$$X_n^{corr}(x) Y_n^{corr}(y) = X_n(x) Y_n(y) \quad (2.34)$$

Κεφάλαιο 3

Επίλυση με PGD των 2Δ Εξισώσεων Burgers σε Ορθοκανονικό Πλέγμα

Για την εφαρμογή της μεθόδου που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα, επιλέγεται ένα πρόβλημα σε ορθοκανονικό πλέγμα (διάστασης 1 μέτρο ανά πλευρά, με 101 ή 201 κόμβους ανά πλευρά, με τις κυψέλες του συνεπώς να είναι τετραγωνικές) και ανοιχτό χωρίο (3.2), όπου η εισερχόμενη (από την αριστερή και την κάτω πλευρά του χωρίου) ταχύτητα (αν, δηλαδή, θεωρηθούν τα (u, v) ως οι συνιστώσες ενός 2Δ διανύσματος της ταχύτητας) είναι υπό γωνία 45° και με μέτρο που έχει μορφή ημιτονοειδούς κατανομής, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.1:

$$\begin{aligned} u &= \left[5 + 1.2 \sin\left(\frac{2\pi k}{\lambda}\right) \right] \cos(\phi) \\ v &= \left[5 + 1.2 \sin\left(\frac{2\pi k}{\lambda}\right) \right] \sin(\phi) \end{aligned} \quad (3.1)$$

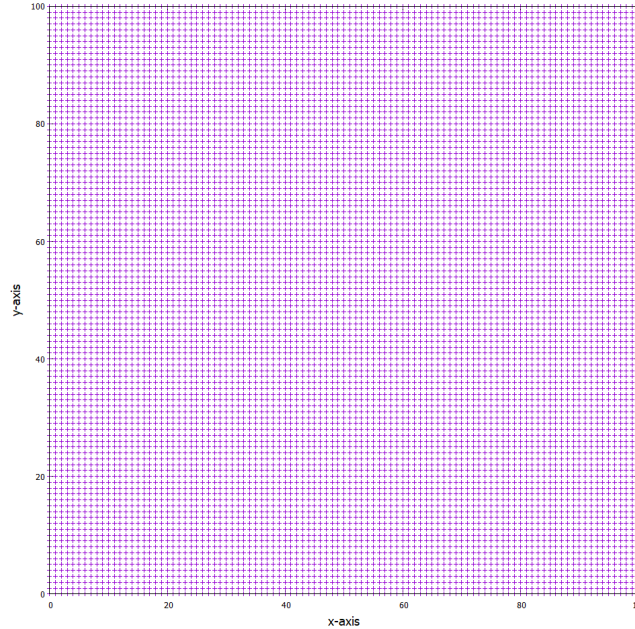


Σχήμα 3.1: Κατανομή του μέτρου του διανύσματος (u, v) στις δύο πλευρές εισόδου στο πεδίο. Η κατανομή αυτή θα χρησιμοποιηθεί και στα έξι παραδείγματα που θα ακολουθήσουν.

όπου το λ είναι παράμετρος της περιόδου της ημιτονοειδούς προβολής (στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιείται $\lambda = 0.5$) και ως k ορίζεται το μέγεθος:

$$k = \begin{cases} \frac{i-1}{\Lambda} \Delta x \cos(\phi), & y = 0 \\ \frac{-(i-1)}{\Lambda} \Delta y \cos(\phi), & x = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

με i τον αύξοντα αριθμό του κάθε κόμβου στην αντίστοιχη πλευρά, ϕ τη γωνία κλίσης (ως προς την οριζόντια κατεύθυνση) του διανύσματος (u, v) (στη συγκεκριμένη περίπτωση $\phi = 45^\circ$), $\Delta x, \Delta y$ η απόσταση δύο διαδοχικών πλεγματικών γραμμών ανά κατεύθυνση του πλέγματος και Λ είναι το άθροισμα των μηκών των δύο πλευρών (της αριστερής και της κάτω). Τέλος, να αναφερθεί πως η επίλυση γίνεται με **κεντροκομβική διατύπωση** σε όλες τις εφαρμογές της εργασίας αυτής.



Σχήμα 3.2: Ορθοκανονικό πλέγμα διάστασης $1m \times 1m$, με 101 κόμβους ανά πλευρά.

Με αυτόν τον τρόπο, επιβάλλονται στις δύο πλευρές εισόδου (κάτω και αριστερή) οριακές συνθήκες Dirichlet ενώ στις πλευρές εξόδου (πάνω και δεξιά) οριακές συνθήκες μηδενικής Neumann (όπως και αναλύθηκε στην αντίστοιχη Ενότητα (2.4.1)). Λόγω της γωνίας των 45° οι οριακές συνθήκες θα είναι ίδιες για τα δύο πεδία, συνεπώς κάθε συνιστώσα του διανύσματος στην είσοδο θα είναι ίδια. Επίσης, το κάθε στιγμιότυπο αναπαριστά ταυτοχρόνως και τα δύο πεδία u και v , δεδομένης της συμμετρίας. Το πλέγμα που χρησιμοποιείται ακολουθεί την ανάλυση της προηγούμενης ενότητας, δηλαδή είναι ορθοκανονικό, με ίσο ανά πλευρά αριθμό κόμβων. Θα παρουσιαστούν έξι διαφορετικές εκδοχές του προβλήματος και θα μελετηθεί η επίδραση του αριθμού των κόμβων του πλέγματος, και του αριθμού Reynolds στην σύγκλιση και στην ακρίβεια του αποτελέσματος. Ο αριθμός Reynolds αλλάζει τη μορφή του πεδίου, δηλαδή λιγότερο ή περισσότερο διαχωρίσιμη μορφή, λιγότερες ή περισσότερες βάσεις για να δομηθεί, όπως γίνεται εμφανές και με την εκ των υστέρων συμπίεση των πεδίων τα οποία προκύπτουν με τη χρήση PGD.

Με γνωστή την τελική λύση του προβλήματος (με τη χρήση ενός συμβατικού επιλύτη), δύναται να υπολογισθούν δύο είδη σφαλμάτων. Το πρώτο σφάλμα είναι το σφάλμα του πεδίου που προκύπτει από τον επιλύτη PGD σε σχέση με την τελική λύση που έχει προκύψει από τον συμβατικό επιλύτη (θα ονομάζεται **συνολικό σφάλμα - total error**), το οποίο ορίζεται ως:

$$\begin{aligned} \epsilon_{tot,u} &= \log_{10} \left[\frac{1}{n_x n_y} \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \left(u_{PGD} - u_{fin} \right)^2 \right] \\ \epsilon_{tot,v} &= \log_{10} \left[\frac{1}{n_x n_y} \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \left(v_{PGD} - v_{fin} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.3)$$

όπου u_{PGD} και v_{PGD} οι μέχρι στιγμής (n -οστή βάση) προσεγγίσεις των πεδίων κατά PGD

και u_{fin} και v_{fin} είναι οι λύσεις των πεδίων, όπως αυτή έχει προκύψει μέσω της χρήσης ενός συμβατικού επιλύτη πεπερασμένων διαφορών (θεωρούμενη ως η «αριθμητικά ακριβής λύση» ή η «λύση αναφοράς»). Τέλος, n_x και n_y είναι ο αριθμός των κόμβων ανά κατεύθυνση του πλέγματος.

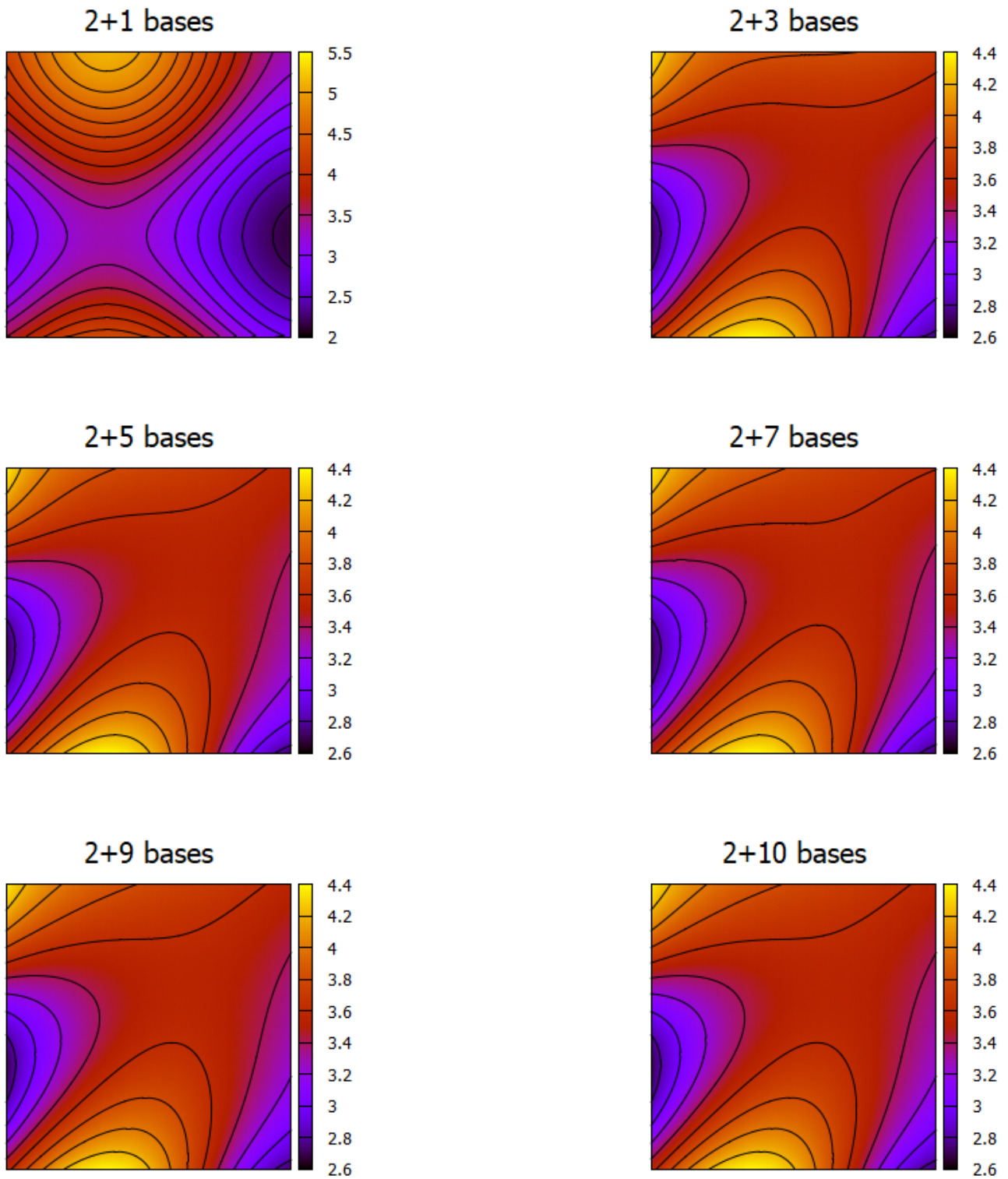
Το δεύτερο είδος σφάλματος είναι το σφάλμα σύγκλισης της κάθε βάσης σε σχέση με όλες τις προηγούμενες, ακριβώς όπως έχει προαναφερθεί στην Ενότητα 2.6 (θα ονομάζεται σφάλμα σύγκλισης βάσεων ή σχετικό σφάλμα σύγκλισης - Base Convergence Error). Όπως αναφέρεται στην Ενότητα 2.4.1, θα χρησιμοποιηθούν δύο βάσεις αποκλειστικά για τη διατύπωση των οριακών συνθηκών τύπου Dirichlet της εισόδου. Συνεπώς, η διαδικασία εμπλουτισμού εκκινεί από την τρίτη ($3 = 2 + 1$) βάση και μετά. Μετά την ικανοποίηση του αντίστοιχου κριτηρίου σφάλματος (το οποίο τίθεται στο συνολικό σφάλμα), οι κύκλοι προσθήκης ομάδων βάσεων τερματίζονται και προκύπτει το τελικό πεδίο του οποίου ο βαθμός προσέγγισης σε σχέση με την πλήρη λύση είναι αντίστοιχος της ανοχής σφάλματος που έχει επιλεγεί.

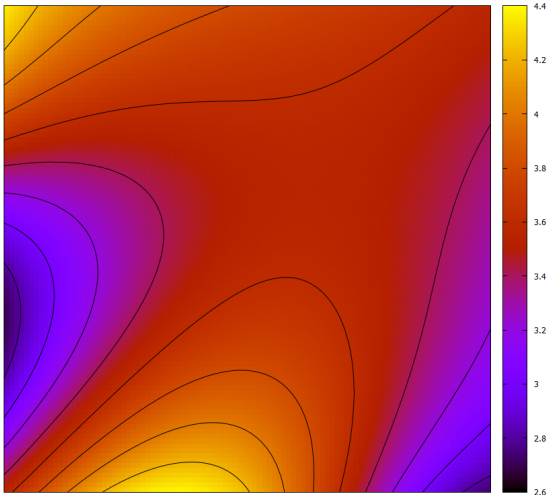
3.1 Επιλύσεις για Διάφορους Αριθμούς Re και Διαστάσεις Πλέγματος

Στις παρακάτω εφαρμογές θα γίνει η επίλυση των δύο πεδίων u και v της κάθε περίπτωσης με τη χρήση του PGD ως επιλύτη. Η τελική λύση σε κάθε περίπτωση, μπορεί να υπολογισθεί αριθμητικά με έναν συμβατικό επιλύτη ο οποίος χειρίζεται το πρόβλημα ως 2Δ και επιλύει ταυτόχρονα τις δύο πεπλεγμένες εξισώσεις. Αυτή η λύση χρησιμοποιείται και για να ορίσει το συνολικό σφάλμα μετά από κάθε κύκλο της διαδικασίας επίλυσης. Η λύση του πεδίου για τις τρεις διαφορετικές τιμές του αριθμού Reynolds ($Re = 1, 50, 1000$) και για τις διαφορετικές διαστάσεις του πλέγματος (101×101 και 201×201), για τις οποίες και γίνεται ο έλεγχος λειτουργίας του αλγορίθμου θα παρουσιάζονται δίπλα στην τελική λύση που προκύπτει μέσω PGD σε κάθε παράδειγμα.

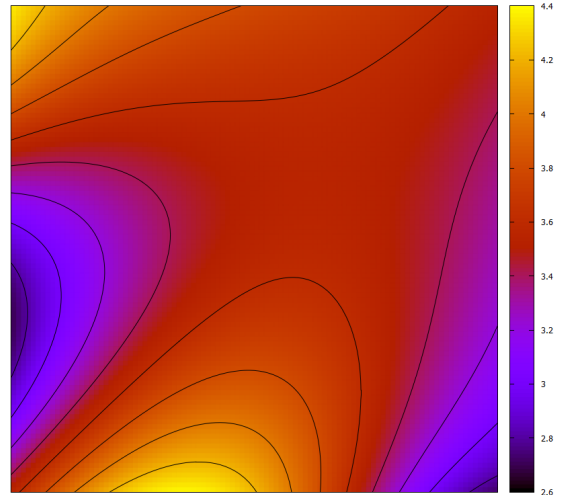
3.1.1 $Re=1$, Πλέγμα 101×101

Incremental construction of flowfield

Σχήμα 3.3: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re=1$, (101×101) .

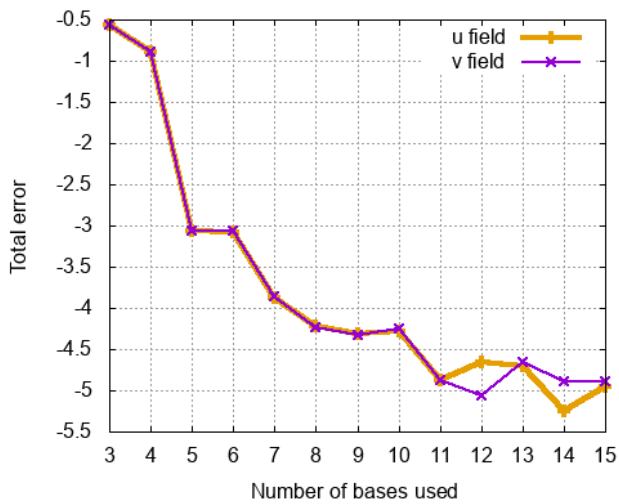


(α') Λύση με PGD.

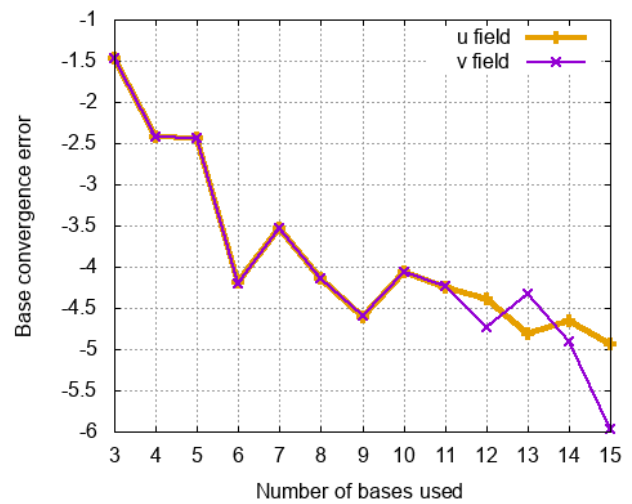


(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.4: Σύγκριση πεδίων για $Re=1$ σε Πλέγμα 101×101 .



(α') Συνολικό σφάλμα

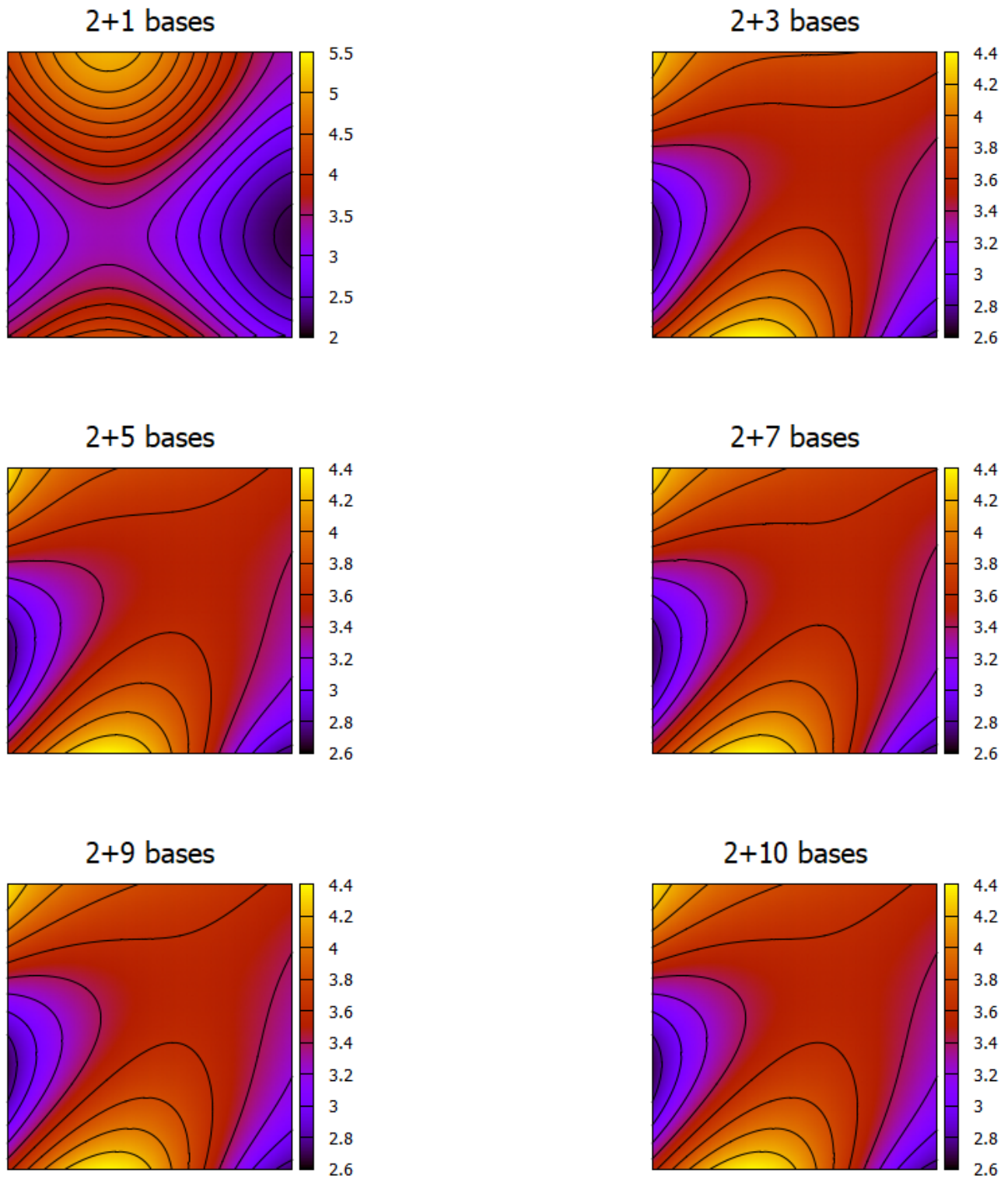


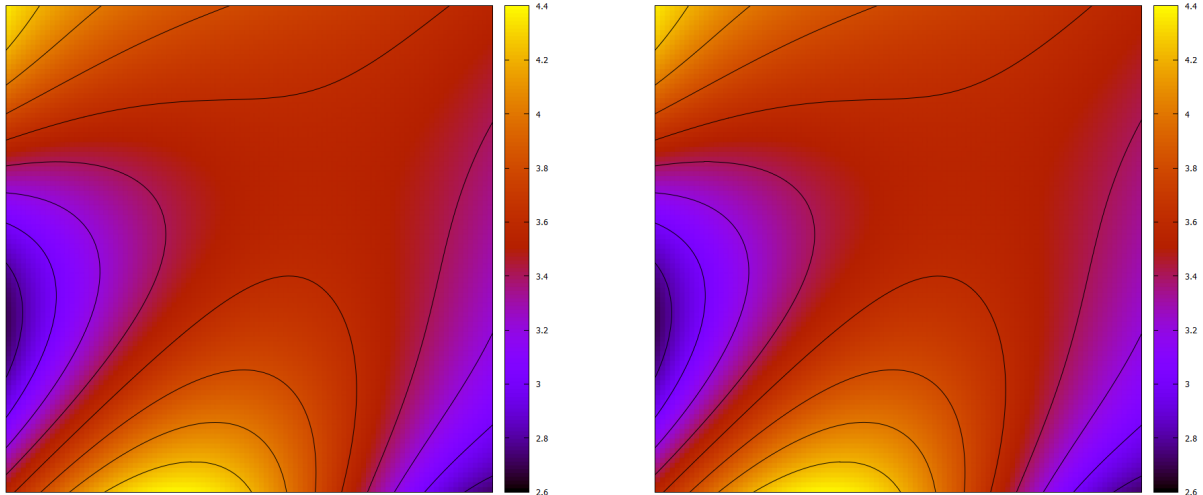
(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.5: Σφάλματα για $Re=1$ σε Πλέγμα 101×101 .

3.1.2 $Re=1$, Πλέγμα 201×201

Incremental construction of flowfield

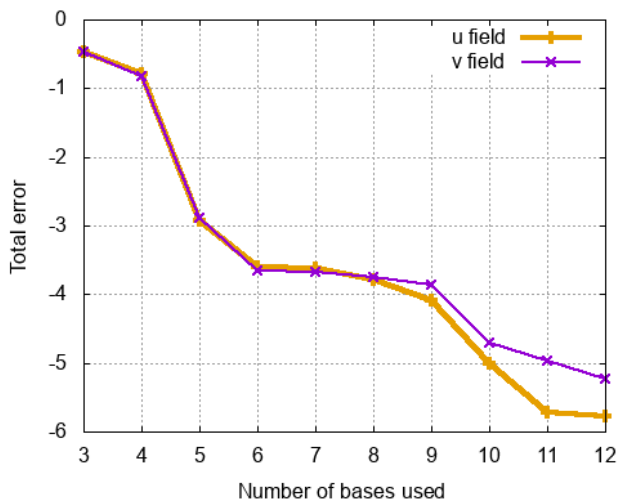
Σχήμα 3.6: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re = 1$, (201×201).



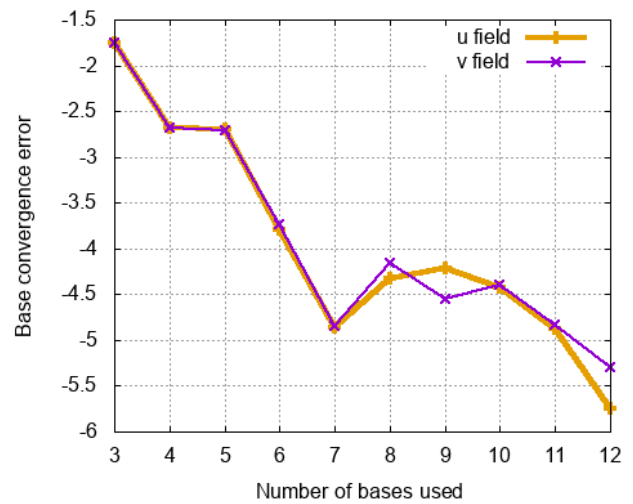
(α') Λύση με PGD.

(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.7: Σύγκριση πεδίων για $Re=1$ σε Πλέγμα 201×201 .



(α') Συνολικό σφάλμα

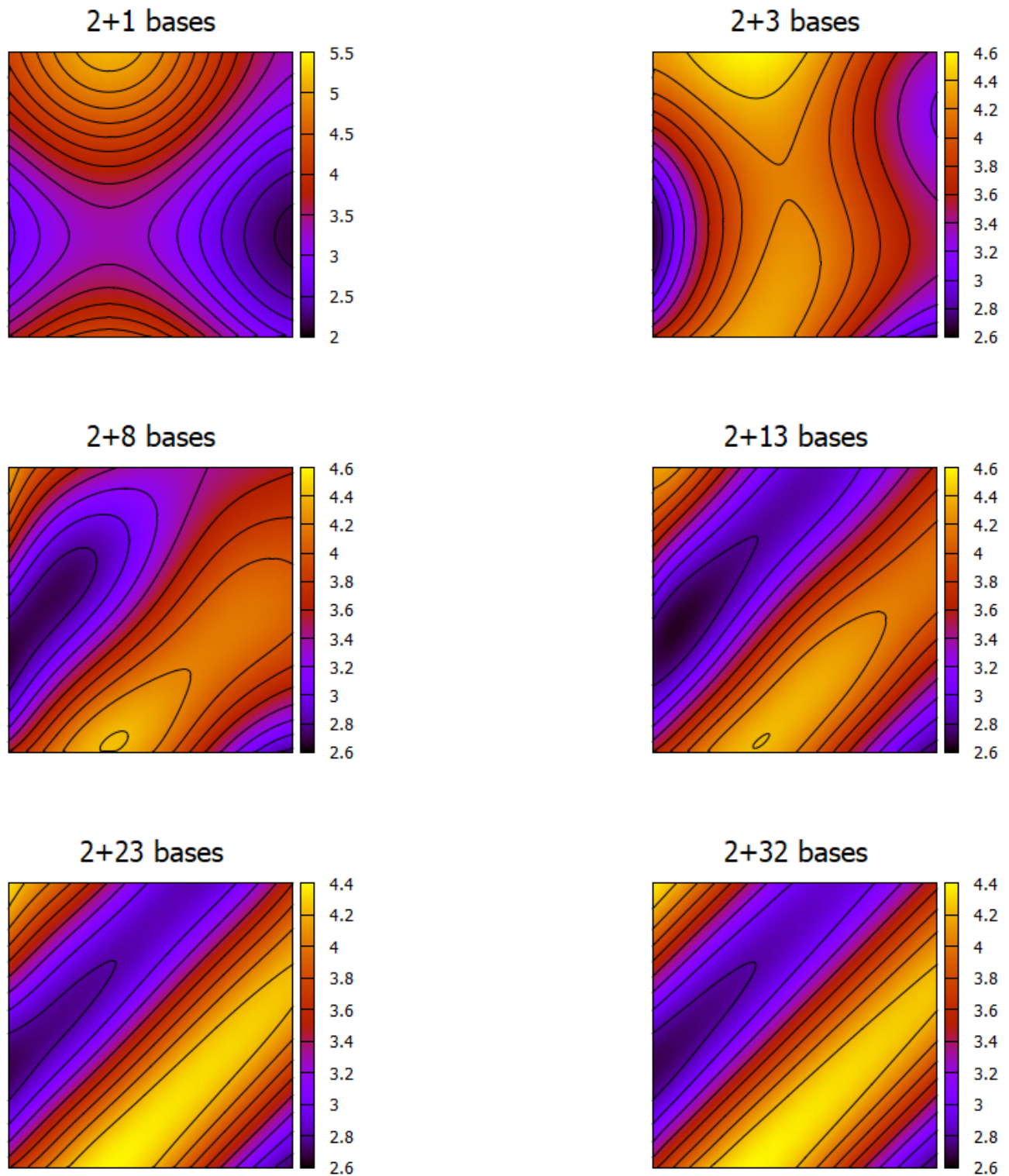


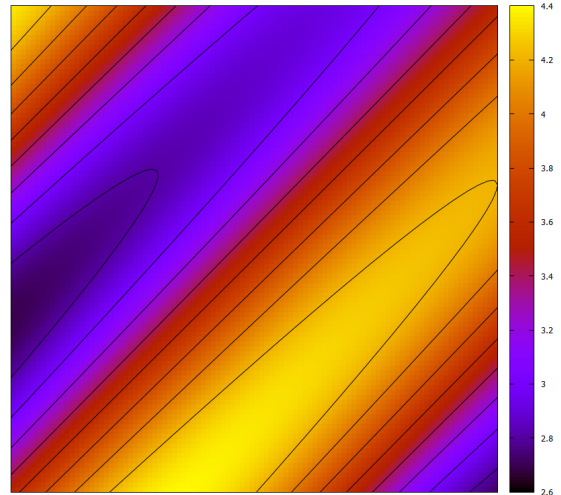
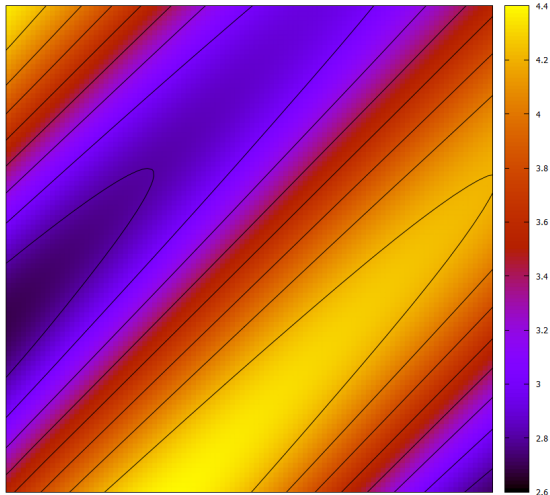
(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.8: Σφάλματα για $Re=1$ σε Πλέγμα 201×201 .

3.1.3 $Re=50$, Πλέγμα 101×101

Incremental construction of flowfield

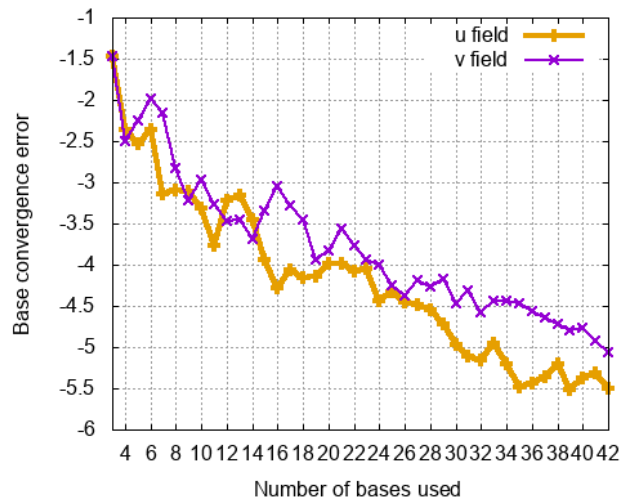
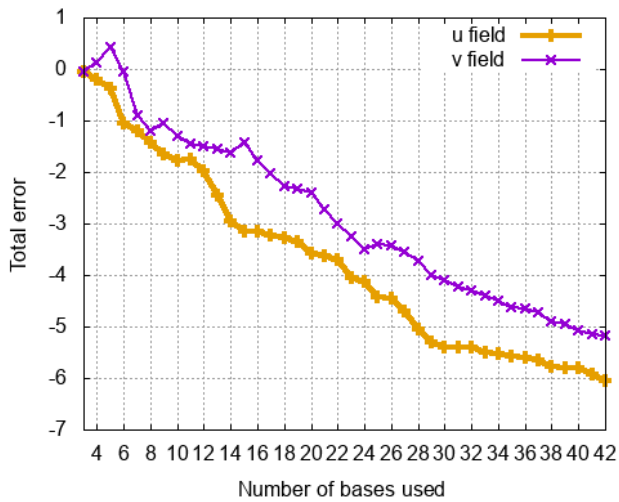
Σχήμα 3.9: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re = 50$, (201×201) .



(α') Λύση με PGD.

(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.10: Σύγκριση πεδίων για $Re=50$ σε Πλέγμα 101×101 .



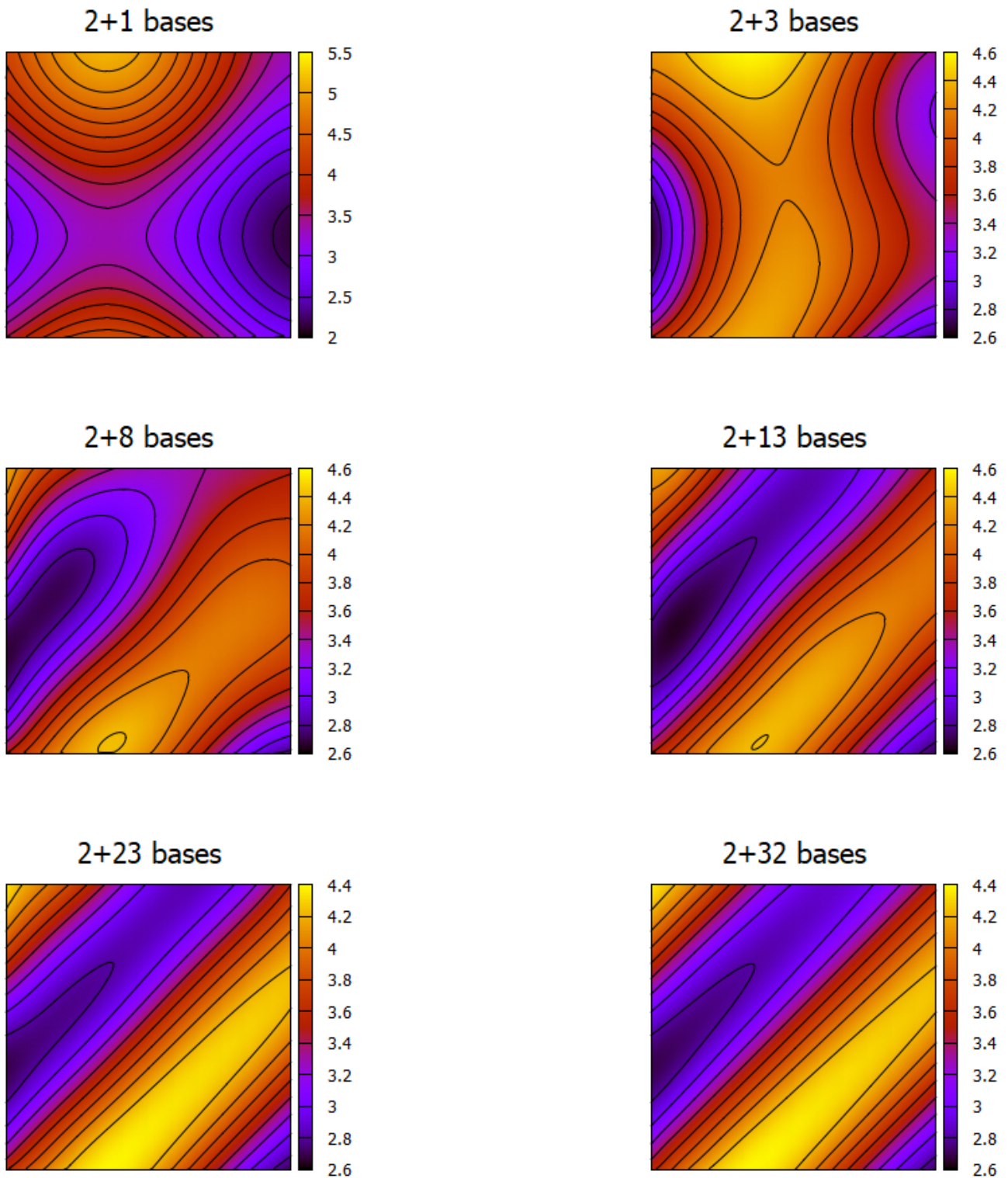
(α') Συνολικό σφάλμα

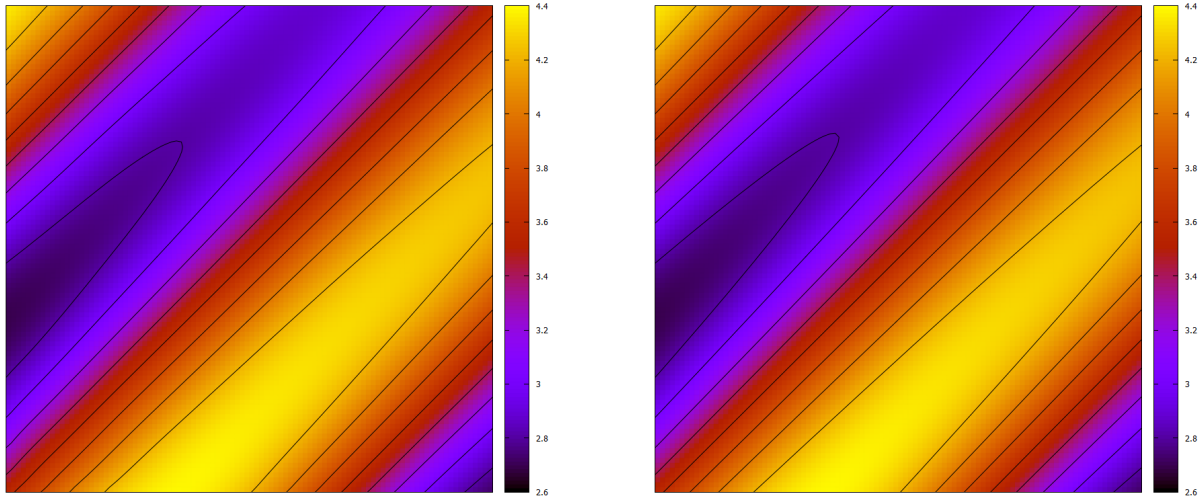
(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.11: Σφάλματα για $Re=50$ σε Πλέγμα 101×101 .

3.1.4 $Re=50$, Πλέγμα 201×201

Incremental construction of flowfield

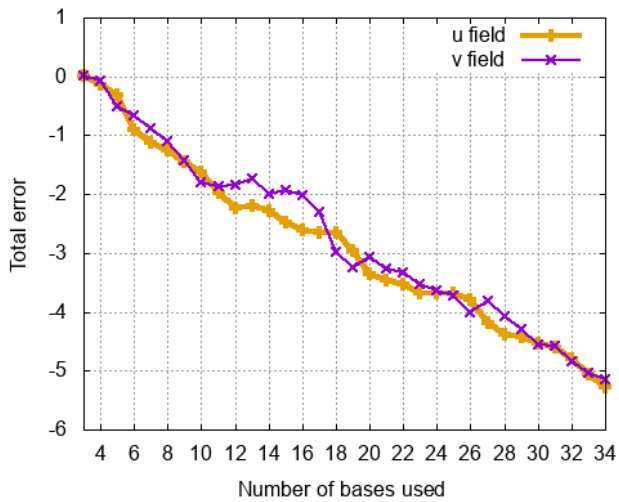
Σχήμα 3.12: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re = 50$, (201×201) .



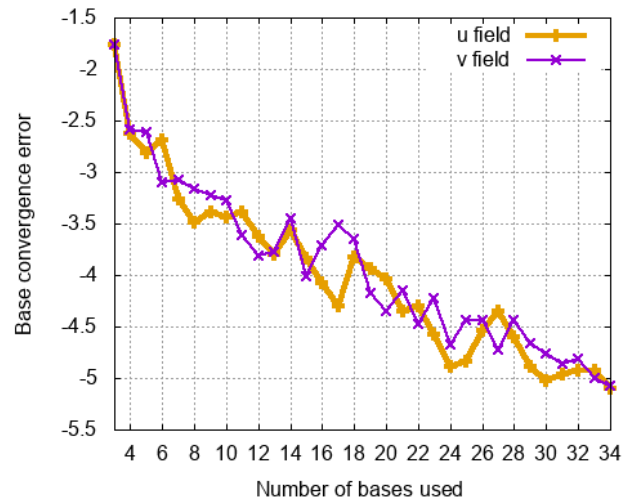
(α') Λύση με PGD.

(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.13: Σύγκριση πεδίων για $Re=50$ σε Πλέγμα 201×201 .



(α') Συνολικό σφάλμα

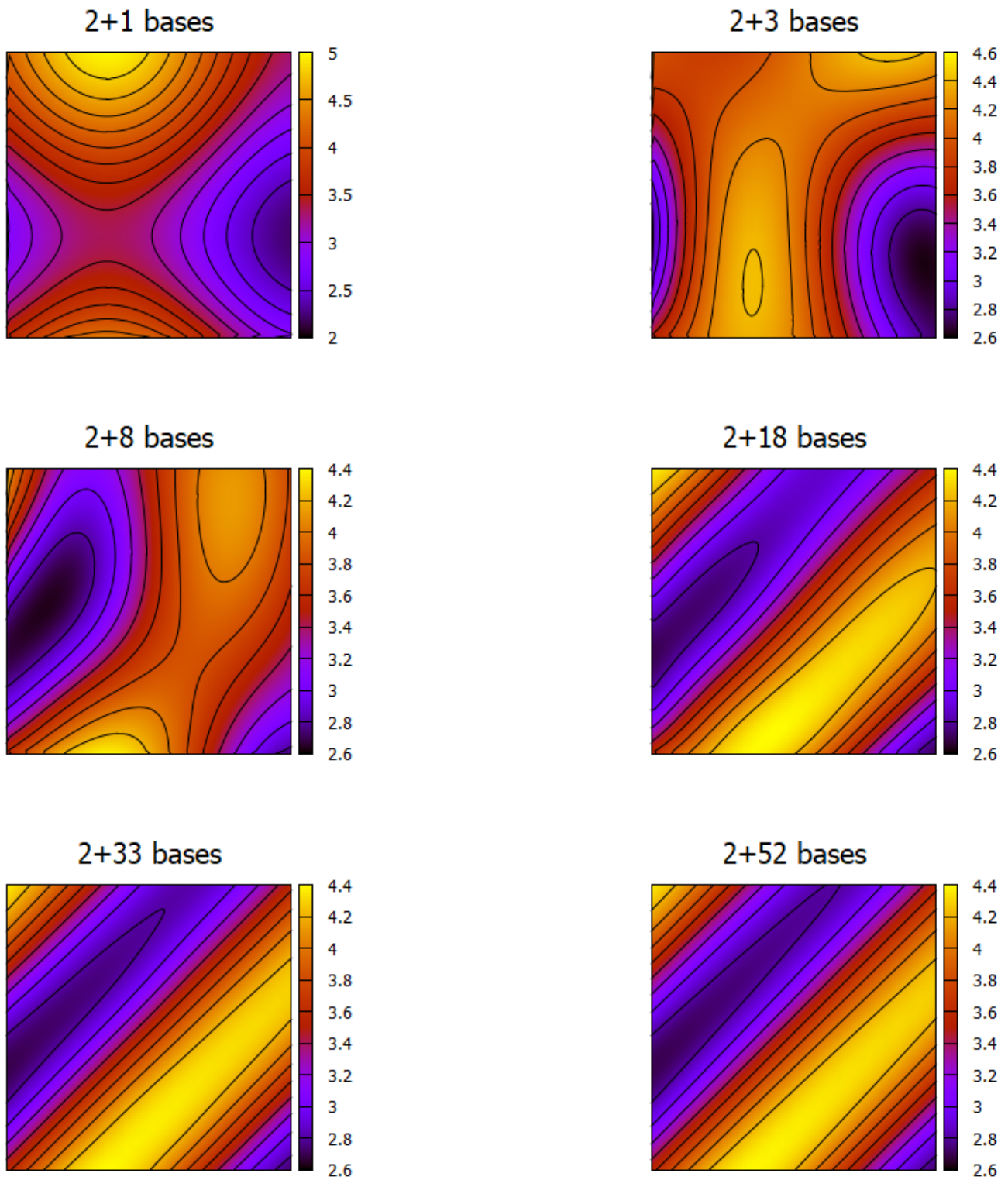


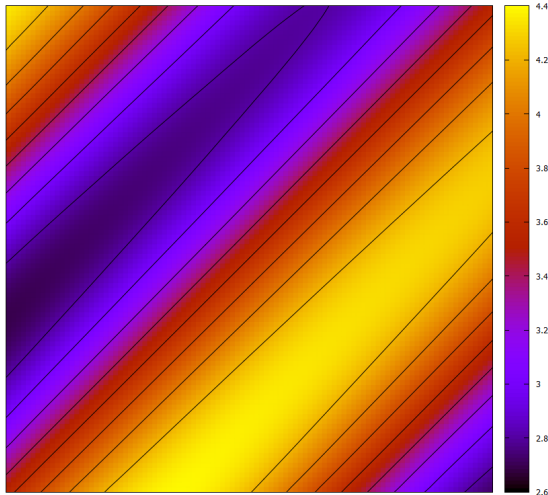
(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.14: Σφάλματα για $Re=50$ σε Πλέγμα 201×201 .

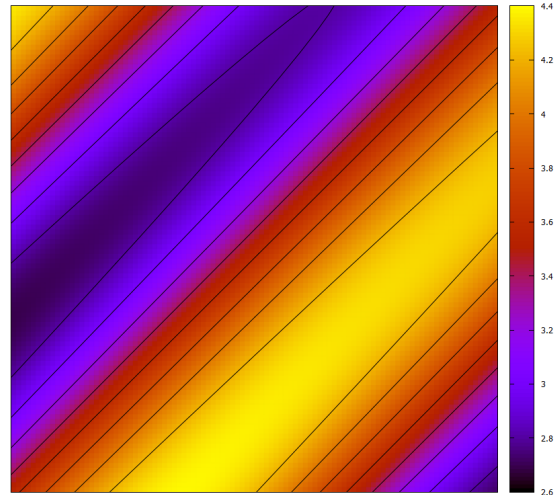
3.1.5 $Re=1000$, Πλέγμα 101×101

Incremental construction of flowfield

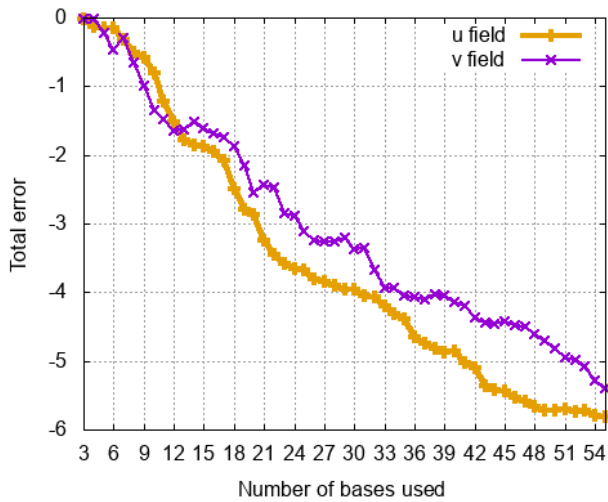
Σχήμα 3.15: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re = 10^3$, (101×101) .



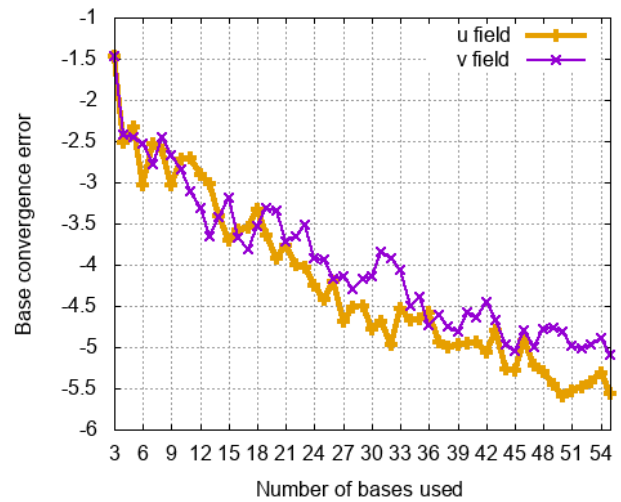
(α') Λύση με PGD.



(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.16: Σύγκριση πεδίων για $Re=1000$ σε Πλέγμα 101×101 .

(α') Συνολικό σφάλμα

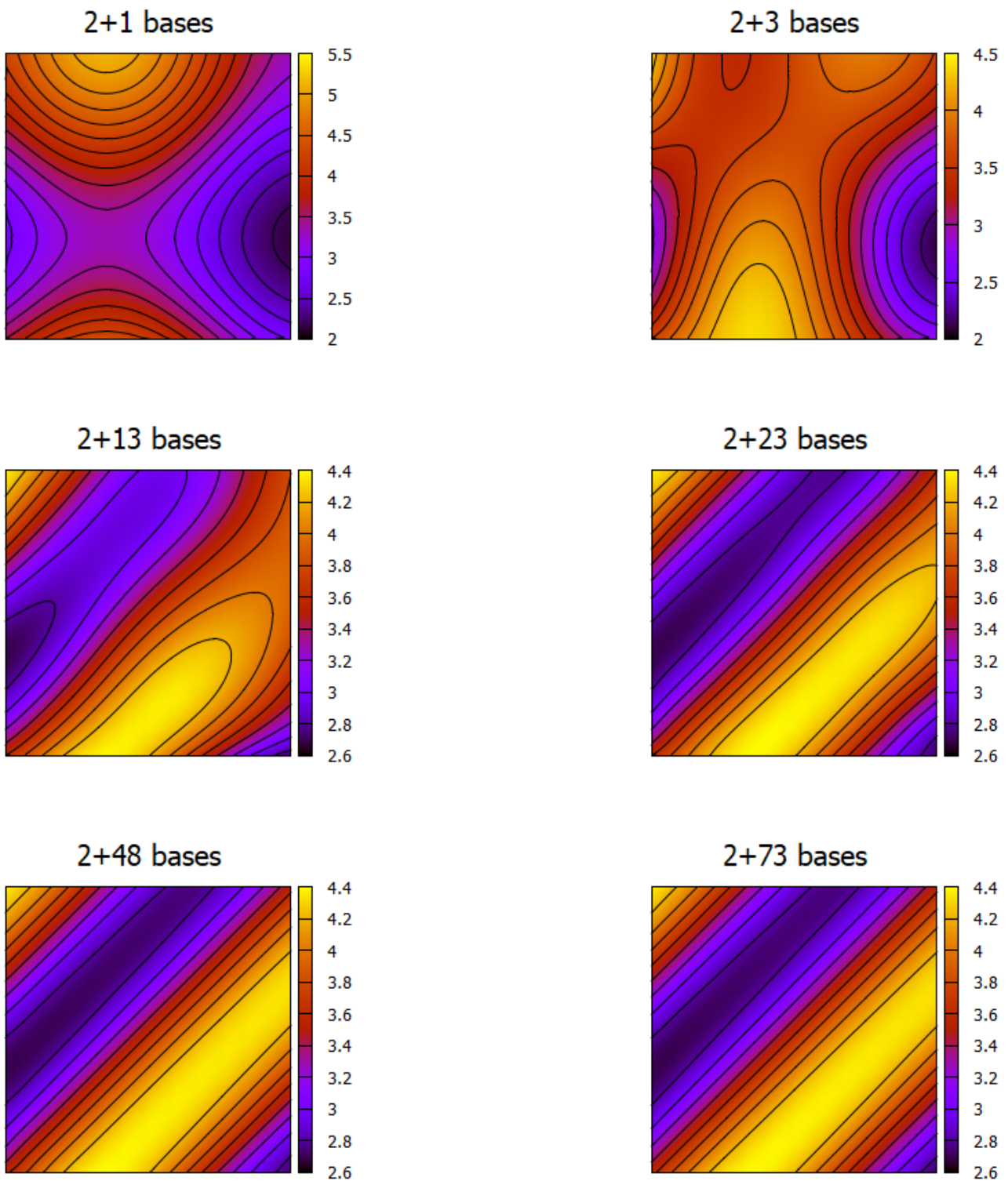


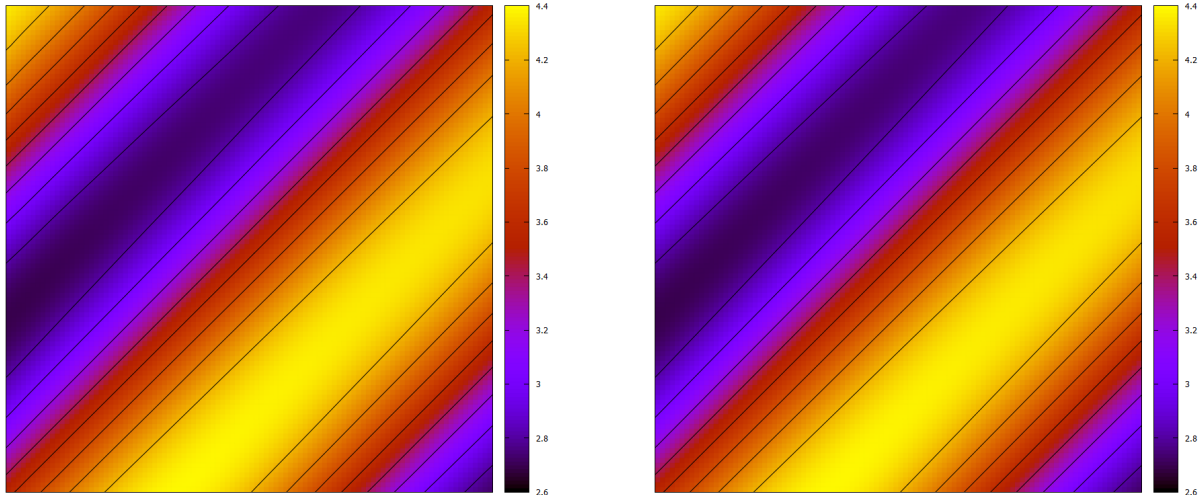
(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.17: Σφάλματα για $Re=1000$ σε Πλέγμα 101×101 .

3.1.6 $Re=1000$, Πλέγμα 201×201

Incremental construction of flowfield

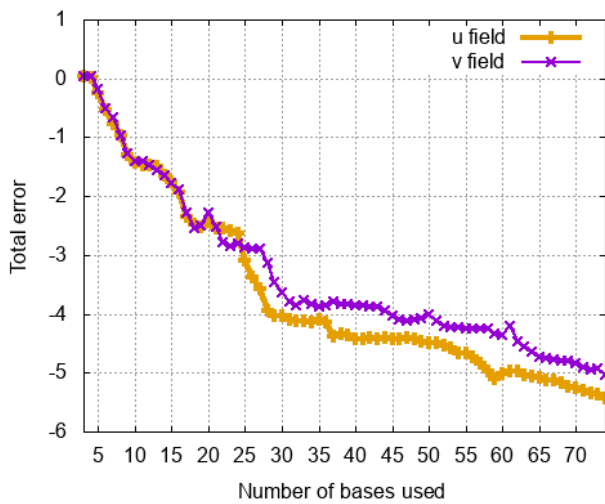
Σχήμα 3.18: Σταδιακή δόμηση πεδίου, $Re = 10^3$, (201×201) .



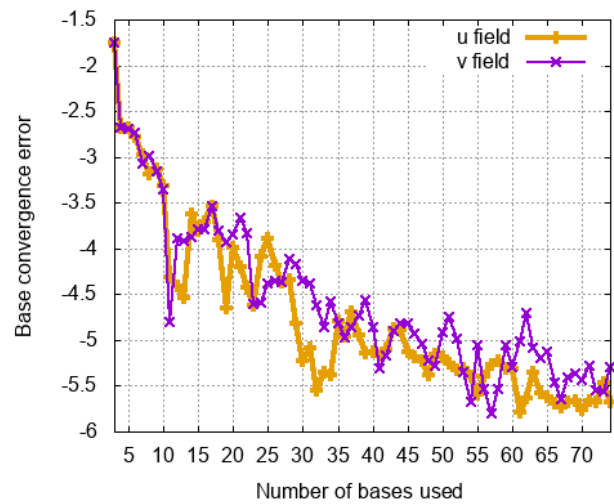
(α') Λύση με PGD.

(β') Λύση με συμβατικό επιλύτη.

Σχήμα 3.19: Σύγκριση πεδίων για $Re=1000$ σε Πλέγμα 101×101 .



(α') Συνολικό σφάλμα



(β') Σχετικό σφάλμα βάσεων

Σχήμα 3.20: Σφάλματα για $Re=1000$ σε Πλέγμα 201×201 .

3.2 Αποτελέσματα-Σχολιασμοί

Μετά το πέρας της επίλυσης των παραπάνω πεδίων στις έξι αυτές διαφορετικές περιπτώσεις, μπορούν να ληφθούν ορισμένα συμπεράσματα όσον αφορά τη λειτουργία του PGD ως επιλύτη:

- Ανά κύκλο προσθήκης επιπλέον βάσεων, τα δύο επιμέρους πεδία u και v επιλύονται απεπλεγμένα. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίον οι βάσεις τους συγκλίνουν με διαφορετικό ρυθμό, παρά το γεγονός ότι τα πεδία είναι εν τέλει πανομοιότυπα. Εάν ο υπολογισμός τους γινόταν αντίστροφα, τότε οι δύο γραμμές σύγκλισης θα ήταν ανεστραμμένες. Επίσης, το σφάλμα $\epsilon = -5$ που χρησιμοποιείται για να τερματιστεί η διαδικασία προσθήκης επιπλέον βάσεων των κύκλων είναι ιδιαίτερα αυστηρό, και ανάλογα με την ακρίβεια της λύσης που ζητείται να υπολογισθεί, μπορεί να αυξηθεί, ελαττώνοντας τον απαραίτητο αριθμό κύκλων για την επίτευξή του.
- Με τον αριθμό Reynolds να αυξάνει, αλλάζει ριζικά η μορφή των πεδίων u και v , καθώς η διάχυση γίνεται λιγότερο έντονη, το οποίο σημαίνει πως η κατανομή εισόδου διατηρείται σε μεγαλύτερη βαθμό κατά τη διεύθυνση του πεδίου. Με την τροποποίηση του πεδίου μέσω του αριθμού Reynolds, αυξάνεται και η μη διαχωρισιμότητά του, κάτι το οποίο μπορεί να αποδειχθεί αρκετά εύκολα, εφαρμόζοντας έναν αλγόριθμο συμπίεσης με PGD (Παράρτημα Β') στα πεδία που προκύπτουν από έναν συμβατικό επιλύτη με διαφορετικούς αριθμούς Re . Αυτό σημαίνει πως για ένα δεδομένο συνολικό σφάλμα θα απαιτηθεί μεγαλύτερος αριθμός βάσεων για τον ίδιο βαθμό προσέγγισης του πεδίου σε σχέση με ένα πιο «διαχωρίσιμο» πεδίο.
- Στην περίπτωση όπου $Re=1$, παρατηρείται πως για να επιτευχθεί το ίδιο σφάλμα στις περιπτώσεις των δύο πλεγμάτων (101 και 201 κόμβοι ανά κατεύθυνση), απαιτείται περίπου ο ίδιος αριθμός βάσεων, παρόλο που το πλέγμα είναι τετραπλάσιο σε αριθμό κόμβων. Συμπεραίνεται πως η διάσταση ενός πεδίου παίζει μικρό ρόλο στον αριθμό των βάσεων που θα απαιτηθούν για να το προσεγγίσουν (οι βάσεις βέβαια είναι διπλάσιες σε διάσταση). Συνεπώς, ο μόνος πραγματικός παράγοντας από τον οποίον εξαρτάται ο αριθμός των απαιτούμενων βάσεων είναι το κατά πόσο «διαχωρίσιμη» είναι η μορφή του πεδίου που ζητείται να επιλυθεί, κάτι το οποίο όμως γενικά δεν δύναται να γνωρίζει ο χρήστης εκ των προτέρων.
- Όπως φαίνεται στην περίπτωση της επίλυσης για $Re=50$, με περαιτέρω αύξηση του αριθμού Reynolds, άρα και την επιπλέον μη-διαχωρισιμότητα του πεδίου, θα αυξηθεί και ο απαιτούμενος αριθμός βάσεων που χρειάζεται για να το προσεγγίσει.
- Ιδιαίτερη αξία έχει η περίπτωση για $Re=1000$, όπου παρατηρείται πως ο αριθμός βάσεων που χρειάζεται για το (201×201) πλέγμα, δεν είναι ίδιος με τον αριθμό βάσεων του πλέγματος (101×101) , αλλά αρκετά μεγαλύτερος. Ένας λόγος που συμβαίνει αυτό, είναι η έντονη μη-διαχωρισιμότητα του πεδίου. Συνεπώς, ο ήδη μεγαλύτερος αριθμός βάσεων που απαιτείται, λόγω της ίδιας απαίτησης σε σφάλμα, θα χρειαστεί περισσότερες σε σχέση με το πεδίο διάστασης (101×101) βάσεις για να προσεγγισθεί. Να τονισθεί πως οι περισσότερες βάσεις που απαιτούνται, χρησιμεύουν στο να ικανοποιήσουν το κριτήριο του συνολικού σφάλματος, και όχι του σχετικού, το οποίο ικανοποιείται σε λιγότερες βάσεις (βλέπε Σχήμα 3.20α' και 3.20β'). Καθώς σε ένα πραγματικό σενάριο, μόνο το σχετικό σφάλμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως κριτήριο σύγκλισης, εν τέλει μπορεί να θεωρηθεί πως οι βάσεις που απαιτούνται και στις δύο διαστάσεις πλεγμάτων, είναι περίπου ίδιες.
- Είναι εμφανές σε κάθε περίπτωση πως εμφανίζεται επιτυχής σύγκλιση και των δύο ειδών σφαλμάτων. Σε ένα πραγματικό σενάριο, η αληθινή λύση δεν θα είναι γνωστή, και θα μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο το σχετικό σφάλμα σύγκλισης των βάσεων. Καθώς όμως η πορεία τους είναι καθοδική και η τάξη μεγέθους των σφαλμάτων είναι περίπου ίδια ανά στάδιο εμπλουτισμού, το κριτήριο μπορεί επιτυχώς να εφαρμοστεί και στο σχετικό σφάλμα σύγκλισης, προσφέροντας γνώση για το πότε έχει συγκλίνει η διαδικασία.

Τελικά, στη συγκεκριμένη περίπτωση γίνεται εμφανές πως ο αριθμός Reynolds όσο αυξάνει,

κάνει το τελικό πεδίο όλο και λιγότερο διαχωρίσιμο, απαιτώντας μεγαλύτερο αριθμό βάσεων για την επιτυχή προσέγγισή του.

3.2.1 Απαιτούμενη μνήμη

Εξέχουσα σημασία έχει ο απαιτούμενος χώρος αποθήκευσης των νέων, διαχωρισμένων πλέον, πεδίων που προέκυψαν από την επίλυση του προβλήματος με το PGD. Ένας συμβατικός επιλύτης που καλείται να επιλύσει το ίδιο πεδίο, θα χρειαζόταν:

$$2(u \text{ και } v \text{ πεδίο}) \times N_x \times N_y$$

θέσεις μνήμης (ή αριθμούς/κόμβους), όπου N_x και N_y ο αριθμός των κόμβων ανά πλευρά του δομημένου πλέγματος. Δηλαδή για την επίλυση ενός πεδίου σε πλέγμα (101×101) θα απαιτούνταν η αποθήκευση 20402 πραγματικών αριθμών σε κόμβους, ενώ για ένα πρόβλημα σε πλέγμα (201×201) θα απαιτείτο η αποθήκευση/χρήση 80802 αριθμών/κόμβων, δηλαδή η ζητούμενη αποθήκευση είναι ανάλογη του τετραγώνου των αριθμών κόμβων ανά πλευρά του υπολογιστικού χωρίου, ή σε ένα πρόβλημα q διαστάσεων:

$$\boxed{\text{Memory Required} \approx N^q} \quad (\text{Conventional Solver})$$

Αντίθετα, με την επίλυση του PGD, οι απαιτούμενοι κόμβοι θα είναι:

$$N_b \times [(N_x \text{ του πεδίου } u) + (N_y \text{ του πεδίου } u) + (N_x \text{ του πεδίου } v) + (N_y \text{ του πεδίου } v)]$$

όπου N_b ο αριθμός των απαιτούμενων βάσεων για την αναπαράσταση του πεδίου. Δεδομένου ότι ο αριθμός βάσεων που απαιτείται για τα δύο αυτά πεδία όντας πεπλεγμένα είναι ίσος, και υποθέτοντας επίλυση σε ορθοκανονικό χωρίο, με ίσο αριθμό κόμβων ανά κατεύθυνση, αλλά και της γενικότερης φαινόμενης ανεξαρτησίας του αριθμού των βάσεων από το μέγεθος του πλέγματος, οι απαιτούμενοι κόμβοι είναι:

$$2 \times N \times N_b + 2 \times N \times N_b = 4 \times N \times N_b$$

δηλαδή:

$$\boxed{\text{Memory Required} \approx N} \quad (\text{PGD Solver})$$

Σε μια πιο γενική περίπτωση, όπου το πρόβλημα που ζητείται να λυθεί είναι διατυπωμένο σε q διαστάσεις, με σταθερό αριθμό N κόμβων ανά διάσταση, και απαιτούμενο αριθμό βάσεων N_b , θα υπάρχει κέρδος κατά τη χρήση του PGD εάν ο απαιτούμενος αριθμός κόμβων είναι μικρότερος σε σχέση με αυτόν ενός συμβατικού επιλύτη, δηλαδή αν ισχύει η ανισότητα:

$$qN_b N < N^q$$

ή αλλιώς:

$$\boxed{N_b < \frac{N^{q-1}}{q}} \quad (3.4)$$

και, για πεδία 2Δ, όπως αυτά που μελετώνται στη διπλωματική εργασία, θα είναι:

$$N_b < \frac{N}{2}$$

Με τον παραπάνω απλό τρόπο είναι εμφανές το κέρδος σε μνήμη σε πεδία μεγάλης διάστασης, καθώς η αύξηση των απαιτήσεων μνήμης είναι γραμμική, και -σε διαχωρίσιμα πεδία- γενικά ανεξάρτητη από τη διάσταση του χώρου στον οποίον είναι διατυπωμένη το πρόβλημα, αντίθετα με μια συμβατική επίλυση όπου η απαίτηση σε μνήμη αυξάνεται εκθετικά (Conventional Solver) με τη διάσταση του χωρίου στο οποίο είναι διατυπωμένο το προς επίλυση πρόβλημα. Βέβαια, σε περίπτωση όπου μελετάται ένα πρόβλημα ιδιαίτερα μη-διαχωρίσιμο, δεν αποκλείεται η περίπτωση ο αριθμός των βάσεων να είναι συγκρίσιμος με αυτόν των κόμβων ανά διάσταση, καθιστώντας το κέρδος της διαδικασίας επίλυσης με το PGD ίσως και όχι συμφέρουσα. Αλλά στη γενικότερη περίπτωση, όπως δηλαδή γίνεται εμφανές παραπάνω (επίσης βλ. Κεφάλαιο 5), ο αριθμός των βάσεων είναι σχεδόν πάντα σημαντικά μικρότερος της διάστασης του πλέγματος, προσφέροντας εν τέλει σημαντικό κέρδος μνήμης.

Αυτό γίνεται αρκετά εμφανές στη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου εκτός της επιτυχίας λειτουργίας της μεθόδου ως επιλύτη, αξίζει να γίνει και μια αναφορά στη μνήμη που απαιτείται όταν η επίλυση πραγματοποιείται με PGD σε σχέση με ένα συμβατικό τρόπο (η απαιτούμενη μνήμη αναφέρεται σε συνολικό αριθμό κόμβων/θέσεων μνήμης, ανεξάρτητα αν βρίσκονται σε 2Δ ή 1Δ πεδίο):

Required Memory				
Re	Grid Size	Conventional Solver	PGD Solver	Percentage (%)
1	101 × 101	20402	6060	29.70
1	201 × 201	80802	9648	11.94
50	101 × 101	20402	16968	83.16
50	201 × 201	80802	27336	33.83
1000	101 × 101	20402	21816	106.93
1000	201 × 201	80802	59496	73.63

Πίνακας 3.1: Σύγκριση της απαιτούμενης μνήμης για επίλυση μέσω PGD και συμβατικής επίλυσης.

Στα εύκολα διαχωρίσιμα πεδία το κέρδος είναι σημαντικό (ειδικά στην δεύτερη περίπτωση ($Re=1$, $\Omega = 201 \times 201$), η απαιτούμενη μνήμη είναι περίπου το 10% της μνήμης που θα χρησιμοποιούνταν από μια συμβατική διαδικασία. Είναι εμφανές πως σε έντονα μη-διαχωρίσιμα πεδία, υπάρχει περίπτωση το PGD για ένα δοσμένο συνολικό σφάλμα να χρειαστεί περισσότερη μνήμη σε σχέση με τον συμβατικό επιλύτη. Ο επιπλέον αριθμός των βάσεων που αφιερώνονται σε αυτήν την επιπλέον μνήμη, είναι λεπτομέρειες ενός πεδίου, οι οποίες -ανάλογα πάντα με την χρήση- μπορούν να μην ληφθούν υπόψη με μια μικρότερη ανοχή σφάλματος, θυσιάζοντας πάντα ακρίβεια για μνήμη και ταχύτητα.

Το γενικότερο συμπέρασμα είναι πως με την αύξηση της διάστασης του πλέγματος αυξάνεται και το κέρδος σε μνήμη. Κάτι τέτοιο είναι λογικό, διότι το PGD αντιλαμβάνεται την μορφή του πεδίου μέσω 1Δ πεδίων ανά διάσταση, χωρίς να απαιτείται -σε αντίθεση με έναν συμβατικό επιλύτη- να επιλύσει σε ΚΑΘΕ κόμβο του πραγματικού χωρίου για να υπολογίσει τη λύση.

Κεφάλαιο 4

Επίλυση των 2Δ Εξισώσεων Burgers σε Καμπυλόγραμμο Πλέγμα με PGD

Σε πραγματικά προβλήματα ένα πεδίο δεν θα είναι αυστηρώς ορθογωνικό, αλλά θα έχει ακαθόριστο σχήμα, προσαρμοσμένο στη γεωμετρία του εξεταζόμενου χωρίου (λ.χ. ροής). Με την κατάλληλη γένεση πλέγματος, ένα τυχαίο σχήμα μπορεί να αναπαρασταθεί από ένα δομημένο πλέγμα. Για την επίλυση του πεδίου αυτού, θα απαιτηθεί η χρήση μετρικών μεγεθών, που θα παρεισφρύνουν στις προς επίλυση εξισώσεις.

Όπως και στην περίπτωση του ορθοκανονικού πλέγματος, έτσι και εδώ, οι δύο εξισώσεις του 2Δ συστήματος Burgers απεμπλέκονται ανά στάδιο εμπλουτισμού μεταξύ τους και επιλύονται εναλλάξ και επαναληπτικά. Συνεπώς, σε κάθε στάδιο, όλες οι συναρτήσεις που σχετίζονται με την άλλη συνιστώσα της ταχύτητας θεωρούνται πλήρως γνωστές, και οι δύο συναρτήσεις-βάσεις που δομούν τον τρέχον κύκλο του πεδίου υπολογίζονται επαναληπτικά.

Σε κάθε περίπτωση χρήσης καμπυλόγραμμου πλέγματος, η διατύπωση των εξισώσεων πραγματοποιείται στο αρχικό, καμπυλόγραμμο πεδίο (x, y) αλλά η επίλυση λαμβάνει χώρα στο ορθοκανονικό πλέγμα (ξ, η) με $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$ (βλ. Σχήμα 4.1).

Αρχικά, οι εξισώσεις (2.1) ξαναγράφονται, αυτή τη φορά σε διανυσματική μορφή, θεωρώντας πως $\vec{u} = (u, v)$:

$$\vec{u} \cdot \nabla u = \nabla^2 u$$

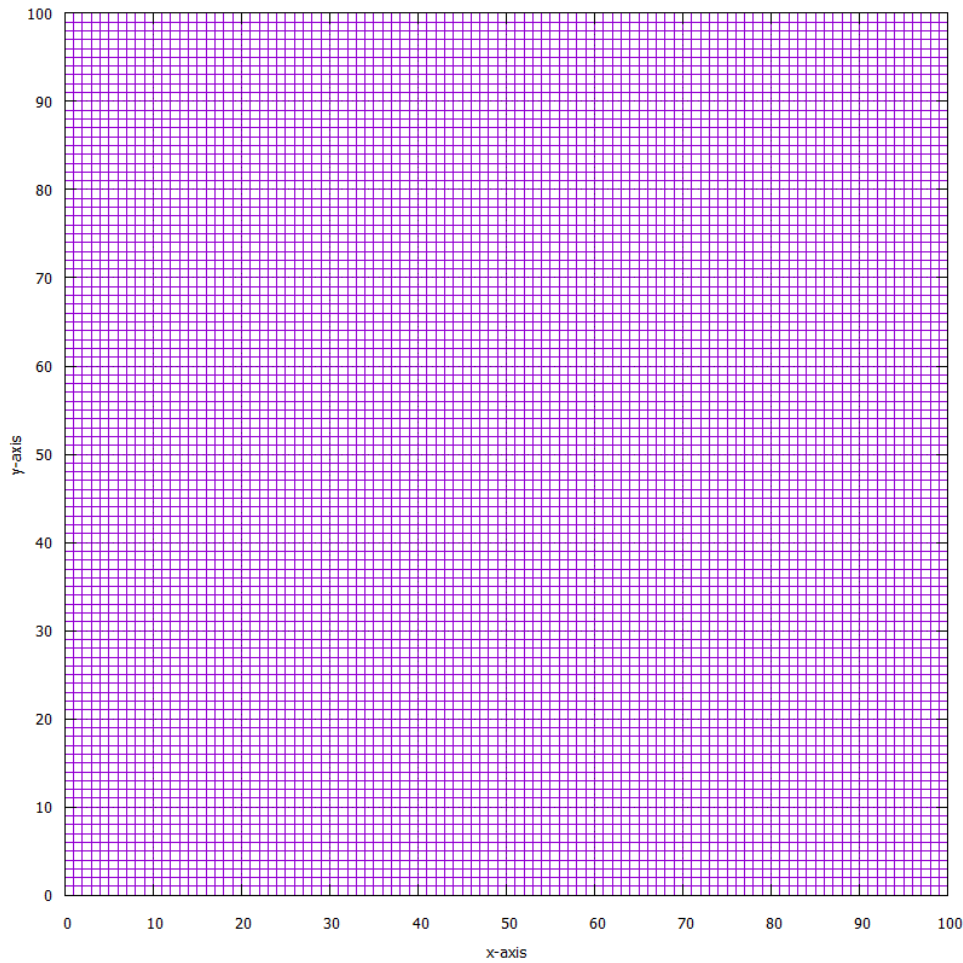
$$\vec{u} \cdot \nabla v = \nabla^2 v$$

Για να γίνει η «μεταφορά» από το ένα πεδίο στο άλλο, θα απαιτηθεί να τροποποιηθούν οι προς επίλυση εξισώσεις και, συγκεκριμένα, οι όροι των παραγώγων, δηλαδή (με επαναλαμβανόμενους δείκτες συμβολίζεται η σύμβαση Einstein):

$$\nabla\Phi(x, y) = \frac{\partial\Phi(\xi, \eta)}{\partial\xi^i} \vec{g}^i \quad (4.1)$$

$$\nabla^2\Phi(x, y) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial\xi^i} \left(J g^{ij} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi^j} \right) \quad (4.2)$$

όπου με \vec{g}^i συμβολίζονται οι ανταλλοίωτες διανυσματικές βάσεις και με g^{ij} οι ανταλλοίωτες μετρικές δεύτερης τάξης, οι οποίες ορίζονται ως $g^{ij} = \vec{g}^i \cdot \vec{g}^j$.



Σχήμα 4.1: Ορθοκανονικό χωρίο επίλυσης (ξ, η) διάστασης 100×100 , με 101 κόμβους ανά πλευρά.

Μετά την εισαγωγή των μετρικών, το σύστημα των 2Δ εξισώσεων Burgers, λαμβάνει την εξής μορφή:

$$\begin{aligned}
 & u \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial u}{\partial \eta} \eta_x \right) + v \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial u}{\partial \eta} \eta_y \right) = \\
 & = \frac{1}{Re} \left\{ g^{11} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \frac{1}{J} \left[\frac{\partial(Jg^{11})}{\partial \xi} + \frac{\partial(Jg^{12})}{\partial \eta} \right] \frac{\partial u}{\partial \xi} + \right. \\
 & \left. + 2g^{12} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \xi} + \frac{1}{J} \left[\frac{\partial(Jg^{12})}{\partial \xi} + \frac{\partial(Jg^{22})}{\partial \eta} \right] \frac{\partial u}{\partial \eta} + g^{22} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

$$\begin{aligned}
 & u \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial v}{\partial \eta} \eta_x \right) + v \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial v}{\partial \eta} \eta_y \right) = \\
 & = \frac{1}{Re} \left\{ g^{11} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + \frac{1}{J} \left[\frac{\partial(Jg^{11})}{\partial \xi} + \frac{\partial(Jg^{12})}{\partial \eta} \right] \frac{\partial v}{\partial \xi} + \right. \\
 & \left. + 2g^{12} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta \partial \xi} + \frac{1}{J} \left[\frac{\partial(Jg^{12})}{\partial \xi} + \frac{\partial(Jg^{22})}{\partial \eta} \right] \frac{\partial v}{\partial \eta} + g^{22} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Τα μεγέθη των πεδίων u και v γράφονται πλέον ως:

$$\begin{aligned} u(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n \Xi_{ui}(\xi) H_{ui}(\eta) \\ v(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n \Xi_{vi}(\xi) H_{vi}(\eta) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Όπως και σε κάθε άλλη περίπτωση, η μεταβλητή της κάθε βάσης θα θεωρείται δεδομένη και δεν θα αναγράφεται για λόγους απλότητας. Στη συνέχεια, απαιτείται να εκφραστούν οι παραπάνω εξισώσεις κατά PGD. Συνεπώς, η κάθε έκφραση θα προκύψει μετά από αντικατάσταση του μεγέθους του πεδίου με το αντίστοιχο κατά PGD πεδίο (4.5).

Όπως και στην επίλυση του προβλήματος σε καρτεσιανό πλέγμα, έτσι και εδώ θα υπάρχουν τέσσερα βήματα, δύο για την εύρεση του πεδίου u -τα οποία πραγματοποιούνται επαναληπτικά έως επιτευχθεί σύγκλιση-, και άλλα δύο για τον υπολογισμό του πεδίου v -τα οποία γίνονται και αυτά επαναληπτικά-.

4.1 Υπολογισμός του Πεδίου u

Εφαρμόζοντας το PGD στην 1η εξίσωση του 2Δ συστήματος Burgers (4.3), δηλαδή με αντικατάσταση των μεγεθών όπως αναγράφονται στην (4.5) σε αυτήν, προκύπτει η έκφραση της εξίσωσης κατά PGD:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \\ & + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{vi} H_{vi} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] = \\ & = \frac{1}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \right. \\ & + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \\ & \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.6)$$

όπου:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{\partial}{\partial \xi} (Jg^{11}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Jg^{12}) \\ c_2 &= \frac{\partial}{\partial \xi} (Jg^{12}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Jg^{22}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Στη συνέχεια, από την παραπάνω εξίσωση θα εξαχθούν οι εκφράσεις που υπολογίζουν τα μεγέθη Ξ_{un}, H_{un} , σε πεπλεγμένη προφανώς μορφή, με τη χρήση -όπως και προηγουμένως- της προβολής Galerkin.

• **Βήμα 1ο, εύρεση του $H_{un}^{new}(\eta)$ από $\Xi_{un}^{old}(\xi)$, $H_{vn}^{old}(\eta)$, $\Xi_{vn}^{old}(\xi)$**

Με χρήση της προβολής Galerkin στην εξίσωση (4.3), με συνάρτηση βάσης την $u^* = H_n^{old}$, και ολοκλήρωση κατά τη η διεύθυνση, λαμβάνεται:

$$\begin{aligned}
& \int_{\eta} H_n \left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \right. \\
& \left. + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{vi} H_{vi} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] \right\} d\eta = \\
& = \int_{\eta} \frac{H_n}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \right. \\
& \quad \left. + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \right. \\
& \quad \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] d\eta \tag{4.8}
\end{aligned}$$

με τα c_1, c_2 να δίνονται από την (4.7).

Μετά το πέρας των αντίστοιχων πράξεων, προκύπτει η ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n^2 H_i \xi_x d\eta \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i H_j \xi_x d\eta \Xi_i \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \eta_x d\eta \Xi_i \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \eta_x d\eta \Xi_i \Xi_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{vi} H_n^2 \xi_y d\eta \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} H_j \xi_y d\eta \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \eta_y d\eta \Xi_{vi} \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \eta_y d\eta \Xi_{vi} \Xi_j = \\
& = \frac{1}{Re} \left\{ \int_{\eta} g^{11} H_n^2 d\eta \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} g^{11} H_i H_n d\eta \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} + \int_{\eta} H_n^2 \frac{c_1}{J} d\eta \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_i d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \right. \\
& + \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \Xi_i + \\
& \quad \left. + \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_i \right\} \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Ομαδοποιώντας τους παραπάνω όρους ως εξής:

$$\begin{aligned}
a_\xi &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n^2 H_i \xi_x d\eta \Xi_i & b_\xi &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \xi_y d\eta \Xi_i \\
c_\xi &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{vi} H_n^2 \eta_x d\eta \Xi_{vi} & d_\xi &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \eta_y d\eta \Xi_{vi} \\
e_\xi &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} g^{11} H_n^2 d\eta & f_\xi &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n^2 \frac{c_1}{J} d\eta \\
g_\xi &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta & h_\xi &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \\
i_\xi &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} d\eta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_\xi &= -\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i H_j \xi_x d\eta \Xi_i \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n n_i \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \xi_y d\eta \Xi_i \Xi_j - \\
&\quad - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} H_j \eta_x d\eta \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_{vi} \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \eta_y d\eta \Xi_{vi} \Xi_j + \\
&\quad + \frac{1}{Re} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} g^{11} H_i H_n d\eta \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_i d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \Xi_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_i \right\}
\end{aligned}$$

προκύπτει μια δεύτερης τάξης $\Sigma \Delta E$ η οποία μπορεί να λυθεί μετά την επιβολή των κατάλληλων οριακών συνθηκών:

$$\boxed{(b_\xi + d_\xi + h_\xi + i_\xi) \Xi_n + (a_\xi + c_\xi + f_\xi + g_\xi) \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + e_\xi \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} = RHS_\xi} \quad (4.10)$$

Με τη χρήση ενός ορθοκανονικού πλέγματος (ξ, η) , η χρήση πεπερασμένων διαφορών είναι σημαντικά πιο εύκολη από το καμπυλόγραμμα πλέγμα (x, y) . Το σχήμα παραγωγίσης (κεντρικές ή one-sided διαφορές) είναι το ίδιο που χρησιμοποιείται και στο Κεφάλαιο 3 και αναλύεται στην Ενότητα 2.5.

- **Βήμα 2ο, εύρεση του H_{un}^{new} από Ξ_{un}^{new} , H_{vn}^{old} , Ξ_{vn}^{old}**
 Όπως και παραπάνω, με προβολή Galerkin στην (4.3), αυτή τη φορά με συνάρτηση βάσης την $u^* = \Xi_n^{new}$ και ολοκλήρωση κατά την ξ διεύθυνση, προκύπτει η αντίστοιχη μορφή για τον υπολογισμό της συνάρτησης H_{un} :

$$\begin{aligned}
& \int_{\xi} \Xi_n \left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \right. \\
& \left. \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{vi} H_{vi} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] \right\} d\xi = \\
& = \int_{\xi} \frac{\Xi_n}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) + \right. \\
& \quad + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \\
& \quad \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] d\xi \tag{4.11}
\end{aligned}$$

με τα c_1 και c_2 να δίνονται από την εξίσωση (4.7).

Μετά το πέρας των αντίστοιχων πράξεων, διαμορφώνεται η ακόλουθη εξίσωση:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_x d\xi H_i H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_x d\xi H_i H_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_i \eta_x d\xi H_i \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \Xi_j \eta_x d\xi H_i \frac{\partial H_j}{\partial \eta} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_{vi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \Xi_n \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_{vi} H_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_{vi} \eta_y d\xi H_{vi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{vi} \Xi_j \eta_y d\xi H_{vi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} = \\
& = \frac{1}{Re} \left\{ \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} d\xi H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} d\xi H_i + \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi H_i + \right. \\
& + \int_{\xi} \Xi_n 2g^{12} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n 2g^{12} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_n d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_i d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \\
& \quad \left. + \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_n d\xi \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_i d\xi \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right\} \tag{4.12}
\end{aligned}$$

Με ομαδοποίηση των παραπάνω όρων ως εξής:

$$\begin{aligned}
a_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_x d\xi H_i & b_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_i \eta_x d\xi H_i \\
c_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_{vi} & d_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_{vi} \eta_y d\xi H_{vi} \\
e_n &= \frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} d\xi & f_n &= \frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi \\
g_n &= \frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n 2g^{12} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi & h_n &= \frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_n d\xi \\
i_n &= \frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_n d\xi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_x d\xi H_i H_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \Xi_j \eta_x d\xi H_i \frac{\partial H_j}{\partial \eta} - \\
&\quad - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{vi} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_{vi} H_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{vi} \Xi_j \eta_y d\xi H_{vi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \\
&\quad + \frac{1}{Re} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} d\xi H_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi H_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n 2g^{12} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_i d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_i d\xi \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right\}
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Προκύπτει μια δεύτερης τάξης ΣΔΕ η οποία μπορεί να επιλυθεί με έναν απλό τριδιαγώνιο επιλύτη μετά την κατάλληλη διακριτοποίηση (βλ. Ενότητα 2.5).

$$\boxed{(a_n + c_n + e_n + f_n)H_n + (b_n + d_n + g_n + h_n) \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + i_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} = RHS_n} \tag{4.14}$$

4.2 Υπολογισμός του Πεδίου v

Εφαρμόζοντας τη μέθοδο του PGD στην 2η (του v) εξίσωση του 2Δ συστήματος Burgers (4.4), με αντικατάσταση των μεγεθών όπως αυτά διαχωρίζονται στην εξ. (4.5), προκύπτει η

PGD έκφραση της δεύτερης εξίσωσης του συστήματος:

$$\begin{aligned}
& \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{ui} H_{ui} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \\
& + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] = \\
& = \frac{1}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) + \right. \\
& + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \\
& \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Όπως και πριν, με τη διαφορά ότι οι συνιστώσες Ξ_{un} και H_{un} είναι πλέον γνωστές, γίνεται χρήση της προβολής Galerkin για τον υπολογισμό των δύο συναρτήσεων-βάσεων του πεδίου v , δηλαδή των: Ξ_{vn} και H_{vn}

• **Βήμα 3ο, εύρεση του $\Xi_{vn}^{new}(\xi)$ από $H_{vn}^{old}(\eta)$, $H_{un}^{new}(\eta)$, $\Xi_{un}^{new}(\xi)$**

Με χρήση της προβολής Galerkin στην εξίσωση (4.15), με συνάρτηση βάσης την $v^* = H_{vn}^{old}$ και ολοκλήρωση κατά την η διεύθυνση, προκύπτει η έκφραση:

$$\begin{aligned}
& \int_{\eta} H_n \left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{ui} H_{ui} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \right. \\
& \left. + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] \right\} d\eta = \\
& = \int_{\eta} \frac{H_n}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) + \right. \\
& + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \\
& \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] d\eta \quad (4.16)
\end{aligned}$$

με την εξίσωση (4.7) να υπολογίζει τα c_1 και c_2 . Μετά το πέρας των πράξεων, η παραπάνω

εξίσωση παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n^2 \xi_x d\eta \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n H_j \xi_x d\eta \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \eta_x d\eta \Xi_{ui} \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \eta_x d\eta \Xi_j \Xi_{ui} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n^2 H_i \xi_y d\eta \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i H_j \xi_y d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \Xi_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} H_i H_n \eta_y d\eta \Xi_i \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{\partial H_i}{\partial \eta} H_i \eta_y d\eta \Xi_i \Xi_j = \\
& = \frac{1}{Re} \left\{ \int_{\eta} H_n g^{11} H_n d\eta \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{11} H_i d\eta \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} + \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_n d\eta \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_i d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \right. \\
& + \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \Xi_i + \\
& \left. + \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_i \right\}
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Ομαδοποιώντας τους παραπάνω όρους ως εξής:

$$\begin{aligned}
a_{\xi} &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n^2 H_i \xi_y d\eta \Xi_i & b_{\xi} &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} H_i H_n \eta_y d\eta \Xi_i \\
c_{\xi} &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n^2 \xi_x d\eta \Xi_{ui} & d_{\xi} &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \eta_x d\eta \Xi_{ui} \\
e_{\xi} &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n g^{11} H_n d\eta & f_{\xi} &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_n d\eta \\
g_{\xi} &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta & h_{\xi} &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} d\eta \\
i_{\xi} &= -\frac{1}{Re} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} d\eta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_\xi = & - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n H_i H_j \xi_x d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \Xi_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{\partial H_i}{\partial \eta} H_j \eta_x d\eta \Xi_i \Xi_j - \\
& - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n H_j \xi_y d\eta \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\eta} H_{ui} H_n \frac{\partial H_j}{\partial \eta} \eta_y d\eta \Xi_j \Xi_{ui} + \\
& + \frac{1}{Re} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{11} H_i d\eta \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_1}{J} H_i d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n 2g^{12} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} + \right. \\
& \left. + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n \frac{c_2}{J} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} d\eta \Xi_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\eta} H_n g^{22} \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} d\eta \Xi_i \right\}
\end{aligned}$$

Όπως και πριν, εμφανίζεται μια $\Sigma\Delta E$ δεύτερης τάξης, η οποία λύνεται με κάποιον από τους τρόπους που προαναφέρθηκαν (λ.χ. τριδιαγωνίως επιλύτης):

$$\boxed{(b_\xi + d_\xi + h_\xi + i_\xi)H_n + (a_\xi + c_\xi + f_\xi + g_\xi) \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} + e_\xi \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} = RHS_\xi} \quad (4.18)$$

• **Βήμα 4ο, Εύρεση του $H_{vn}^{new}(\eta)$ από $\Xi_{vn}^{new}(\xi)$, $H_{un}^{new}(\eta)$, $\Xi_{un}^{new}(\xi)$**

Ομοίως με πριν, μέσω της προβολής Galerkin στην εξίσωση (4.15), με συνάρτηση βάσης την $v^* = \Xi_{vn}^{new}$ και ολοκλήρωση κατά τη ξ διεύθυνση, προκύπτει η έκφραση:

$$\begin{aligned}
& \int_{\xi} \Xi_n \left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_{ui} H_{ui} \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_x + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_x \right] + \right. \\
& \left. + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i H_i \right) \left[\left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) \xi_y + \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) \eta_y \right] \right\} d\xi = \\
& = \int_{\xi} \frac{\Xi_n}{Re} \left[g^{11} \left(\frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} H_i \right) + \frac{c_1}{J} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} H_i \right) + \right. \\
& \left. + 2g^{12} \left(\frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \frac{c_2}{J} \left(\Xi_n \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial H_i}{\partial \eta} \right) + \right. \\
& \left. + g^{22} \left(\Xi_n \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \Xi_i \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right) \right] d\xi \quad (4.19)
\end{aligned}$$

όπου c_1 και c_2 υπολογίζονται από την (4.7). Μετά τις κατάλληλες πράξεις, προκύπτει:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_x H_{ui} H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_x H_{ui} H_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_{ui} \eta_x d\eta H_{ui} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \Xi_j \eta_x d\eta H_{ui} \frac{\partial H_j}{\partial \eta} + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_i H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \Xi_j \xi_y d\eta H_i H_j + \\
& + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_i \eta_y d\eta H_i \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \Xi_j \eta_y \frac{\partial H_i}{\partial \eta} = \\
& = \frac{1}{Re} \left\{ \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} d\xi H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} d\xi H_i + \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi H_n + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi H_i + \right. \\
& + \int_{\xi} \Xi_n g^{12} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{12} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_n d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_i d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \\
& \left. + \int_{\xi} \Xi_n^2 g^{22} d\xi \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_i d\xi \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right\} \tag{4.20}
\end{aligned}$$

Ομαδοποιώντας τους παραπάνω όρους ως εξής:

$$\begin{aligned}
a_n &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_y d\xi H_i H_n & b_n &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_i \eta_y d\eta H_i \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \\
c_n &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} \xi_x H_{ui} H_n & d_n &= \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n^2 \Xi_{ui} \eta_x d\eta H_{ui} \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \\
e_n &= -\frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_n}{\partial \xi^2} d\xi H_n & f_n &= -\frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi H_n \\
g_n &= -\frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n g^{12} \frac{\partial \Xi_n}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} & h_n &= -\frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_n d\xi \frac{\partial H_n}{\partial \eta} \\
i_n &= -\frac{1}{Re} \int_{\xi} \Xi_n^2 g^{22} d\xi \frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
RHS_n &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} \Xi_j \xi_y d\eta H_i H_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_i \Xi_j \eta_y \frac{\partial H_i}{\partial \eta} - \\
& - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \frac{\partial \Xi_j}{\partial \xi} \xi_x H_{ui} H_j - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \Xi_{ui} \Xi_j \eta_x d\eta H_{ui} \frac{\partial H_j}{\partial \eta} + \\
& + \frac{1}{Re} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{11} \frac{\partial^2 \Xi_i}{\partial \xi^2} d\xi H_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_1}{J} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi H_i + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{12} \frac{\partial \Xi_i}{\partial \xi} d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \right. \\
& \left. + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n \frac{c_2}{J} \Xi_i d\xi \frac{\partial H_i}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\xi} \Xi_n g^{22} \Xi_i d\xi \frac{\partial^2 H_i}{\partial \eta^2} \right\} \tag{4.21}
\end{aligned}$$

Κλείνει η εσωτερική επαναληπτική διαδικασία με την εξίσωση υπολογισμού της τελευταίας βάσης:

$$\boxed{(a_n + c_n + e_n + f_n)H_n + (b_n + d_n + g_n + h_n)\frac{\partial H_n}{\partial \eta} + i_n\frac{\partial^2 H_n}{\partial \eta^2} = RHS_n} \quad (4.22)$$

Κεφάλαιο 5

Παράδειγμα Επίλυσης ΜΔΕ με PGD σε Καμπυλόγραμμο Πλέγμα

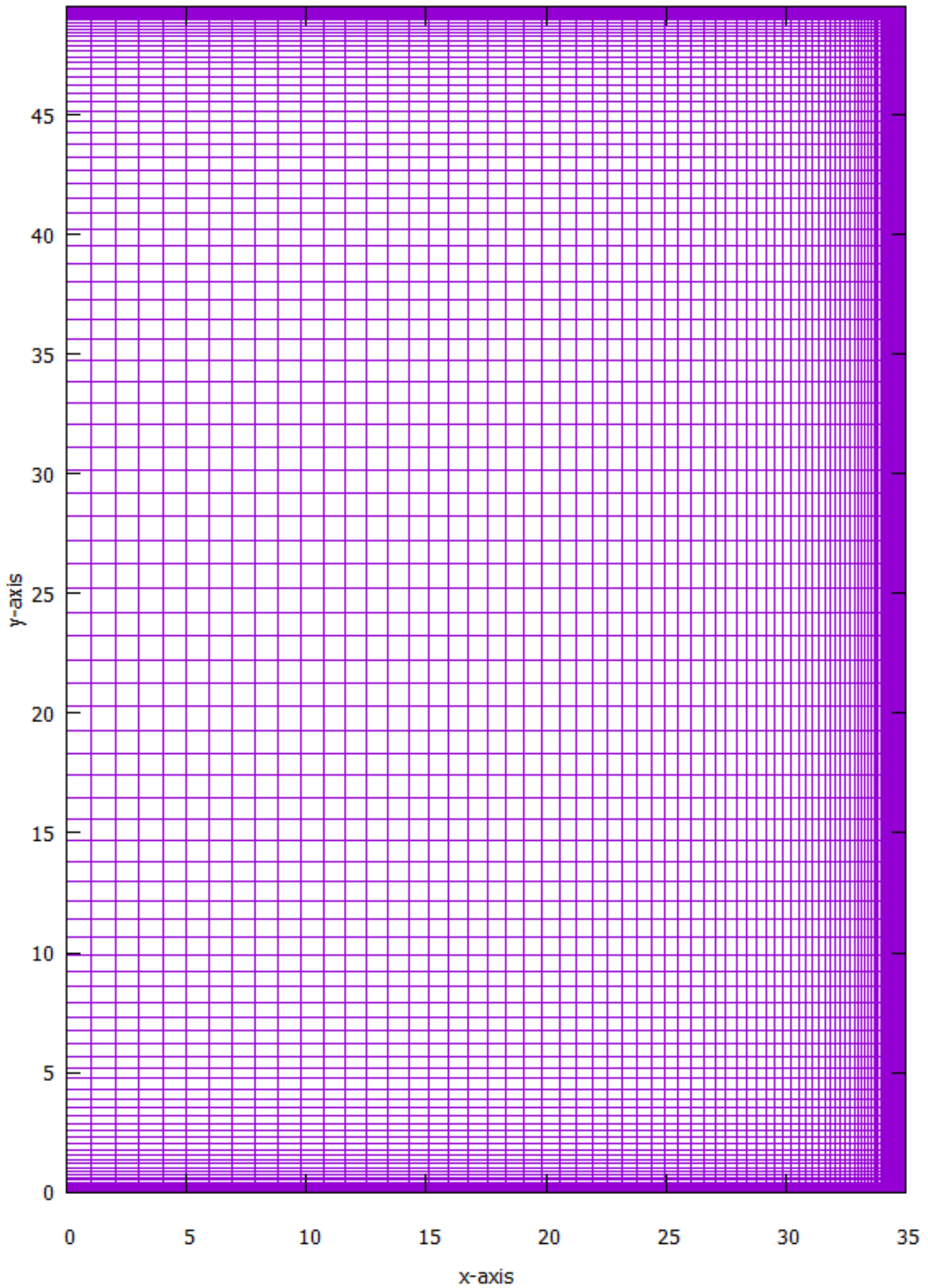
Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστούν αποτελέσματα επίλυσης του 2Δ συστήματος Burgers σε καμπυλόγραμμο πλέγματα βασισμένα στη μέθοδο που αναπτύχθηκε στο Κεφ. 4 και προγραμματίστηκε, ώστε να επαληθευτεί η επιτυχής λειτουργία της και η δυνατότητά της επίλυσης ΜΔΕ σε χωρία οποιασδήποτε μορφής. Και στις δύο περιπτώσεις, το υπολογιστικό χωρίο θα διακριτοποιηθεί σε δομημένο πλέγμα με ίσο ανά διάσταση αριθμό κόμβων, με τη χρήση διαφορετικών οριακών συνθηκών και σχήματος χωρίων. Οι συναρτήσεις που δομούν το τμήμα «εισόδου» στο χωρίο έχουν ως παράμετρο το μέγεθος p , το οποίο αποτελεί το αδιάστατο μήκος επάνω στους κόμβους της πλευράς εισόδου, και ορίζεται ως:

$$p = \frac{i - 1}{n_y - 1}$$

όπου i ο αύξων αριθμός του κάθε κόμβου, και n_y ο συνολικός αριθμός κόμβων στην πλευρά «εισόδου» του πεδίου (σε αυτά τα παραδείγματα, η είσοδος είναι πάντα η αριστερή πλευρά του χωρίου επίλυσης, δηλαδή η πλευρά του πλέγματος όπου $x = 0$). Με αυτόν τον τρόπο γίνεται εμφανές ότι $p \in (0, 1)$. Ως πλάγια του χωρίου θα αναφέρονται η κάτω και η πάνω πλευρά, ενώ ως «έξοδος» η δεξιά. Σε κάθε περίπτωση, στην έξοδο θα επιβάλλεται συνθήκη μηδενικής Neumann, ενώ στα πλάγια, ανάλογα την περίπτωση, είτε μηδενική Dirichlet, είτε μηδενική Neumann.

5.1 Πλέγμα με Πυκνώσεις

Στην πρώτη περίπτωση, το πλέγμα που θα εξεταστεί θα αποτελεί τη διακριτοποίηση ενός ορθογωνικού χωρίου, με πυκνώσεις στα πλάγια και στην δεξιά πλευρά, διατηρώντας την ορθογωνικότητά του, αλλά παύοντας να έχει ισαπέχοντες κόμβους. Το πλέγμα έχει τη μορφή του σχήματος (5.1), με 101 κόμβους ανά πλευρά, και πυκνώσεις στην πάνω, κάτω και δεξιά πλευρά:



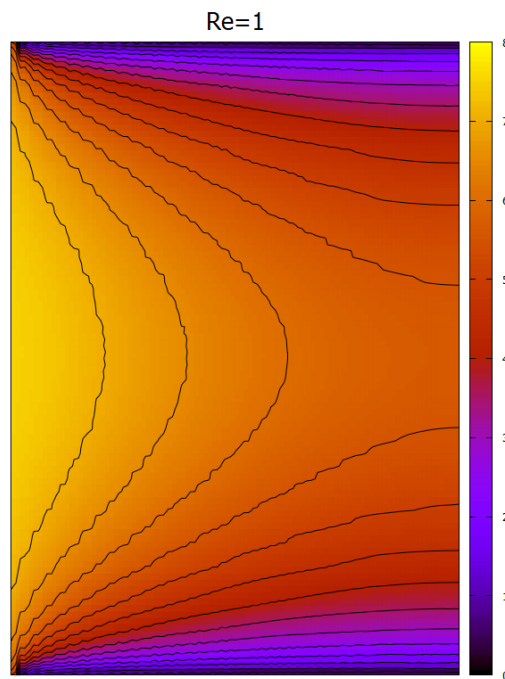
Σχήμα 5.1: Ορθογωνικό πλέγμα επίλυσης με πυκνώσεις.

5.1.1 Παράδειγμα 1ο

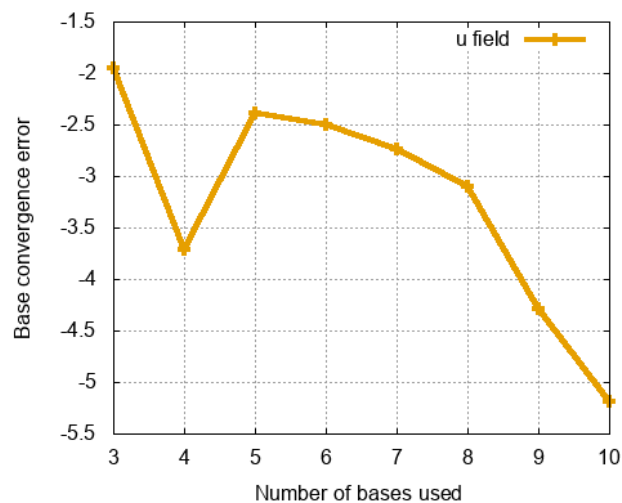
Με τη χρήση του πλέγματος του σχήματος 5.1, ελέγχεται η αποδοτικότητα του κώδικα στην επίλυση του προβλήματος που διέπεται από τη συνάρτηση εισόδου:

$$u = -10p^2 + 10p + 5 \quad (5.1)$$

Με μηδενικές συνθήκες Dirichlet στα πλάγια (δηλαδή στην κάτω και πάνω πλευρά), μηδενικές συνθήκες Neumann στην δεξιά πλευρά (ας ονομαστεί για τις ανάγκες της εφαρμογής έξοδος), το πεδίο που λαμβάνεται και η αντίστοιχη σύγκλιση σχετικού σφάλματος κατά τη σταδιακή επίλυσή του είναι:



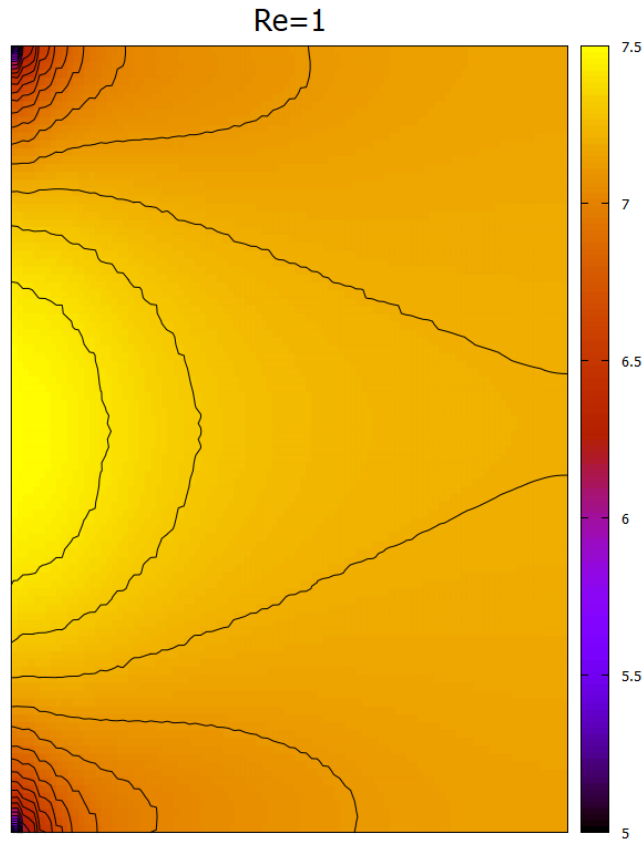
Σχήμα 5.2: Παράδειγμα 1ο: Πεδίο u λυμένο στο πλέγμα 5.1 με χρήση PGD.



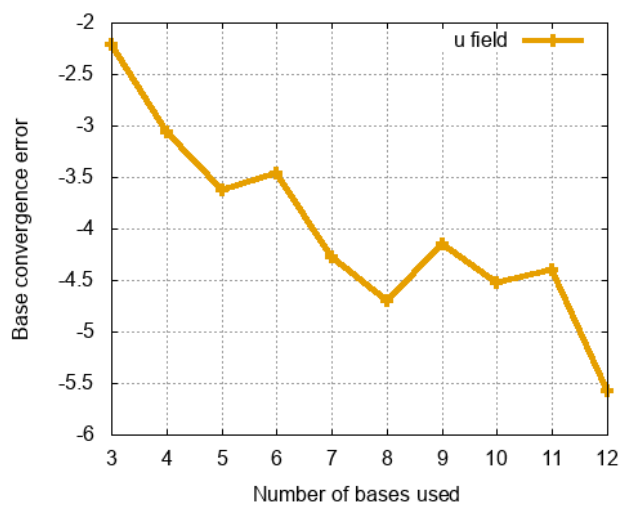
Σχήμα 5.3: Παράδειγμα 1ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

5.1.2 Παράδειγμα 2ο

Σε αντίθεση με πριν, αυτή τη φορά θα γίνει χρήση συνθηκών μηδενικών Neumann στα πλάγια του πεδίου ροής (κάτω και πάνω πλευρά) και στην έξοδο, διατηρώντας την ίδια συνάρτηση εισόδου, πάλι με μηδενική γωνία:



Σχήμα 5.4: Παράδειγμα 2ο: Πεδίο u λυμένο στο πλέγμα 5.1 με χρήση PGD.

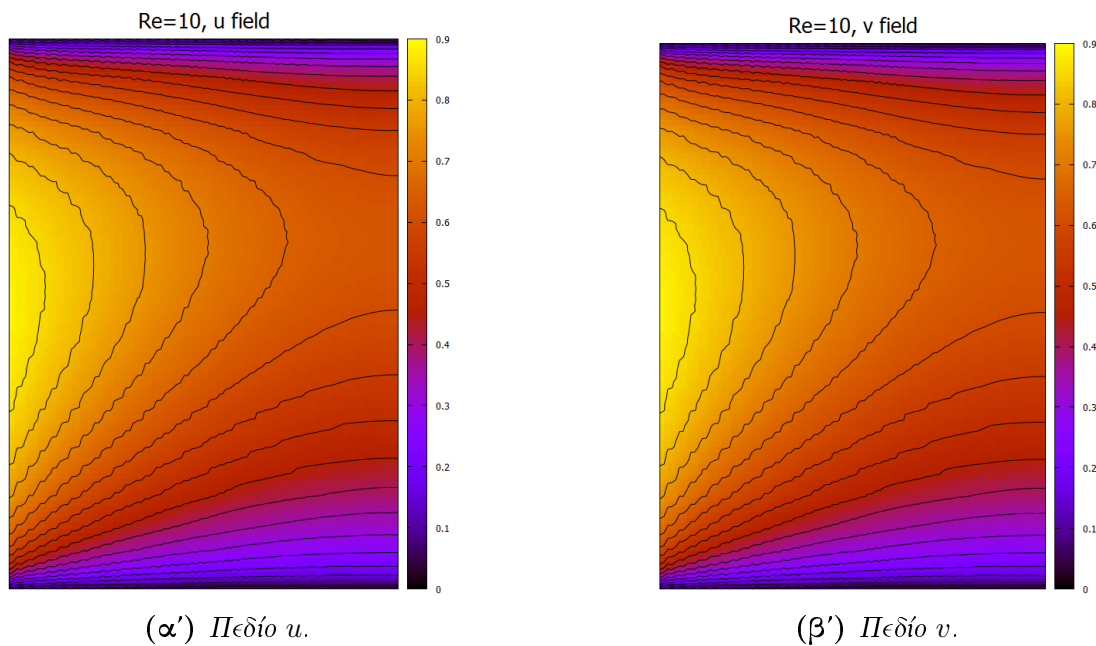


Σχήμα 5.5: Παράδειγμα 2ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

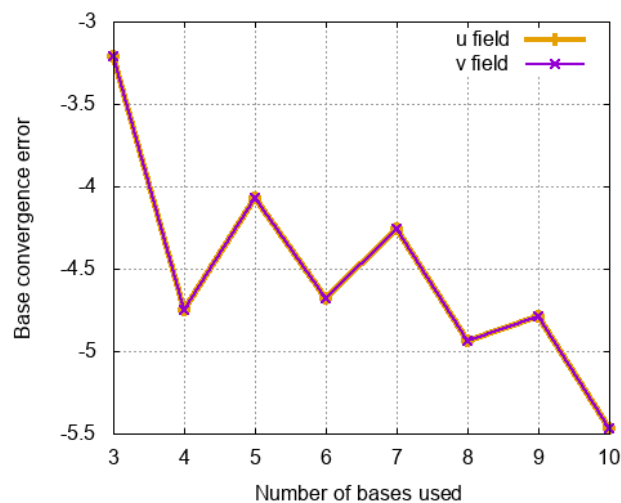
5.1.3 Παράδειγμα 3ο

Σε αυτήν την περίπτωση, ελέγχεται η λειτουργία του κώδικα για το ίδιο πλέγμα, αλλά αυτή τη φορά με αριθμό $Re = 10$, και συνάρτηση εισόδου με κλίση $\phi = 45^\circ$, διεγείροντας -σε αντίθεση με το προηγούμενο παράδειγμα- και την κατά y συνιστώσα, δηλαδή το πεδίο v . Οι οριακές συνθήκες παραμένουν μηδενικές Dirichlet στα πλάγια και μηδενικές Neumann στην έξοδο του πεδίου. Έτσι, με συνάρτηση εισόδου την (5.2), προκύπτουν τα ακόλουθα πεδία:

$$\begin{aligned} u &= 5(-p^2 + p)\cos(\phi) \\ v &= 5(-p^2 + p)\sin(\phi) \end{aligned} \quad (5.2)$$



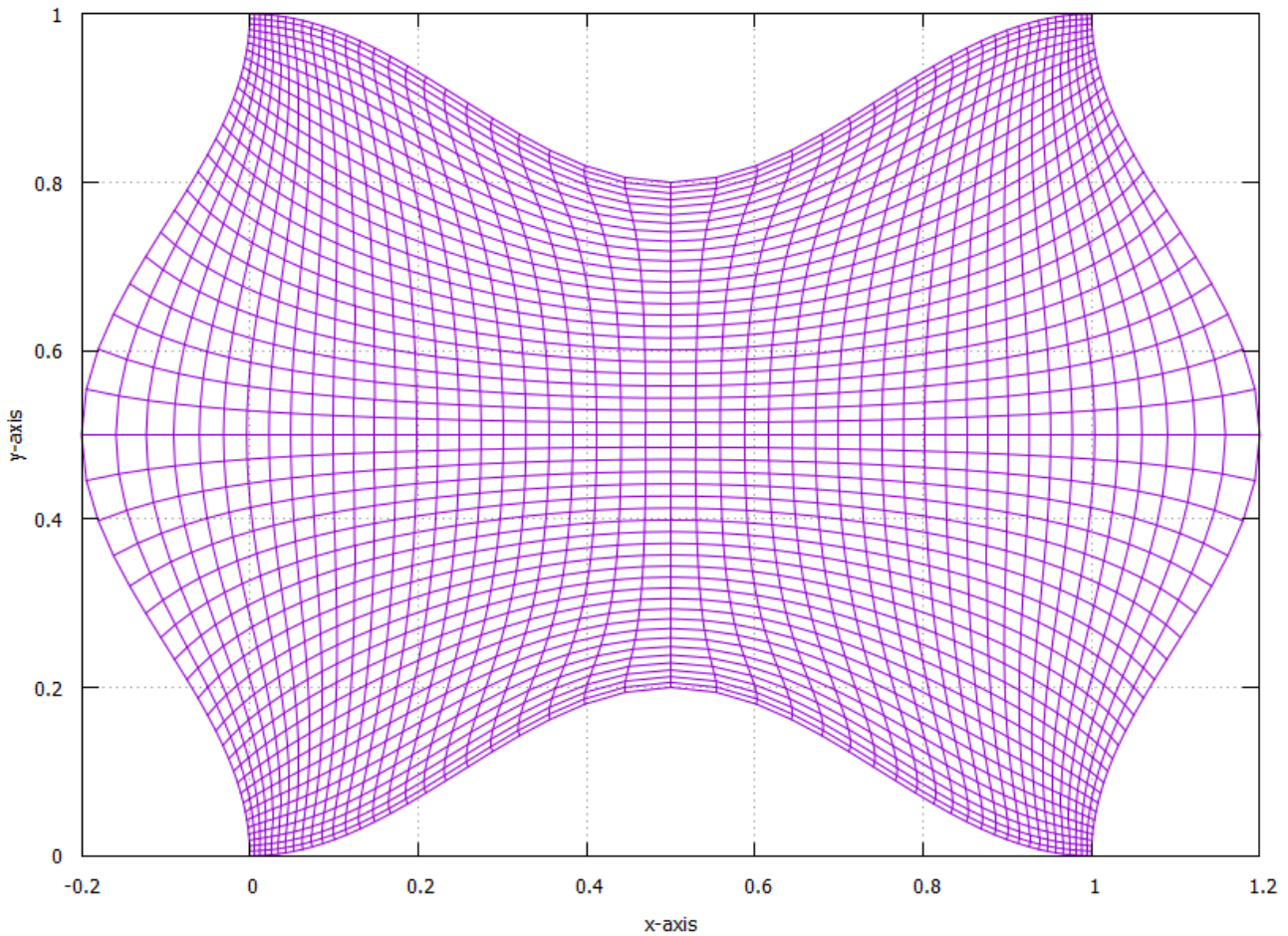
Σχήμα 5.6: Παράδειγμα 3ο: Πεδία u και v λυμένα στο πλέγμα 5.1 με χρήση PGD .



Σχήμα 5.7: Παράδειγμα 3ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

5.2 Καμπυλόγραμμο Πλέγμα

Σε αυτό το παράδειγμα, θα εξεταστεί η λειτουργία του κώδικα στην περίπτωση ενός πεδίου μορφής συγκλίνοντος-αποκλίνοντος ακροφυσίου, το οποίο -σε αντίθεση με την προηγούμενη περίπτωση- έχει όλες τις μετρικές του πλέγματος μη-μηδενικές. Σε κάθε εφαρμογή του κώδικα στην επίλυση στο πλέγμα αυτό, θα γίνει χρήση οριακών συνθηκών Dirichlet στην είσοδο (αριστερή πλευρά) με την κατανομή που ορίζεται στο κάθε παράδειγμα, μηδενικών συνθηκών Dirichlet στα πλάγια (πάνω και κάτω πλευρά), και μηδενικής Neumann στην έξοδο (δεξιά πλευρά). Το συγκεκριμένο πλέγμα είναι διάστασης 51×51 κόμβων, και είναι το εξής (Σχήμα 5.8):



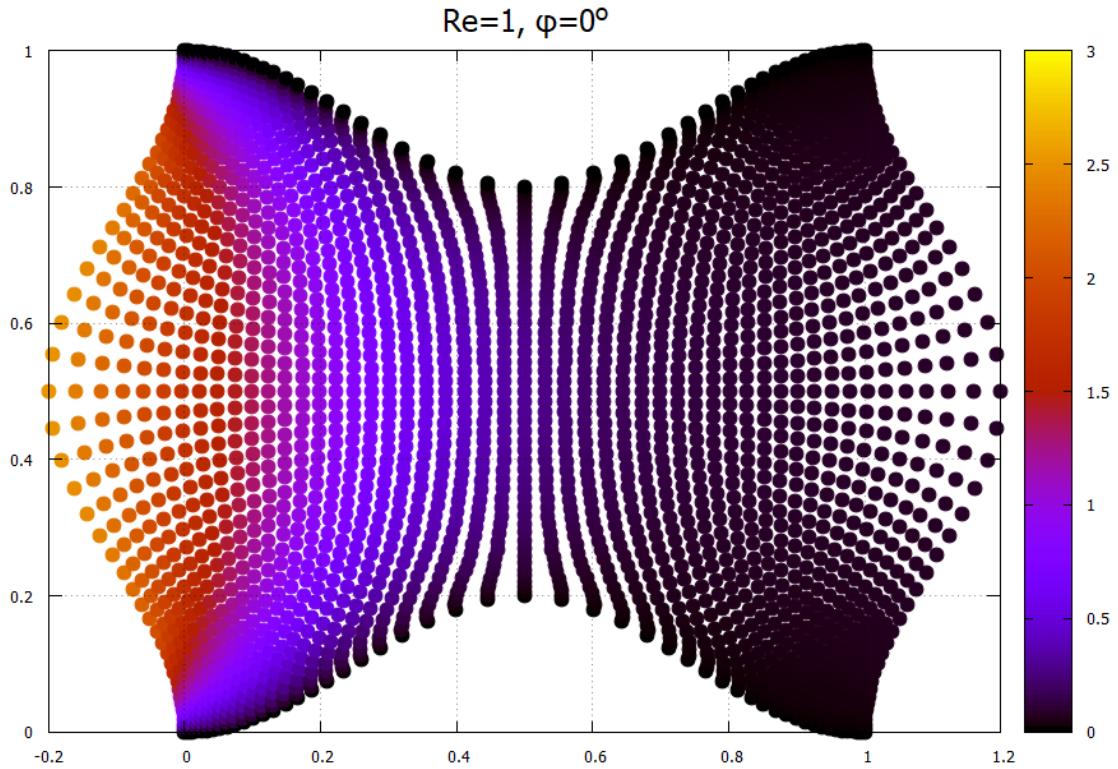
Σχήμα 5.8: Καμπυλόγραμμο πλέγμα Παραδειγμάτων 4, 5, 6, μορφής συγκλίνοντος-αποκλίνοντος ακροφυσίου, με 51 κόμβους ανά πλευρά.

5.2.1 Παράδειγμα 4ο

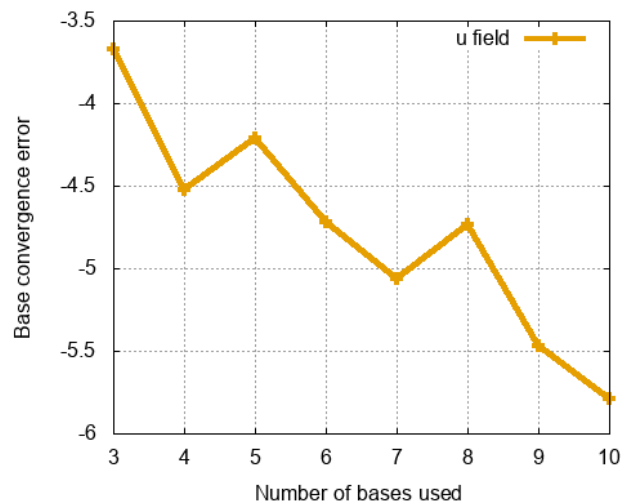
Με κατανομή εισόδου την:

$$u = -10p^2 + 10p \quad (5.3)$$

και μηδενική γωνία προβολής, με αριθμό $Re=1$, προκύπτει:



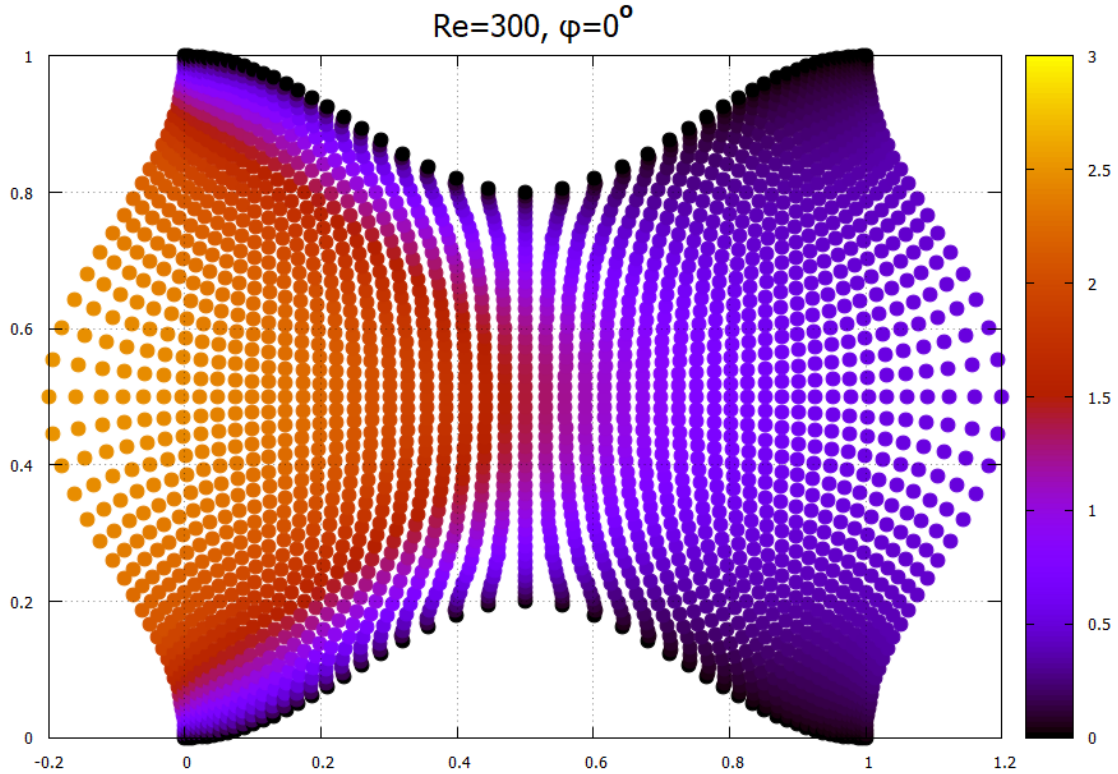
Σχήμα 5.9: Παράδειγμα 4ο: Πεδίο u λυμένο στο πλέγμα 5.8 με χρήση PGD.



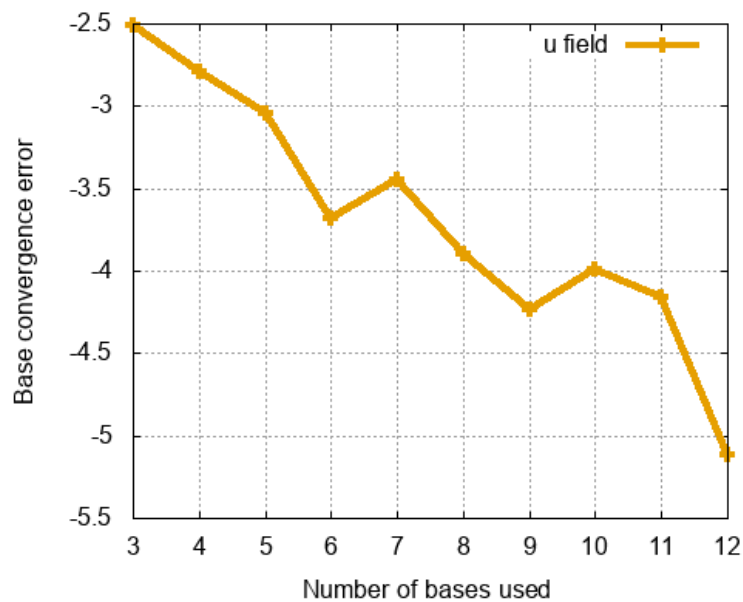
Σχήμα 5.10: Παράδειγμα 4ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

5.2.2 Παράδειγμα 5ο

Με ίδια κατανομή εισόδου με πριν, αλλά αυτή τη φορά «ζυγίζοντας» διαφορετικά τους όρους μεταφοράς και διάχυσης, δηλαδή με $Re=300$, προκύπτει:



Σχήμα 5.11: Παράδειγμα 5ο: Πεδίο u λυμένο στο πλέγμα 5.8 με χρήση PGD.



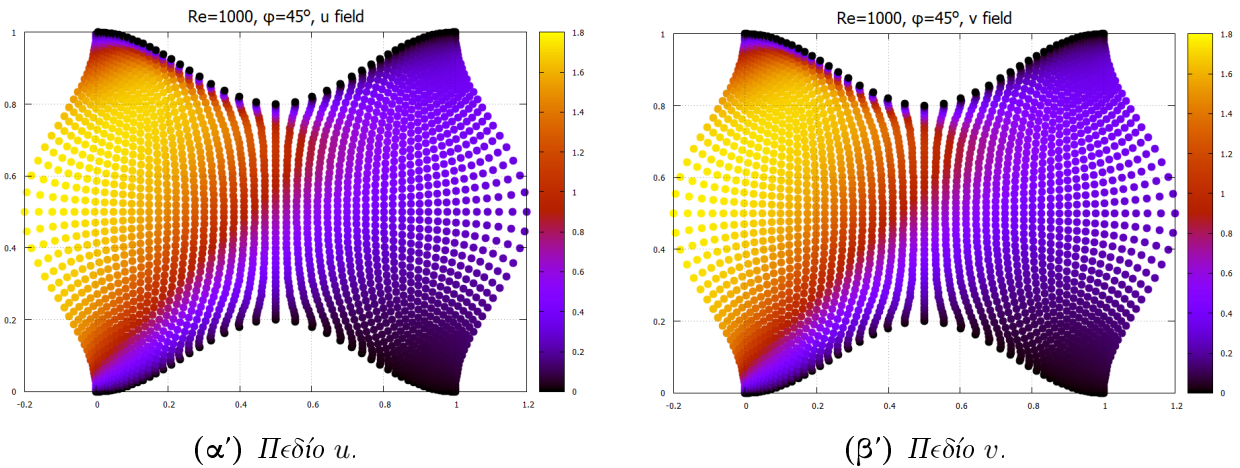
Σχήμα 5.12: Παράδειγμα 5ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

5.2.3 Παράδειγμα 6ο

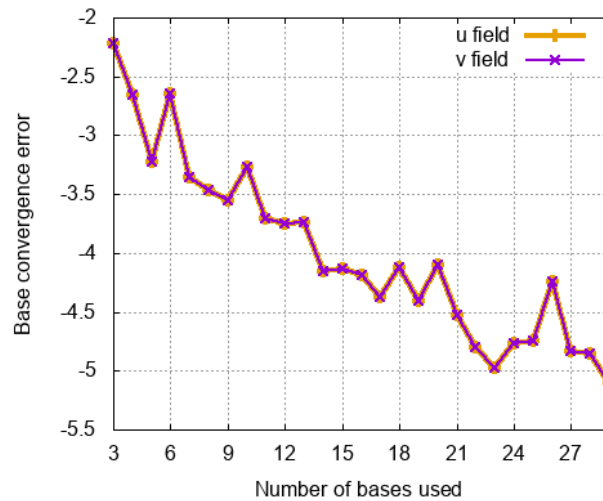
Τέλος, στο ίδιο πλέγμα, αλλά με είσοδο υπό κλίση, $\phi = 45^\circ$, με κατανομή εισόδου:

$$\begin{aligned} u &= 10(-p^2 + p)\cos(\phi) \\ v &= 10(-p^2 + p)\sin(\phi) \end{aligned} \quad (5.4)$$

με αριθμό $Re=1000$ και μηδενικές οριακές συνθήκες τα πλάγια (Dirichlet), λαμβάνεται:



Σχήμα 5.13: Παράδειγμα 6ο: Πεδία u και v λυμένα στο πλέγμα 5.8 με χρήση PGD.



Σχήμα 5.14: Παράδειγμα 6ο: Σχετικό σφάλμα σύγκλισης όπως ορίζεται από την εξίσωση (2.30).

5.3 Αποτελέσματα-Σχολιασμοί

Στα παραπάνω παραδείγματα εφαρμόστηκαν διάφοροι συνδυασμοί τύπου πλέγματος, οριακών συνθηκών. Η ελάττωση του σχετικού σφάλματος σύγκλισης επιβεβαιώνει την επιτυχή λειτουργία της μεθόδου στις περιπτώσεις που εξετάστηκαν. Στις περιπτώσεις όπου ο αριθμός Re είναι μεγάλος, είναι εμφανής η μικρότερη διάχυση που εμφανίζεται στο πεδίο, αλλά ταυτόχρονα και η λιγότερο διαχωρίσιμη μορφή του πεδίου, η οποία απαιτεί μεγαλύτερο αριθμό βάσεων για την επιτυχή προσέγγισή της. Επαληθεύεται λοιπόν, και στο καμπυλόγραμμο πλέγμα, πως η μορφή του πεδίου (η οποία στα παραδείγματα αυτά καθορίζεται από τον αριθμό Reynolds), παίζει σημαντικό ρόλο στο πόσο διαχωρίσιμο αυτό εν τέλει είναι, και άρα στο πόσο γρήγορα και αποδοτικά αυτό θα προσεγγισθεί από το PGD.

5.3.1 Απαιτούμενη Μνήμη

Γενικότερος σκοπός του PGD είναι η ελάττωση της απαιτούμενης για την επίλυση του πεδίου μνήμης. Σε 2Δ πεδία, όπως είναι αυτά που μελετώνται στη διπλωματική αυτή εργασία, όταν ισχύει η ανισότητα (3.2.1), δηλαδή:

$$N_b < \frac{N}{2}$$

η επίλυση με χρήση του PGD, από την άποψη της μνήμης, είναι συμφέρουσα.

Ο πίνακας 5.1 δείχνει τις απαιτούμενες θέσεις μνήμης/κόμβους σε καθεμία από τις έξι παραπάνω περιπτώσεις που ελέγχθηκαν, με τη χρήση PGD, και με τη χρήση συμβατικού επιλύτη, αλλά και το κέρδος σε κάθε περίπτωση.

Required Memory					
Example	Grid Size	Number of fields	Conventional Solver	PGD Solver	Percentage (%)
1	101 × 101	1	10201	2020	19.80
2	101 × 101	1	10201	2424	23.76
3	101 × 101	2	20402	4040	19.80
4	51 × 51	1	2601	1020	39.21
5	51 × 51	1	2601	1224	47.05
6	51 × 51	2	5202	5916	113.72

Πίνακας 5.1: Σύγκριση της απαιτούμενης μνήμης για επίλυση μέσω PGD και συμβατικής επίλυσης.

Παρατηρείται πως σε καθεμία από τις παραπάνω περιπτώσεις -εκτός της τελευταίας-, η ανισότητα αυτή ικανοποιείται, δείχνοντας τη συμφέρουσα χρήση του PGD και στις περιπτώσεις καμπυλόγραμμων πλεγμάτων σε τυχαία χωρία. Τα συμπεράσματα που μπορούν να εξαχθούν είναι σχετικά όμοια με αυτά της επίλυσης σε καρτεσιανό χωρίο. Τα κέρδη σε απλά, ευκόλως διαχωρίσιμα πεδία (Παράδειγμα 1, 5.1.1) είναι σημαντικά. Όπως αναφέρθηκε, ο αριθμός Reynolds παίζει μεγάλο

ρόλο στο πόσο διαχωρίσιμο θα είναι τελικά ένα πεδίο. Έτσι, στα παραδείγματα όπου ο αριθμός Reynolds μεγαλώνει, οι απαιτούμενες βάσεις για ένα δοσμένο σφάλμα (σε κάθε περίπτωση $\epsilon = -5$) αυξάνονται. Επίσης, δείχθηκε στα παραδείγματα του Κεφ. 3 πως η διάσταση του πλέγματος ανά κατεύθυνση/διάσταση δεν παίζει σημαντικό ρόλο στον απαιτούμενο αριθμό βάσεων, καθώς και ότι μια αύξηση στη διακριτοποίηση δίνει μεγαλύτερο κέρδος μνήμης. Έτσι, σε ένα σχετικά μικρό πλέγμα, όπως αυτό των Παραδειγμάτων 4 (5.2.1), 5 (5.2.2) και 6 (5.2.3), καθώς απαιτείται ένας σταθερός αριθμός βάσεων για την αποτύπωση της κάθε λύσης, η μικρότερη διάσταση του πλέγματος θα μικρύνει το όφελος που θα έχει η επίλυση μέσω PGD. Μάλιστα, στο Παράδειγμα 6 (5.2.3), λόγω της έντονης μη-διαχωρισιμότητας, αλλά και του μικρού μεγέθους του πλέγματος, από τον πίνακα 5.1 γίνεται εμφανές πως δεν υπάρχει κέρδος στην εφαρμογή της μεθόδου για την επίλυσή του.

Παρά την επιτυχή εφαρμογή της μεθόδου στις παραπάνω περιπτώσεις, δεν παύουν να εμφανίζονται ορισμένα προβλήματα κατά τη χρήση του PGD ως επιλύτη προβλημάτων διατυπωμένων σε καμπυλόγραμμα πλέγματα. Αρκετές φορές, σε σημαντικά μεγάλες πυκνώσεις του πλέγματος, ενδέχεται ο κώδικας να αδυνατήσει να προσεγγίσει σωστά την τρέχουσα βάση, εν τέλει οδηγώντας στην απόκλιση της λύσης. Ο λόγος για τον οποίο συμβαίνει αυτό έχει προαναφερθεί και στην Ενότητα 2.4.1, όπου η ασυνέχεια που εμφανίζεται το αρχικό πεδίο των οριακών συνθηκών, σε ένα πυκνότερο πλέγμα, οδηγεί σε μεγάλες τιμές της παραγώγου, οδηγώντας έτσι σε αριθμητική αστάθεια. Τέτοια προβλήματα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη όταν το προς επίλυση πρόβλημα ζητείται να λυθεί με τη χρήση του PGD, δεδομένου ότι κάποιες φορές δεν είναι δυνατή η επίλυση με τη μέθοδο. Προφανώς είναι ένα τμήμα της μεθόδου που χρήζει περισσότερης μελέτης και ανάπτυξης σε μελλοντικές εργασίες και εφαρμογές της.

Κεφάλαιο 6

Προγραμματισμός της Συζυγούς Μεθόδου στη 2Δ Εξίσωση Burgers με PGD

Σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης που βασίζεται στη συζυγή μέθοδο για τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας μιας συνάρτησης στόχου, απαιτείται η πλήρης αποθήκευση όλου του πεδίου σε όλες τις συνιστώσες (συμπεριλαμβανομένου και του χρόνου), ώστε να γίνει δυνατός ο υπολογισμός τους. Σε ένα μη-μόνιμο πρόβλημα, είναι αναγκαία η χρήση αρκετών χρονικών βημάτων για την επίτευξη της επιθυμητής ακρίβειας της λύσης του πεδίου, απαιτώντας ένα σημαντικό όγκο μνήμης. Σε κάθε περίπτωση δηλαδή, η απαιτούμενη υπολογιστική ισχύς και μνήμη είναι ιδιαίτερα αυξημένες.

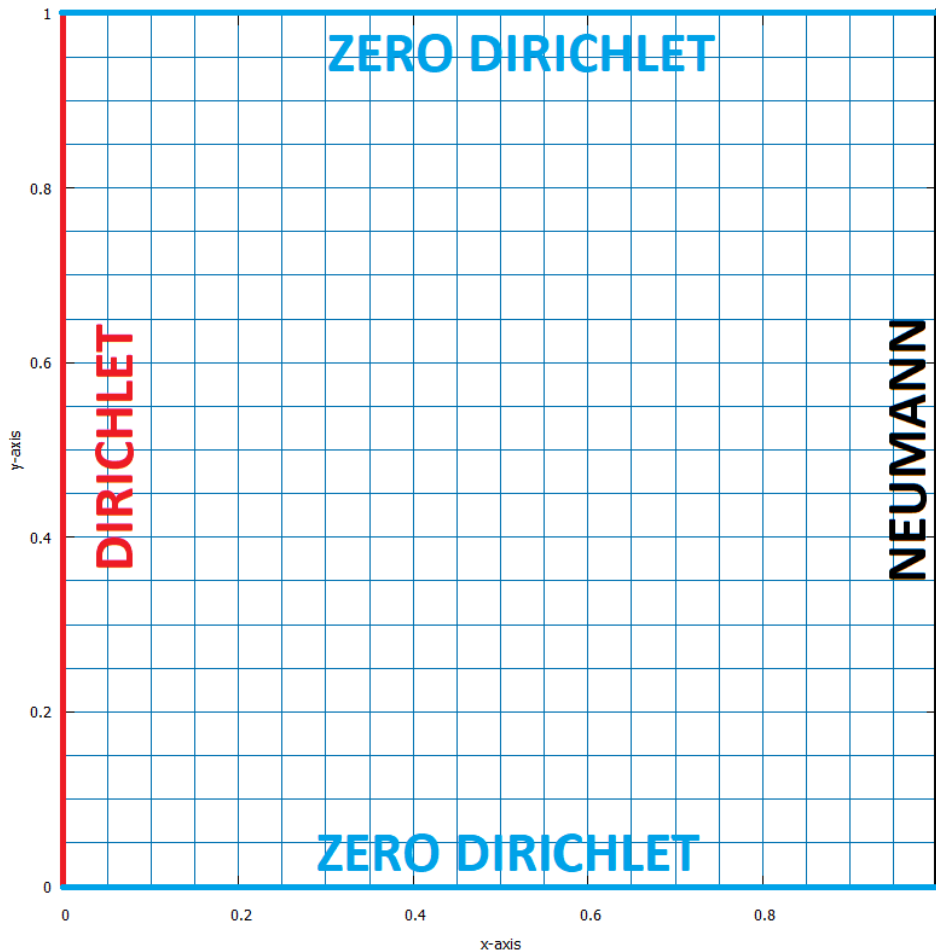
Άμεσα γίνεται αντιληπτή η ανάγκη ύπαρξης ενός τρόπου βελτιστοποίησης ενός πεδίου, με ελαχιστοποίηση της απαιτούμενης μνήμης. Μέσω της χρήσης του PGD, επιτυγχάνεται μια σημαντική ελάττωση της απαιτούμενης από το πεδίο μνήμης, με ελάχιστη απώλεια πληροφορίας, καθιστώντας την ιδανική εκτός της επίλυσης του πρωτεύοντος προβλήματος, και για την επίλυση του συζυγούς προβλήματος για χρήση στη βελτιστοποίηση.

Στο τρέχον κεφάλαιο, γίνεται μια επίδειξη της μεθόδου με την επίλυση του πρωτεύοντος πεδίου (φυσικού προβλήματος) αλλά και του συζυγούς του να γίνεται με τη χρήση του PGD χωρίς να υπάρχει αναδόμηση του πεδίου σε κανένα στάδιο της διαδικασίας, διατηρώντας τον απαιτούμενο όγκο μνήμης στο ελάχιστο δυνατό, με όλα τα πεδία να περιγράφονται από τις συναρτήσεις-βάσεις τους. Αρχικά το συζυγές πρόβλημα διατυπώνεται στη συμβατική μορφή, και στη συνέχεια εφαρμόζεται η μέθοδος PGD σε αυτό για την επίλυση του και τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας.

Για να εκτιμηθεί η ορθή λειτουργία της μεθόδου, το αποτέλεσμα που θα προκύψει (οι παράγωγοι ευαισθησίας) θα συγκριθούν με συμβατικές μεθόδους βελτιστοποίησης βασιζόμενες στην απότομη κλίση (πεπερασμένες διαφορές), και συμβατικές μεθόδους επίλυσης (επίλυση συζυγούς πεδίου με μέθοδο Jacobi). Η αξία των προσομοιώσεων έγκειται στο να διαπιστωθεί εάν η μέθοδος δύναται να λειτουργήσει αποτελεσματικά, διαπιστώνοντας το μέγεθος των σφαλμάτων που εισάγει η χρήση προσεγγιστικών πεδίων, αλλά και η γενικότερη χρήση της μεθόδου PGD στον πλήρη κύκλο μελέτης μιας διαδικασίας που απασχολεί την ΥΠΔ (επίλυση-βελτιστοποίηση).

6.1 Διατύπωση Πρωτεύοντος Προβλήματος

Η βελτιστοποίηση που θα πραγματοποιηθεί θα έχει ως στόχο την ελαχιστοποίηση του σφάλματος της κάθετης ταχύτητας εξόδου του πεδίου σε σχέση με μια προκαθορισμένη συνάρτηση, γνωστό και ως πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού. Θεωρούμε πως το προς βελτιστοποίηση πρόβλημα βρίσκεται σε ορθοκανονικό χωρίο $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ (Σχήμα 6.1).



Σχήμα 6.1: Ορθοκανονικό πλέγμα που θα χρησιμοποιηθεί για την βελτιστοποίηση-αντίστροφο σχεδιασμό της εφαρμογής του PGD στη συνεχή συζυγή μέθοδο.

Τα 0 και 1 είναι συμβολικά και δηλώνουν τα όρια του υπολογιστικού πεδίου στο οποίο γίνεται η επίλυση του συζυγούς προβλήματος. Ως παράμετρος σχεδιασμού θα είναι η κατανομή της ταχύτητας στην είσοδο του πεδίου, η οποία περιγράφεται από ένα άθροισμα συναρτήσεων με τα κατάλληλα βάρη-παραμέτρους:

$$u(0, y) = \sum_{i=1}^k b_i f_i(y) \quad (6.1)$$

όπου f_i είναι οποιαδήποτε κατάλληλη οικογένεια συναρτήσεων βάσεις. Στην συγκεκριμένη

περίπτωση, θα χρησιμοποιηθούν πέντε (5) όροι, με τις συναρτήσεις αυτές να είναι μονώνυμα $i - 1$ βαθμού, δηλαδή το τελικό πολυώνυμο που θα προκύψει θα είναι τετάρτου (4ου) βαθμού, άρα:

$$f_i(x) = x^{i-1}, i = 1, 2, 3, \dots$$

και:

$$u(0, y) = b_1 + b_2y + b_3y^2 + b_4y^3 + b_5y^4 \quad (6.2)$$

Όπως και τις προηγούμενες φορές, έτσι και τώρα, θα χρησιμοποιηθεί οριακή συνθήκη Dirichlet στην είσοδο, δοσμένη από την παραπάνω συνάρτηση, στα πλάγια (επάνω και κάτω μέρος του χωρίου υπολογισμού) θα γίνει χρήση μηδενικών Dirichlet, ενώ στην έξοδο (δεξιά πλευρά χωρίου), μηδενική Neumann.

Η αντικειμενική συνάρτηση που καλείται να ελαχιστοποιηθεί είναι η:

$$F = \frac{1}{2} \int_y \left(u(1, y) - u_{tar}(y) \right)^2 dy \quad (6.3)$$

όπου $u_{tar}(y)$ η επιθυμητή κατανομή του πεδίου u στην έξοδο, δηλαδή είναι ένα πρόβλημα αντιστρόφου σχεδιασμού (inverse design).

Οι εξισώσεις που διέπουν το προς επίλυση πρωτεύον (φυσικό) πρόβλημα της βελτιστοποίησης είναι οι δύο εξισώσεις Burgers, οι οποίες με όλους τους όρους συγκεντρωμένους στο αριστερό μέλος, γράφονται ως:

$$\begin{aligned} R_1 &= u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0 \\ R_2 &= u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (6.4)$$

• Οριακές Συνθήκες Πρωτεύοντος Προβλήματος

Το πρόβλημα που καλείται να βελτιστοποιηθεί μέσω του υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας, αποτελείται από δύο πεπλεγμένα πεδία σε χωρίο τύπου «σωλήνα» (μηδενικές οριακές συνθήκες στα πλάγια), άρα οι οριακές συνθήκες θα είναι:

$$\begin{aligned} u(0, y) &= \sum_{i=1}^5 b_i y^{i-1} & v(0, y) &= 0 \\ u(x, 0) &= 0 & v(x, 0) &= 0 \\ u(x, 1) &= 0 & v(x, 1) &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1} &= 0 & \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=1} &= 0 \end{aligned}$$

Για ύπαρξη συνέχειας της λύσης στα άκρα του πεδίου -καθώς στα στερεά τοιχώματα του χωρίου επίλυσης τίθεται μηδενική οριακή συνθήκη-, πρέπει και η είσοδος να ικανοποιεί τη συγκεκριμένη συνθήκη, δηλαδή:

$$\begin{aligned} u(0, 0) &= 0 \\ u(0, 1) &= 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

Η κατανομή εισόδου είναι ανεπτυγμένη σε άθροισμα, με μεταβλητές σχεδιασμού τα βάρη κάθε

συνάρτησης βάσης. Στη συγκεκριμένη περίπτωση καθώς θα γίνει χρήση πέντε (5) όρων, είναι:

$$u(0, y) = \sum_{i=1}^k b_i f_i(y) \xrightarrow{k=5}$$

$$u(0, y) = b_1 + b_2 y + b_3 y^2 + b_4 y^3 + b_5 y^4$$

$$u(0, 0) = b_1 = 0$$

$$\boxed{b_1 = 0}$$

και ομοίως για την άλλη πλευρά του χωρίου:

$$u(0, y) = \sum_{i=1}^k b_i f_i(y) \xrightarrow[k=5]{b_1=0}$$

$$u(0, y) = b_2 y + b_3 y^2 + b_4 y^3 + b_5 y^4$$

$$u(0, 1) = b_2 + b_3 + b_4 + b_5 = 0$$

$$\boxed{b_2 = -b_3 - b_4 - b_5}$$

Συνεπώς, για να ορίζονται ορθά οι οριακές συνθήκες, μόνο τρεις από τους πέντε συντελεστές των μονωνύμων θα είναι πραγματικά ελεύθεροι, με τους άλλους να καθορίζονται άμεσα από τις παραπάνω σχέσεις (ιδιαίτερη προσοχή θα δοθεί στο πώς θα υπολογισθούν πλέον οι παράγωγοι ευαισθησίας μέσω της συνεχούς συζυγούς μεθόδου). Έτσι, η τελική σχέση που θα ορίζει την ταχύτητα εισόδου θα είναι:

$$u(0, y) = \sum_{i=1}^5 b_i f_i(y)$$

$$u(0, y) = b_1 + b_2 y + b_3 y^2 + b_4 y^3 + b_5 y^4 \xrightarrow[b_2=-b_3-b_4-b_5]{b_1=0}$$

$$u(0, y) = (-b_3 - b_4 - b_5)y + b_3 y^2 + b_4 y^3 + b_5 y^4$$

$$u(0, y) = b_3(y^2 - y) + b_4(y^3 - y) + b_5(y^4 - y) \quad (6.6)$$

Η επαυξημένη αντικειμενική, δεδομένου ότι για την περιγραφή του προβλήματος υπάρχουν δύο εξισώσεις (6.4), θα είναι:

$$F_{aug} = F + \int_x \int_y \Psi_1 R_1 dy dx + \int_x \int_y \Psi_2 R_2 dy dx \quad (6.7)$$

και παραγωγίζοντας τη μορφή των παραπάνω μεγεθών ως προς τις παραμέτρους σχεδιασμού (b_i) (συμβολικά η παράγωγος αυτή θα αναπαρίσταται με δ):

$$\delta F_{aug} = \delta F + \int_x \int_y \delta \Psi_1 R_1 dy dx + \int_x \int_y \Psi_1 \delta R_1 dy dx + \int_x \int_y \delta \Psi_2 R_2 dy dx + \int_x \int_y \Psi_2 \delta R_2 dy dx \quad (6.8)$$

Καθώς οι εξισώσεις του πρωτεύοντος προβλήματος επαληθεύονται πάντα, δηλαδή $R_1 = R_2 = 0$, η παραπάνω μορφή απλοποιείται:

$$\delta F_{aug} = \delta F + \int_x \int_y \Psi_1 \delta R_1 dy dx + \int_x \int_y \Psi_2 \delta R_2 dy dx \quad (6.9)$$

Η παραπάνω εξίσωση σε ανεπτυγμένη μορφή, γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} = & \int_y \left[u(1, y) - u_{target}(y) \right] \delta u dy + \\ & + \int_x \int_y \Psi_1 \delta \left[u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right] dy dx + \\ & + \int_x \int_y \Psi_2 \delta \left[u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right] dy dx \end{aligned} \quad (6.10)$$

Με ανάπτυξη των όρων λαμβάνεται:

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} = & \int_y \left[u(1, y) - u_{tar}(y) \right] \delta u dy + \\ & + \int_x \int_y \left[\Psi_1 \delta u \frac{\partial u}{\partial x} + \underbrace{\Psi_1 u \frac{\partial(\delta u)}{\partial x}}_{I_1} + \Psi_1 \delta v \frac{\partial u}{\partial y} + \underbrace{\Psi_1 v \frac{\partial(\delta u)}{\partial y}}_{I_2} - \frac{1}{Re} \underbrace{\Psi_1 \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial x^2}}_{I_3} - \frac{1}{Re} \underbrace{\Psi_1 \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial y^2}}_{I_4} \right] dy dx + \\ & + \int_x \int_y \left[\Psi_2 \delta u \frac{\partial v}{\partial x} + \underbrace{\Psi_2 u \frac{\partial(\delta v)}{\partial x}}_{I_5} + \Psi_2 \delta v \frac{\partial v}{\partial y} + \underbrace{\Psi_2 v \frac{\partial(\delta v)}{\partial y}}_{I_6} - \frac{1}{Re} \underbrace{\Psi_2 \frac{\partial^2(\delta v)}{\partial x^2}}_{I_7} - \frac{1}{Re} \underbrace{\Psi_2 \frac{\partial^2(\delta v)}{\partial y^2}}_{I_8} \right] dy dx \end{aligned} \quad (6.11)$$

Για να επιτευχθεί η διατύπωση των Πεδιακών Συζυγών Εξισώσεων (Field Adjoint Equations-FAE), απαιτείται όλοι οι όροι που περιλαμβάνουν τους όρους δu και δv να βρίσκονται σε μορφή μηδενικής παραγώγου, και συνολικά να μηδενίζονται. Στους όρους της επαυξημένης αντικειμενικής όπου εμφανίζονται σε ακατάλληλη μορφή, θα πραγματοποιηθεί παραγοντική ολοκλήρωση για να αρθεί το πρόβλημα αυτό.

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}_1 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_1 u \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_1 u)}{\partial x} \delta u dy dx \\
\mathbf{I}_2 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_1 v \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_1 v \delta u dy \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_1 v)}{\partial y} \delta u dy dx \\
\mathbf{I}_3 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial x^2} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dy dx \\
&= \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} (\delta u) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} \delta u dy dx \\
\mathbf{I}_4 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial y^2} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dy dx \\
&= \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} (\delta u) dx \right]_{y=0}^{y=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial y^2} \delta u dy dx \\
\mathbf{I}_5 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_2 u \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_2 u \delta v dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_2 u)}{\partial x} \delta v dy dx \\
\mathbf{I}_6 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_2 v \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_2 v \delta v dx \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_2 v)}{\partial y} \delta v dy dx \\
\mathbf{I}_7 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial^2(\delta v)}{\partial x^2} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dy dx \\
&= \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} (\delta v) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \delta v dy dx \\
\mathbf{I}_8 &= \int_0^1 \int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial^2(\delta v)}{\partial y^2} dy dx = \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dy dx \\
&= \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} (\delta v) dx \right]_{y=0}^{y=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} \delta v dy dx
\end{aligned}$$

Με αντικατάσταση και αναδιάταξη των όρων στην επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση,

λαμβάνεται:

$$\begin{aligned}
\delta F_{aug} = & \int_y [u(1, y) - u_{tar}] \delta u dy + \\
& + \int_x \int_y \Psi_1 \delta u \frac{\partial u}{\partial x} dy dx + \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_1 u)}{\partial x} \delta u dy dx}_{I_1} + \\
& + \int_x \int_y \Psi_1 \delta v \frac{\partial u}{\partial y} dy dx + \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_1 v \delta u dx \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_1 v)}{\partial y} \delta u dy dx}_{I_2} - \\
& - \frac{1}{Re} \left\{ \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} (\delta u) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} \delta u dy dx}_{I_3} + \right. \\
& + \left. \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} (\delta u) dx \right]_{y=0}^{y=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial y^2} \delta u dy dx}_{I_4} \right\} + \\
& + \int_x \int_y \Psi_2 \delta u \frac{\partial v}{\partial x} dy dx + \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_2 u \delta v dy \right]_{x=0}^{x=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_2 u)}{\partial x} \delta v dy dx}_{I_5} + \\
& + \int_0^1 \int_0^1 \Psi_2 \delta v \frac{\partial v}{\partial y} dy dx + \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_2 v \delta v dx \right]_{y=0}^{y=1} - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial(\Psi_2 v)}{\partial y} \delta v dy dx}_{I_6} - \\
& - \frac{1}{Re} \left\{ \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dx \right]_{x=0}^{x=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} (\delta v) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \delta v dy dx}_{I_7} + \right. \\
& + \left. \underbrace{\left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} (\delta v) dx \right]_{y=0}^{y=1} + \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} \delta v dy dx}_{I_8} \right\}
\end{aligned} \tag{6.12}$$

$$\begin{aligned}
\delta F_{aug} = & \int_y [u(1, y) - u_{tar}(y)] \delta u dy + \\
& + \int_x \int_y \delta u \left[\Psi_1 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_1 u)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_1 v)}{\partial y} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial y^2} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \Psi_2 \frac{\partial v}{\partial x} \right] dy dx + \\
& + \int_x \int_y \delta v \left[\Psi_2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial(\Psi_2 u)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_2 v)}{\partial y} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \Psi_1 \frac{\partial u}{\partial y} \right] dy dx + \\
& + \left[\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy \right]_{x=0}^{x=1} + \left[\int_0^1 \Psi_1 v \delta u dx \right]_{y=0}^{y=1} - \frac{1}{Re} \left\{ \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \right. \\
& - \left. \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} (\delta u) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \left[\int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial(\delta u)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} (\delta u) dx \right]_{y=0}^{y=1} \right\} + \\
& + \left[\int_0^1 \Psi_2 u \delta v dy \right]_{x=0}^{x=1} + \left[\int_0^1 \Psi_2 v \delta v dx \right]_{y=0}^{y=1} - \frac{1}{Re} \left\{ \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial x} dy \right]_{x=0}^{x=1} - \right. \\
& - \left. \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} (\delta v) dy \right]_{x=0}^{x=1} + \left[\int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial(\delta v)}{\partial y} dx \right]_{y=0}^{y=1} - \left[\int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} (\delta v) dx \right]_{y=0}^{y=1} \right\}
\end{aligned} \tag{6.13}$$

Μηδενίζοντας τους όρους που πολλαπλασιάζονται με το δu και δv , προκύπτουν οι δύο Συζυγείς Πεδιακές Εξισώσεις (F.A.E.) :

$$\Psi_1 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_1 u)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_1 v)}{\partial y} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial y^2} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \Psi_2 \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} u + \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} v + \Psi_1 \frac{\partial v}{\partial y} = \Psi_2 \frac{\partial v}{\partial x}} \tag{F.A.E. 1}$$

$$\Psi_2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial(\Psi_2 u)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi_2 v)}{\partial y} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \Psi_1 \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} u + \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} v + \Psi_2 \frac{\partial u}{\partial x} = \Psi_1 \frac{\partial u}{\partial y}} \tag{F.A.E. 2}$$

6.2 Οριακές Συνθήκες και Παράγωγοι Ευαισθησίας

Από τους εναπομείναντες όρους, δύνανται να υπολογισθούν οι οριακές συνθήκες και οι ζητούμενες παράγωγοι ευαισθησίας. Έτσι, για τους όρους που αντιστοιχούν στο πρώτο συζυγές πεδίο, Ψ_1 , προκύπτει:

- Όριο $x = 0$

$$-\underbrace{\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy}_{S.D.} + \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial \delta u}{\partial x} dy}_{=0} - \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \delta u dy}_{S.D.}$$

Άρα:

$$\boxed{\Psi_1(0, y) = 0} \quad (6.14)$$

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = - \int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy \Big|_{x=0} - \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \delta u dy \Big|_{x=0} \quad (6.15)$$

- Όριο $x = 1$

$$\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy - \frac{1}{Re} \underbrace{\int_0^1 \Psi_1 \delta \frac{\partial u}{\partial x} dy}_{=0, \text{ Neumann at primal}} + \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} \delta u dy + \int_0^1 (u(1, y) - u_{tar}(y)) \delta u dy = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\Psi_1 u + \frac{1}{Re} \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} + u(1, y) - u_{tar}(y) = 0} \quad (6.16)$$

Με την οριακή συνθήκη για $x=1$ να είναι μια διαφορική εξίσωση από μόνη της (μια μη-μηδενική Neumann). Ο τρόπος επιβολής της στο PGD θα αναλυθεί παρακάτω (6.31).

- Όριο $y = 0$

$$-\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy + \frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial \delta u}{\partial y} dy - \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} \delta u dy}_{=0, u=0} \Rightarrow$$

$$\boxed{\Psi_1(x, 0) = 0} \quad (6.17)$$

- Όριο $y = 1$

$$\int_0^1 \Psi_1 u \delta u dy - \frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_1 \frac{\partial \delta u}{\partial y} dy + \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} \delta u dy}_{=0, u=0}$$

$$\boxed{\Psi_1(x, 1) = 0} \quad (6.18)$$

Με αντίστοιχη χρήση των υπολειπόμενων όρων, λαμβάνονται οι παράγωγοι ευαισθησίας, και οι συνοριακές συνθήκες του δεύτερου συζυγούς πεδίου Ψ_2 :

- Όριο $x = 0$

$$-\underbrace{\int_0^1 \Psi_2 u \delta u dy}_{S.D.} + \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial \delta v}{\partial x} dy}_{=0} - \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \delta v dy}_{S.D.}$$

Άρα:

$$\boxed{\Psi_2(0, y) = 0} \quad (6.19)$$

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = - \int_0^1 \Psi_2 u \delta u dy \Big|_{x=0} - \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \delta v dy \Big|_{x=0} \quad (6.20)$$

- Όριο $x = 1$

$$\int_0^1 \Psi_2 u \delta u dy - \frac{1}{Re} \underbrace{\int_0^1 \Psi_2 \delta \frac{\partial u}{\partial x} dy}_{=0, \text{ Neumann at primal}} + \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \delta v dy +$$

$$\int_0^1 (u(1, y) - u_{tar}(y)) \delta u dy = 0 \Rightarrow$$

$$\boxed{\Psi_2 u + \frac{1}{Re} \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} = 0} \quad (6.21)$$

Με την οριακή συνθήκη για $x = 1$ έχει τη μορφή οριακής συνθήκης τύπου Robin. Ο τρόπος επιβολής της στο PGD αναλύεται στην αντίστοιχη Ενότητα (6.35).

- Όριο $y = 0$

$$- \int_0^1 \Psi_2 u \delta u dy + \frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial \delta u}{\partial y} dy - \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \delta u dy}_{=0, u=0} \Rightarrow$$

$$\boxed{\Psi_2(x, 0) = 0} \quad (6.22)$$

- Όριο $y = 1$

$$\int_0^1 \Psi_2 u \delta u dy - \frac{1}{Re} \int_0^1 \Psi_2 \frac{\partial \delta u}{\partial y} dy + \underbrace{\frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} \delta u dy}_{=0, u=0}$$

$$\boxed{\Psi_2(x, 1) = 0} \quad (6.23)$$

Με πλήρως γνωστές τις εξισώσεις και τις συνοριακές συνθήκες που περιγράφουν το συζυγές πρόβλημα, επόμενο στάδιο αποτελεί η επίλυσή του με το PGD .

6.3 Επίλυση Συζυγούς Προβλήματος με PGD

Όπως και στο πρωτεύον πρόβλημα, η λύση αποτελείται από δύο πεδία, τα συζυγή πεδία Ψ_1, Ψ_2 , που περιγράφονται από δύο εξισώσεις (F.A.E. 1) και (F.A.E. 2). Η κατά PGD μορφή των παραπάνω πεδίων, γραμμένων σε n βάσεις, είναι:

$$\Psi_1(x, y) = \sum_{i=1}^n X_{\Psi_1 i}(x) Y_{\Psi_1 i}(y)$$

$$\Psi_2(x, y) = \sum_{i=1}^n X_{\Psi_2 i}(x) Y_{\Psi_2 i}(y)$$

Αντικαθιστώντας τις στις δύο Συζυγείς Πεδιακές Εξισώσεις προκύπτουν οι δύο πεδιακές εξισώσεις σε μορφή PGD . Καθώς στις πεδιακές εξισώσεις περιλαμβάνονται και όροι του πρωτεύοντος προβλήματος (u, v) , θα διατυπωθούν και αυτοί σε διαχωρισμένη μορφή, όπως έχει

αναλυθεί σε προηγούμενα κεφάλαια, ως ένα άθροισμα m βάσεων:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial X_n}{\partial x} Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i}{\partial x} Y_i \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + \left(X_n \frac{\partial Y_n}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} X_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{vi} Y_{vi} \right) + \\ & + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} Y_i \right) + \frac{1}{Re} \left(X_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} + \sum_{i=1}^{n-1} X_i \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} \right) + \\ & + \left(X_n Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{vi} \frac{\partial Y_{vi}}{\partial y} \right) = \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_{\Psi_{2i}} Y_{\Psi_{2i}} \right) \left(\sum_{i=1}^m \frac{\partial X_{vi}}{\partial x} Y_{vi} \right) \end{aligned} \quad (\text{FAE 1, PGD})$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial X_n}{\partial x} Y_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i}{\partial x} Y_i \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + \left(X_n \frac{\partial Y_n}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} X_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{vi} Y_{vi} \right) + \\ & \frac{1}{Re} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} Y_i + \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} Y_n \right) + \frac{1}{Re} \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} + X_n \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} \right) + \\ & \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n Y_n \right) \left(\sum_{i=1}^m \frac{\partial X_{ui}}{\partial x} Y_{ui} \right) = \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_{\Psi_{2,i}} Y_{\Psi_{2,i}} \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} \frac{\partial Y_{ui}}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (\text{FAE 2, PGD})$$

Επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός των συνιστωσών που δομούν το κάθε πεδίο, το οποίο γίνεται με εφαρμογή της προβολής Galerkin. Σε κάθε βήμα οι μεταβλητές που δεν έχουν δείκτη που να ορίζει το πεδίο τους, θα αναφέρονται πάντα στο πεδίο στο οποίο ανήκει η συνιστώσα που υπολογίζεται (Οι όροι των ζητούμενων μεγεθών σε κάθε ΣΔΕ αναγράφονται με έντονα γράμματα για ευκολότερη ανάγνωση).

- **Υπολογισμός του $X_{\Psi_{1n}}$**

Με εφαρμογή της προβολής Galerkin, δηλαδή με πολλαπλασιασμό της εξίσωσης (F.A.E. 1) με τον όρο $Y_{\Psi_{1n}}$ και ολοκλήρωση κατά την y διεύθυνση, λαμβάνεται η προς επίλυση εξίσωση:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} + \frac{1}{Re} \int_y \frac{\partial^2 Y_n}{\partial y^2} Y_n dy X_n + \\ & \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui} \frac{\partial X_n}{\partial x} + \sum_{i=1}^m \int_y \frac{\partial Y_n}{\partial y} Y_{vi} Y_n dy X_{vi} X_n + \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 \frac{\partial Y_{vi}}{\partial y} dy X_{vi} X_n = \\ & - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_i Y_n dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} Y_n dy X_i - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i Y_{uj} Y_n dy \frac{\partial X_i}{\partial x} X_{uj} \\ & - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y \frac{\partial Y_i}{\partial y} Y_{vj} Y_n dy X_{vj} X_i - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i \frac{\partial Y_{vj}}{\partial y} Y_n dy X_i X_{vj} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_{\Psi_{2i}} Y_{vj} Y_n dy X_{\Psi_{2i}} \frac{\partial X_{vj}}{\partial x} \end{aligned} \quad (6.24)$$

- **Υπολογισμός του $Y_{\Psi_{1n}}$**

Ομοίως με πριν, πολλαπλασιάζοντας την (F.A.E. 1) με τον όρο $X_{\Psi_{1n}}$ και ολοκληρώνοντας κατά τη x διεύθυνση, προκύπτει η κατά PGD μορφή της (F.A.E. 1) που υπολογίζει το μέγεθος $Y_{\Psi_{1n}}$:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Re} \int_x \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} X_n dx \mathbf{Y}_n + \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx \frac{\partial^2 \mathbf{Y}_n}{\partial y^2} + \\
& \sum_{i=1}^m \int_x \frac{\partial X_n}{\partial x} X_n X_{ui} dx Y_{ui} \mathbf{Y}_n + \sum_{i=1}^m \int_x X_n^2 X_{vi} dx Y_{vi} \frac{\partial \mathbf{Y}_n}{\partial y} + \sum_{i=1}^m \int_x X_{vi} X_n^2 dx \frac{\partial Y_{vi}}{\partial y} \mathbf{Y}_n = \\
& -\frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} X_n dx Y_i - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_i X_n dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x \frac{\partial X_i}{\partial x} X_{uj} X_n dx Y_{uj} Y_i \\
& - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_i X_{vj} X_n dx \frac{\partial Y_i}{\partial y} Y_{vj} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_i X_{vj} X_n dx Y_i \frac{\partial Y_{vj}}{\partial y} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_{\Psi_{2i}} \frac{\partial X_{vj}}{\partial x} X_n dx Y_{\Psi_{2i}} Y_{vj}
\end{aligned} \tag{6.25}$$

• Υπολογισμός του $X_{\Psi_{2n}}$

Όμοια και συμμετρικά όπως παραπάνω, πολλαπλασιάζοντας την (F.A.E. 1) με τον όρο $Y_{\Psi_{2n}}$ και ολοκληρώνοντας κατά την y διεύθυνση, λαμβάνεται η προς επίλυση εξίσωση:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui} \frac{\partial X_n}{\partial x} + \sum_{i=1}^m \int_y Y_n Y_{vi} \frac{\partial Y_n}{\partial y} dy X_{vi} \mathbf{X}_n + \\
& \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy \frac{\partial X_{ui}}{\partial x} \mathbf{X}_n + \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \frac{\partial^2 \mathbf{X}_n}{\partial x^2} + \frac{1}{Re} \int_y Y_n \frac{\partial Y_n^2}{\partial y^2} \mathbf{X}_n = \\
& - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_n Y_i Y_{uj} dy \frac{\partial X_i}{\partial x} X_{uj} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_n \frac{\partial Y_i}{\partial y} Y_{vj} dy X_i X_{vj} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_n Y_i Y_{ui} dy X_i \frac{\partial X_{ui}}{\partial x} \\
& - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} X_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_{\Psi_{1i}} Y_n \frac{\partial Y_{uj}}{\partial y} dy X_{\Psi_{1i}} X_{uj}
\end{aligned} \tag{6.26}$$

• Υπολογισμός του $Y_{\Psi_{2n}}$

Κατά αντιστοιχία για τον υπολογισμό του όρου $Y_{\Psi_{2n}}$, εφαρμόζοντας την προβολή Galerkin, με πολλαπλασιασμό της εξίσωσης (F.A.E. 1) με τον όρο $X_{\Psi_{1n}}$ και ολοκλήρωση κατά την x διεύθυνση, διαμορφώνεται η προς επίλυση εξίσωση:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^m \int_x X_n X_{ui} \frac{\partial X_n}{\partial x} dx Y_{ui} \mathbf{Y}_n + \sum_{i=1}^m \int_x X_n^2 X_{vi} dx Y_{vi} \frac{\partial \mathbf{Y}_n}{\partial y} + \\
& \sum_{i=1}^m \int_x X_n^2 \frac{\partial X_{ui}}{\partial x} \mathbf{Y}_n + \frac{1}{Re} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_n}{\partial x^2} \mathbf{Y}_n + \frac{1}{Re} \int_x X_n^2 dx \frac{\partial^2 \mathbf{Y}_n}{\partial y^2} = \\
& - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_n \frac{\partial X_i}{\partial x} X_{uj} dx Y_i Y_{uj} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_n X_i X_{vj} dx \frac{\partial Y_i}{\partial y} Y_{vj} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_n X_i \frac{\partial X_{uj}}{\partial x} dx Y_i Y_{uj} \\
& - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n \frac{\partial^2 X_i}{\partial x^2} dx Y_i - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_x X_n X_i dx \frac{\partial^2 Y_i}{\partial y^2} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_x X_n X_{\Psi_{1i}} X_{uj} dx Y_{\Psi_{1i}} \frac{\partial Y_{uj}}{\partial y}
\end{aligned} \tag{6.27}$$

Οι τέσσερις αυτές εξισώσεις αποτελούν τις τέσσερις ΣΔΕ που θα επιλυθούν για να υπολογισθούν τα δύο συζυγή πεδία Ψ_1 και Ψ_2 . Όπως και στην επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος, έτσι και εδώ, η επίλυση γίνεται σε κύκλους, όπου σε κάθε κύκλο προστίθεται μια ομάδα βάσεων, προσεγγίζοντας το τελικό πεδίο όλο και περισσότερο. Σε κάθε τέτοιο κύκλο, απαιτείται να

υπολογισθούν τέσσερις συναρτήσεις βάσεις, δύο για κάθε πεδίο. Δεδομένου του ότι -όπως και στο πρωτεύον πρόβλημα- τα δύο πεδία έχουν απειμπλεχθεί ανά κύκλο, ο υπολογισμός τους γίνεται ξεχωριστά. Έτσι, υπολογίζονται οι δύο συναρτήσεις $X_{\Psi_{1n}}$ και $Y_{\Psi_{1n}}$ με χρήση των εξισώσεων (6.24) και (6.25) που είναι πεπλεγμένες, επαναληπτικά, και αφού συγκλίνουν μεταξύ τους, υπολογίζονται και οι $X_{\Psi_{2n}}$, $Y_{\Psi_{2n}}$ μέσω των εξισώσεων (6.26) και (6.27) με τον ίδιο τρόπο. Όπως και στο πρωτεύον πρόβλημα, παρατηρείται πως οι εξισώσεις ανά δύο είναι συμμετρικές, δηλαδή οι εξισώσεις (6.24) και (6.27), που υπολογίζουν τα μεγέθη $X_{\Psi_{1n}}$ και $Y_{\Psi_{2n}}$, και οι εξισώσεις (6.25) και (6.26) των μεγεθών $Y_{\Psi_{1n}}$ και $X_{\Psi_{2n}}$, που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των και $X_{\Psi_{2n}}$ είναι συμμετρικές, δηλαδή σε προγραμματιστικό επίπεδο μπορεί να χρησιμοποιηθεί το ίδιο τμήμα κώδικα (ίδια ρουτίνα) με αντίστροφα ορίσματα εισόδου.

6.3.1 Οριακές Συνθήκες στο PGD

Προκειμένου να επιλυθούν οι παραπάνω εξισώσεις, απαιτείται να εφαρμοστούν στην κατάλληλη για το PGD μορφή οι οριακές συνθήκες που υπολογίστηκαν σε παραπάνω στάδιο.

Πεδίο Ψ_1

- $\Psi_1(x, 0)$

$$\Psi_1(x, 0) \Rightarrow Y_i(0) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_1(x, 1)$

$$\Psi_1(x, 1) \Rightarrow Y_i(1) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_1(0, y)$

$$\Psi_1(0, y) = 0 \Rightarrow X_i(0) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_1(1, y)$

$$\Psi_1 u + \frac{1}{Re} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} + u(1, y) - u_{tar}(y) = 0 \quad (6.28)$$

Ή σε μορφή κατά PGD:

$$\left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + Y_n X_n \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + \frac{1}{Re} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i}{\partial x} Y_i + \frac{\partial X_n}{\partial x} Y_n \right) + \left(\sum_{i=1}^m Y_{ui} X_{ui} \right) - u_{tar} \right\} \Big|_{x=1} = 0$$

$$\left\{ \left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + Y_n X_n \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i}{\partial x} Y_i + \frac{1}{Re} \frac{\partial X_n}{\partial x} Y_n + \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) - u_{tar} \right\} \Big|_{x=1} = 0 \quad (6.29)$$

Στο στάδιο αυτό πρέπει να υπολογιστεί η σχέση που θα συνδέει τα μεγέθη της διαχωρισμένης πλέον συνάρτησης X_n έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι συνθήκες που επιβάλλονται στην πραγματική συνάρτηση Ψ_1 . Κάτι τέτοιο επιτυγχάνεται με τη χρήση της προβολής Galerkin, δηλαδή αναζητούνται οι τιμές $X_n(1)$, $X_n(1 - \Delta x)$ (στη συγκεκριμένη περίπτωση μια σχέση που

να τις συνδέει), η οποία να ελαχιστοποιεί το σφάλμα της συνάρτησης της οριακής συνθήκης. Έτσι, κατά τη γνωστή πλέον διαδικασία, πολλαπλασιάζοντας με τη γνωστή συνάρτηση Y_n και ολοκληρώνοντας κατά το y , προκύπτει η ακόλουθη σχέση (όλες οι συναρτήσεις βάσεις χωρίς δείκτη αναφέρονται στο πεδίο Ψ_1):

$$\begin{aligned} X_n(1) \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui}(1) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i Y_n Y_{uj} dy X_{uj}(1) X_j(1) + \\ + \frac{1}{Re} \frac{\partial X_n(1)}{\partial x} \int_y Y_n^2 dy + \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} + \\ + \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_{ui} Y_n dy X_{ui}(1) - \int_y u_{tar} Y_n dy = 0 \end{aligned} \quad (6.30)$$

Θέτοντας ως:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui}(1) \\ B &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \frac{1}{Re} \\ C &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i Y_n Y_{uj} dy X_{uj}(1) X_j(1) - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} - \\ &\quad - \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_{ui} Y_n dy X_{ui}(1) + \int_y u_{tar} Y_n dy \end{aligned}$$

λαμβάνεται η τελική μορφή της εξίσωσης:

$$AX_n(1) + B \frac{\partial X_n}{\partial x} \Big|_{x=1} = C \Rightarrow$$

η οποία πλέον διακριτοποιημένη, είναι:

$$X_n(1 - \Delta x) \left[-\frac{B}{\Delta x} \right] + X_n(1) \left[A + \frac{B}{\Delta x} \right] = C \quad (6.31)$$

Πεδίο Ψ_2

- $\Psi_2(x, 0)$

$$\Psi_2(x, 0) \Rightarrow Y_i(0) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_2(x, 1)$

$$\Psi_2(x, 1) \Rightarrow Y_i(1) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_2(0, y)$

$$\Psi_2(0, y) = 0 \Rightarrow X_i(0) = 0, \quad i = 1, n$$

- $\Psi_2(1, y)$

$$\Psi_2(1, y)u + \frac{1}{Re} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} = 0 \quad (6.32)$$

Ή σε μορφή κατά PGD:

$$\left(\sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + Y_n X_n \right) \left(\sum_{i=1}^m X_{ui} Y_{ui} \right) + \frac{1}{Re} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial X_i}{\partial x} Y_i + \frac{\partial X_n}{\partial x} Y_n \right) \Big|_{x=1} = 0 \quad (6.33)$$

Ομοίως με πριν, γίνεται χρήση της προβολής Galerkin για να υπολογιστεί η κατάλληλη τιμή της οριακής συνθήκης που θα ικανοποιεί την οριακή συνθήκη τύπου Robin (όλες οι συναρτήσεις βάσεις χωρίς δείκτη αναφέρονται στο πεδίο Ψ_2).

$$\begin{aligned} & X_n(1) \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui}(1) + \frac{1}{Re} \frac{\partial X_n(1)}{\partial x} \int_y Y_n^2 dy = \\ & - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i Y_n Y_{uj} dy X_{uj}(1) X_j(1) - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} \end{aligned} \quad (6.34)$$

Θέτοντας τα παρακάτω μεγέθη ως:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i=1}^m \int_y Y_n^2 Y_{ui} dy X_{ui}(1) \\ B &= \frac{1}{Re} \int_y Y_n^2 dy \\ C &= - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^m \int_y Y_i Y_n Y_{uj} dy X_{uj}(1) X_j(1) - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^{n-1} \int_y Y_n Y_i dy \frac{\partial X_i(1)}{\partial x} \end{aligned}$$

Και η τελική, διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης θα είναι:

$$\begin{aligned} & AX_n(1) + B \frac{\partial X_n}{\partial x} \Big|_{x=1} = C \Rightarrow \\ & X_n(1 - \Delta x) \left[-\frac{B}{\Delta x} \right] + X_n(1) \left[A + \frac{B}{\Delta x} \right] = C \end{aligned} \quad (6.35)$$

Με πλέον πλήρως γνωστά τα πεδία Ψ_1 και Ψ_2 απομένει ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας όπως έχουν προκύψει από την παραπάνω ανάλυση. Αυτές υπολογίζονται από τη σχέση (6.20):

Καθώς συμβολίστηκαν:

$$\begin{aligned}\delta F_{aug} &\equiv \frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} \\ \delta u &\equiv \frac{\delta u}{\delta b_n}\end{aligned}\quad (6.36)$$

έτσι:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = - \int_0^1 \Psi_1 u \frac{\delta u}{\delta b_n} dy \Big|_{x=0} - \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \frac{\delta u}{\delta b_n} dy \Big|_{x=0} \quad (6.37)$$

η οποία, με αντικατάσταση του μεγέθους δu , όπως ορίζεται με παραγωγή της (6.6), λαμβάνει τη μορφή:

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} = - \int_0^1 \Psi_1 u (f_n - f_1) dy \Big|_{x=0} - \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} (f_n - f_1) dy \Big|_{x=0} \quad (6.38)$$

ή σε μορφή κατά PGD :

$$\begin{aligned}\frac{\delta F_{aug}}{\delta b_n} &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \int_y Y_{\Psi_1,i} Y_{u,j} (f_n - f_1) dy X_{\Psi_1,i} X_{u,j} \Big|_{x=0} - \\ &\quad - \frac{1}{Re} \sum_{i=1}^n \int_y Y_{\Psi_1,i} (f_n - f_1) dy \frac{\partial X_{\Psi_1,i}}{\partial x} \Big|_{x=0}\end{aligned}\quad (6.39)$$

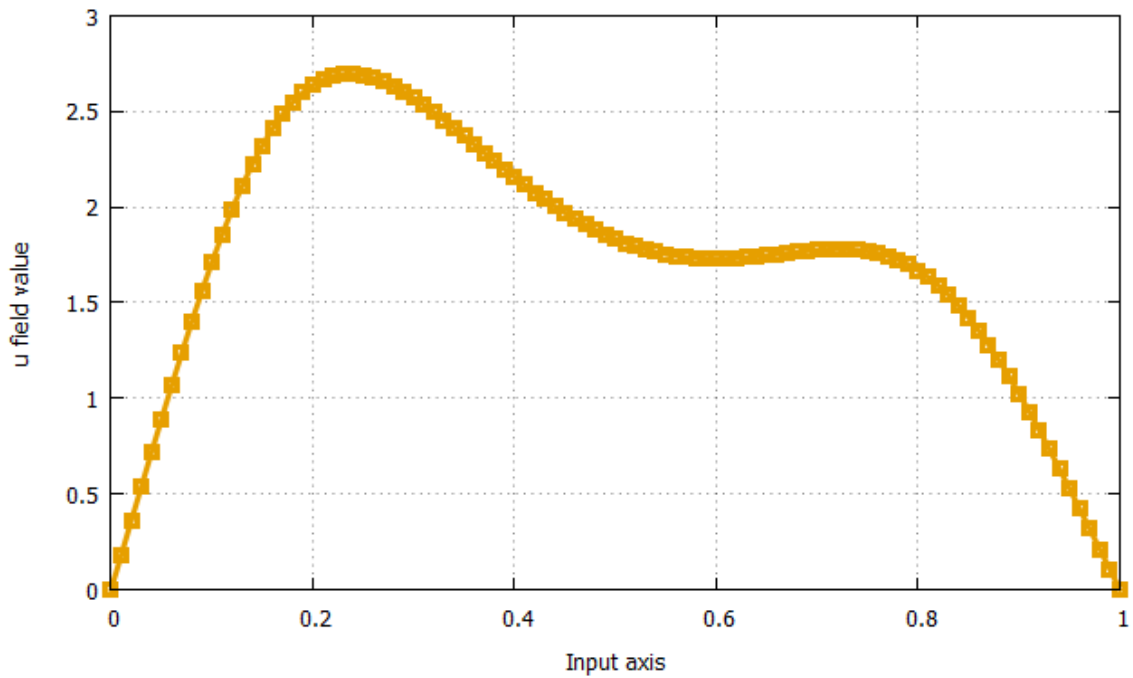
με $n = 3, 4, 5$. Με γνωστές πλέον τις παραγώγους ευαισθησίας, δύναται να υπολογισθούν οι νέες τιμές των παραμέτρων σχεδιασμού μέσω της μεθόδου της απότομης καθόδου, δηλαδή:

$$b_i^{new} = b_i^{old} - n \frac{\delta F_{aug}}{\delta b_i} \quad (6.40)$$

όπου n είναι το βήμα της καθόδου.

6.4 Εφαρμογή-Αποτελέσματα

Ο έλεγχος λειτουργίας της μεθόδου θα πραγματοποιηθεί σε ορθοκανονικό πλέγμα, ίδιο με αυτό στο οποίο γίνεται επίλυση στο Κεφάλαιο 3. Δεδομένου ότι οι κατανομές εισόδου έχουν μηδενική τιμή στα άκρα, θα επιβληθούν μηδενικής συνθήκης Dirichlet στα πλάγια του πεδίου (επάνω και κάτω πλευρά), μηδενική Neumann στην έξοδο (δεξιά πλευρά), και στην είσοδο θα καθορίζεται η κατανομή του πεδίου u από την εξίσωση (6.6), ενώ η κατανομή-στόχος στην έξοδο του πεδίου έχει την εξής μορφή:



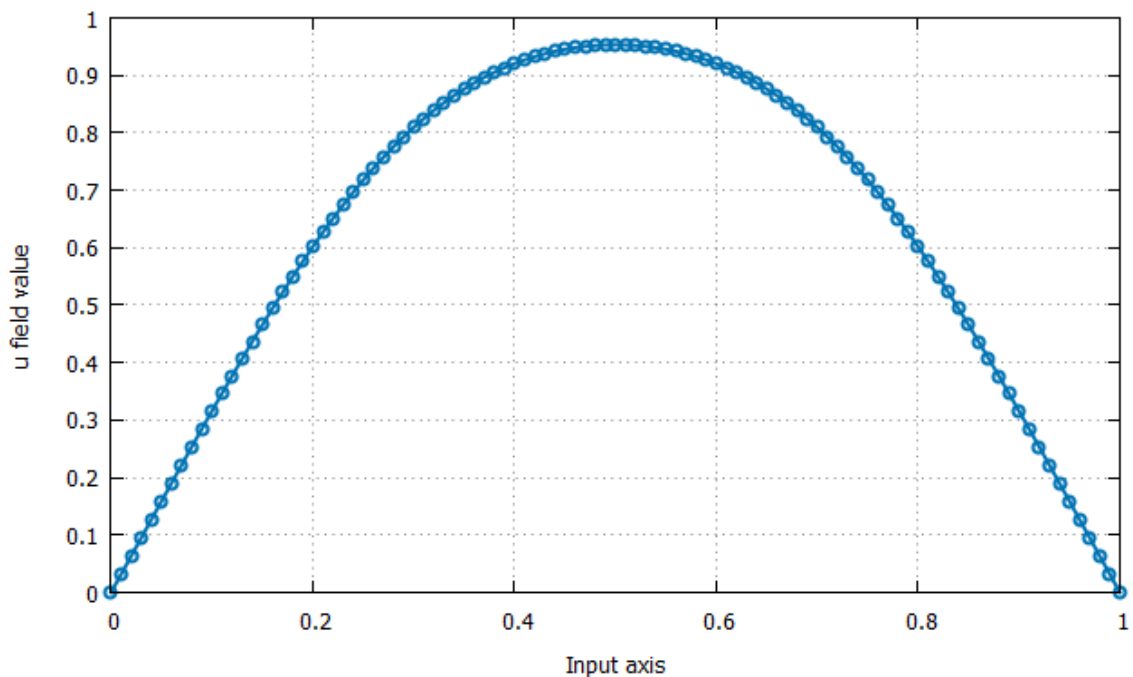
Σχήμα 6.2: Εφαρμογή: Στόχος της κατανομής του πεδίου u στην «έξοδο» ($x = 1$) του χωρίου.

η οποία έχει προκύψει με είσοδο το πολυώνυμο με συντελεστές τα μεγέθη:

$$b_5 = -8.5, \quad b_4 = 20, \quad b_3 = -16$$

Με τους υπόλοιπους συντελεστές των όρων του πολυωνύμου να προκύπτουν από τις μηδενικές οριακές συνθήκες στην είσοδο.

Ως αρχικό πεδίο που θα βελτιστοποιηθεί, δηλαδή που θα ζητηθεί να προσεγγίσει την παραπάνω κατανομή, θα είναι αυτό που προκύπτει με την ακόλουθη κατανομή στην έξοδο:



Σχήμα 6.3: Εφαρμογή: Αρχική κατανομή του πεδίου u στην «έξοδο» ($x = 1$) του χωρίου.

η οποία έχει προκύψει και αυτή με πολυωνυμική κατανομή του πεδίου u στην είσοδο, με συντελεστές τους:

$$b_5 = -7, b_4 = 14, b_3 = -16.75$$

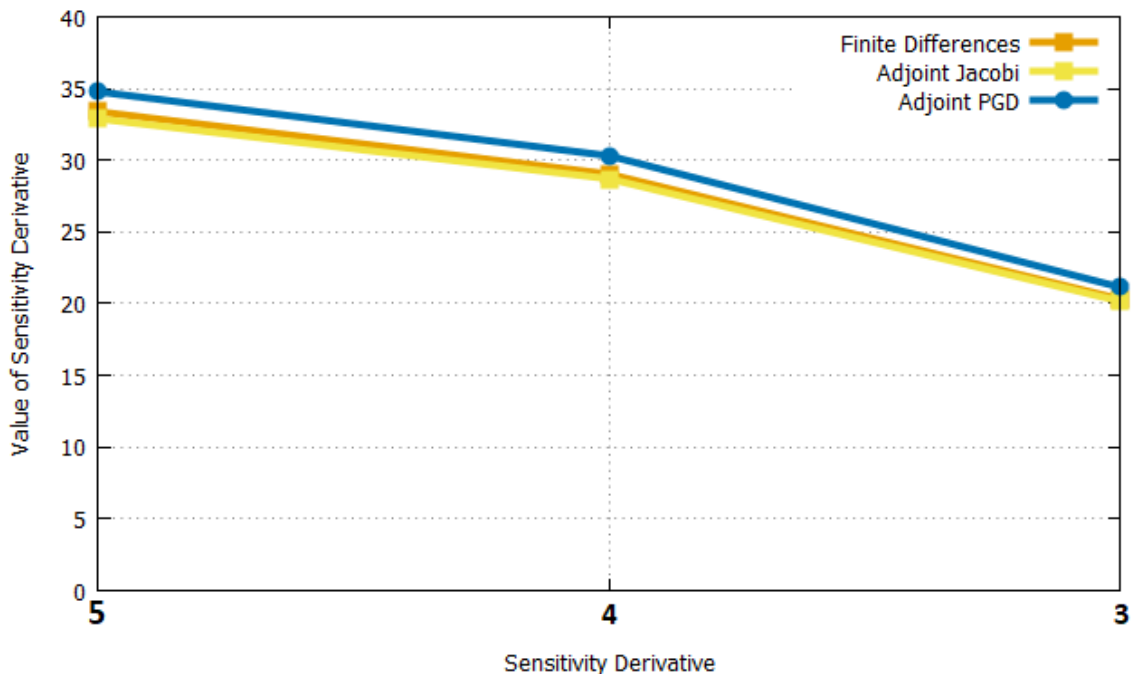
Οι παράγωγοι ευαισθησίας που έχουν υπολογισθεί μέσω της συζυγούς μεθόδου που έχει επιλυθεί με PGD, επαληθεύονται με δύο άλλες μεθόδους:

- Εύρεση Παραγώγου Ευαισθησίας με Πεπερασμένες Διαφορές

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_i = x_0 + \epsilon) - F(b_i = x_0 - \epsilon)}{2\epsilon} \quad (6.41)$$

- Επίλυση των συζυγών πεδίων μέσω συμβατικής μεθόδου (όχι PGD, λ.χ. Jacobi)

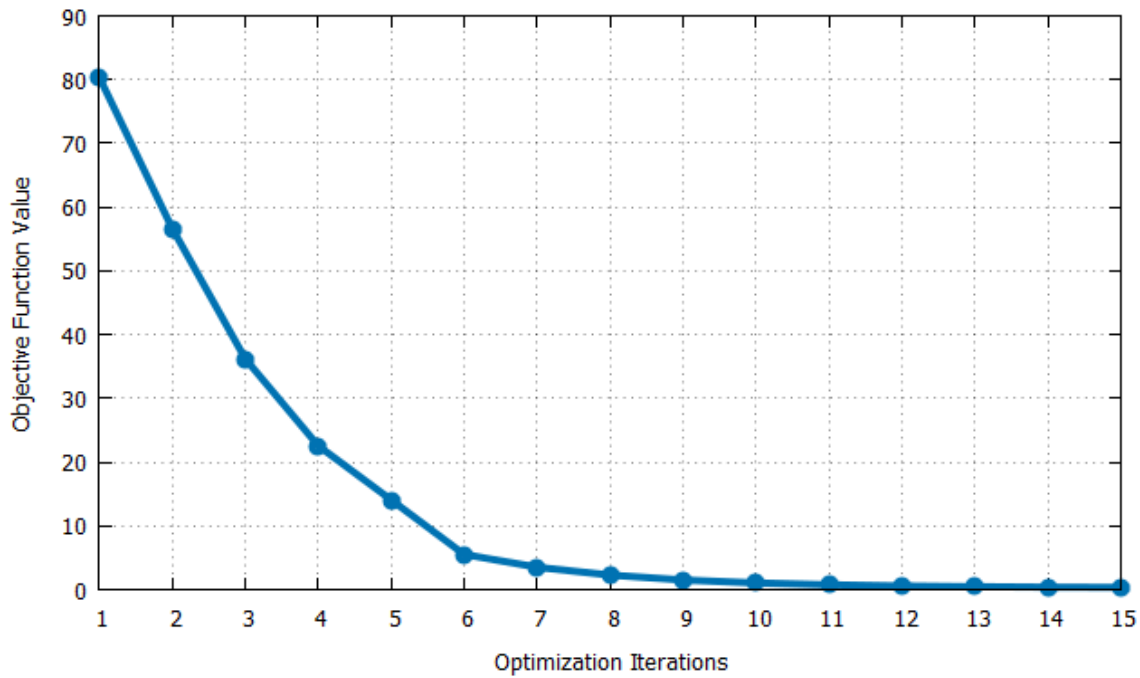
Έτσι, στον πρώτο κύκλο βελτιστοποίησης, οι παράγωγοι ευαισθησίας που προκύπτουν από τις τρεις αυτές μεθόδους είναι:



Σχήμα 6.4: Εφαρμογή: Παράγωγοι ευαισθησίας του συζυγούς πεδίου με επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος και του συζυγούς με PGD (Adjoint PGD), σε σύγκριση με τις παραγώγους με την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος με PGD και του συζυγούς με Jacobi (Adjoint Jacobi), και με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (Finite Differences).

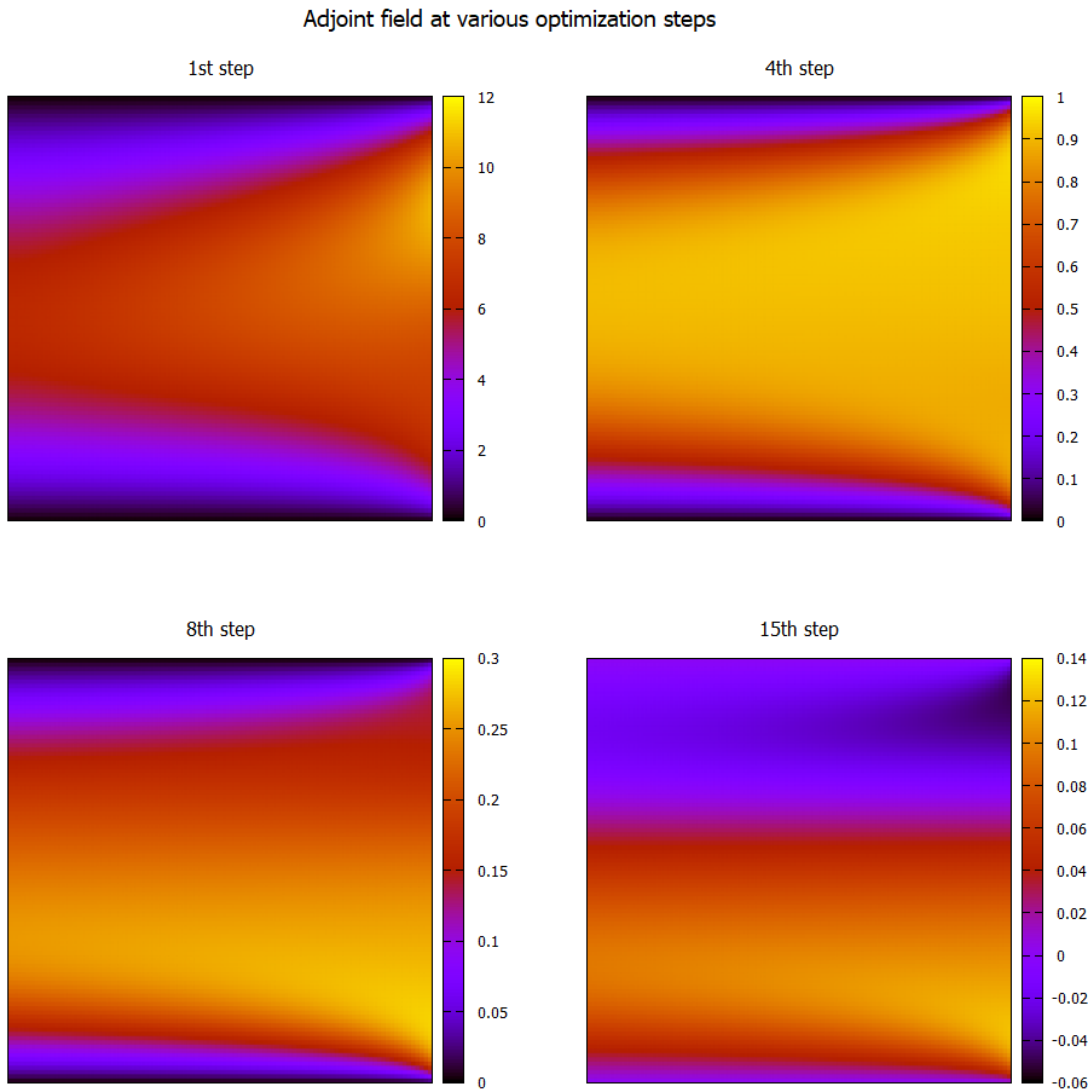
Είναι εμφανές πως οι τιμές είναι πολύ κοντά, γεγονός που επαληθεύει τη λειτουργία του PGD όχι μόνο ως επιτυχή επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος, αλλά και του συζυγούς του.

Μια βελτιστοποίηση έχει ως σκοπό την ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης, η μεταβολή της οποίας εξαρτάται από τις παραγώγους ευαισθησίας που υπολογίζονται και το βήμα της καθόδου. Έτσι, στην εφαρμογή αυτή, με βήμα $n = 0.01$, η αντικειμενική συνάρτηση στα πρώτα δεκαπέντε (15) βήματα της βελτιστοποίησης, με χρήση του PGD για την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος και του συζυγούς πεδίου, είναι η εξής:



Σχήμα 6.5: Εφαρμογή: Τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης (6.3) στα πρώτα 15 βήματα της διαδικασίας βελτιστοποίησης-αντιστρόφου σχεδιασμού

Με την ελάττωση της αντικειμενικής συνάρτησης, ελαττώνεται και το συζυγές πεδίο, καθώς, όπως φαίνεται από τις εξισώσεις (F.A.E. 1), (F.A.E. 2), (6.16), (6.21), η μόνη διέγερση των συζυγών πεδίων είναι η διαφορά της συνάρτησης στόχου και της τρέχουσας ταχύτητας στην έξοδο, που εισάγεται μέσω των οριακών συνθηκών. Κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται και από τη μορφή του ίδιου του συζυγούς πεδίου σε διάφορα βήματα της βελτιστοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα 6.6.



Σχήμα 6.6: Εφαρμογή: Συζυγές Πεδίο σε ορισμένα βήματα κατά τα 15 πρώτα βήματα της βελτιστοποίησης. Προσοχή στην ελάττωση της τάξης μεγέθους του πεδίου όσο η αντικειμενική συνάρτηση ελαττώνεται, δηλαδή όσο η τρέχουσα κατανομή της ταχύτητας προσεγγίζει την κατανομή του στόχου.

Είναι εμφανής η ορθή λειτουργία της μεθόδου στην εύρεση των παραγώγων ευαισθησίας, δεδομένου ότι είναι πρακτικά ίδιες με αυτές των άλλων μεθόδων, και οδηγούν σε επιτυχή ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης. Επίσης, ανάλογα τη μορφή του προβλήματος και την διαθέσιμη υπολογιστική ισχύ, δύναται ο υπολογισμός του συζυγούς πεδίου, άρα και των παραγώγων ευαισθησίας, να γίνει με λιγότερες βάσεις, θυσιάζοντας κάποιο ποσοστό ακρίβειας, αλλά ταυτόχρονα κερδίζοντας σημαντικό χρόνο εκτέλεσης και χώρο αποθήκευσης.

Είναι εμφανές πως μετά από ένα σημείο οι βάσεις, σε αντιστοιχία με το πρωτεύον πρόβλημα, παίζουν όλο και μικρότερο ρόλο στην τελική λύση. Κάτι τέτοιο μπορεί να αξιοποιηθεί προς όφελος του κόστους εκτέλεσης, και της υπολογιστικής μνήμης. Δεδομένου ότι το συζυγές πρόβλημα απαιτεί ένα πεδίο ίδιας διάστασης με το πρωτεύον για να επιλυθεί, η προσέγγιση των παραγώγων ευαισθησίας με χρήση λιγότερων όρων στο PGD μπορεί να φανεί ιδιαίτερα χρήσιμη.

Το συζυγές πεδίο έχει μοναδικό νόημα την εύρεση των παραγώγων ευαισθησίας του προβλήματος βελτιστοποίησης. Σε αντίθεση με το πρωτεύον πρόβλημα, η ανεκτικότητα σε σφάλμα των παραγώγων ευαισθησίας είναι μεγαλύτερη (Προσοχή!: Να μην συγχέεται με την ιδιαίτερα μεγάλη

ακρίβεια της λύσης του πρωτεύοντος προβλήματος που απαιτείται για να δομηθεί εξ αρχής το συζυγές πεδίο), καθώς είτε «απορροφάται» από την ούτως ή άλλως ημι-αυθαίρετη τιμή του βήματος της απότομης καθόδου, είτε από την ύπαρξη ενός αριθμού επαναλήψεων, οι οποίες θα διορθώσουν το ενδεχόμενο σφάλμα που θα εισαγάγει ο φτηνός, με λίγες βάσεις, υπολογισμός του συζυγούς πεδίου, άρα και των παραγώγων ευαισθησίας.

Κεφάλαιο 7

Σύνοψη-Συμπεράσματα-Προτάσεις για Περαιτέρω Μελέτη

Συνοψίζοντας, στην εργασία αυτή παρουσιάστηκε η μέθοδος του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού (PGD) ως επιλύτης ΜΔΕ και, συγκεκριμένα, του 2Δ συστήματος εξισώσεων Burgers. Συγκεκριμένα:

- Προγραμματίστηκε σε γλώσσα *Fortran 77* το PGD ως επιλύτης του 2Δ συστήματος Burgers, για καρτεσιανά πλέγματα, αλλά και για δομημένα πλέγματα σε τυχαίας μορφής χωρία. Η μελέτη επικεντρώθηκε στη μοντελοποίηση των όρων μεταφοράς και διάχυσης αλλά και στο σχήμα διακριτοποίησης για την κατεύθυνση της πληροφορίας της «ροής» των πεδίων (αν τα πεδία u και v θεωρηθούν πεδία ροής) κατά τη σταδιακή δόμηση-επίλυσή τους.
- Διατυπώθηκαν και αναπτύχθηκαν μέθοδοι επιβολής των οριακών συνθηκών σε ένα πρόβλημα το οποίο περιγράφεται από εξισώσεις σε μορφή PGD. Επίσης, αναπτύχθηκαν τρόποι αύξησης της ευστάθειας του επιλύτη.
- Εφαρμόστηκαν οι παραπάνω κώδικες στην πράξη, σε μελέτη πεπλεγμένων πεδίων που περιγράφονται από το 2Δ σύστημα Burgers, σε διαφορετικά πεδία (τροποποίηση των εξισώσεων με χρήση άλλου αριθμού Reynolds) και πλέγματα (101 ως 201 κόμβοι ανά πλευρά) και ελέγχθηκε η αποδοτικότητα του κώδικα όσον αφορά τη σύγκλιση, την απαιτούμενη μνήμη, και τις συνθήκες υπό τις οποίες συμφέρει η χρήση του PGD έναντι ενός συμβατικού επιλύτη.
- Προγραμματίστηκε η συνεχής συζυγής μέθοδος με σκοπό τη χρήση της στη βελτιστοποίηση, του 2Δ συστήματος Burgers σε καρτεσιανό πλέγμα, διατηρώντας καθόλη τη διάρκεια του κύκλου βελτιστοποίησης (επίλυση πρωτεύοντος προβλήματος, επίλυση συζυγούς, βελτιστοποίηση) όλα τα πεδία σε διαχωρισμένη μορφή. Συγκρίθηκαν οι παράγωγοι ευαισθησίας που προέκυψαν με άλλες συμβατικές μεθόδους, όπως η μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών (Finite Differences) και η επίλυση του συζυγούς πεδίου με κάποια συμβατική μέθοδο.

Τα κύρια συμπεράσματα που μπορούν να εξαχθούν από τη μελέτη είναι τα ακόλουθα:

- Η μέθοδος του (PGD) μπορεί με επιτυχία να επιλύσει πεδία που περιγράφονται από το σύστημα των 2Δ εξισώσεων Burgers με μεγάλη ακρίβεια, ελαττώνοντας σημαντικά την απαιτούμενη ποσότητα μνήμης. Μεγάλη σημασία στην απαιτούμενη μνήμη παίζει η μορφή του πεδίου (κατά πόσο από τη φύση του είναι εύκολα ή όχι διαχωρίσιμο), το σφάλμα σύγκλισης που απαιτεί ο χρήστης, αλλά και ο διαθέσιμος/μέγιστος αριθμός βάσεων για την προσέγγιση του πεδίου. Στα παραδείγματα που παρουσιάστηκαν, έγινε εμφανές πως ο αριθμός Reynolds όσο αυξάνει, κάνει το πεδίο λιγότερο διαχωρίσιμο, άρα απαιτείται μεγαλύτερος αριθμός βάσεων στο PGD για να επιτευχθεί η προσέγγιση.
- Σχεδόν σε κάθε περίπτωση εφαρμογής της μεθόδου, τα κέρδη σε μνήμη ήσαν πολύ ενθαρρυντικά. Σε μερικές περιπτώσεις μάλιστα, η χρησιμοποιούμενη από το PGD μνήμη, έφτασε σχεδόν το

1/10 της μνήμης που θα απαιτούνταν από έναν συμβατικό επιλύτη. Έγινε εμφανές πως η μέθοδος PGD έχει πολύ μεγαλύτερα κέρδη σε μνήμη όσο πιο μεγάλο (με περισσότερους κόμβους ανά κατεύθυνση) είναι το πλέγμα στο οποίο είναι διακριτοποιημένο το πεδίο επίλυσης, καθώς -όπως δείχθηκε- ο απαιτούμενος αριθμός βάσεων είναι ανεξάρτητος από το μέγεθος του πλέγματος στο οποίο πραγματοποιείται η επίλυση, και είναι συνάρτηση μόνο της πολυπλοκότητας (μη-διαχωρισιμότητας) του πεδίου. Δείχθηκε επίσης, πως τα κέρδη σε μνήμη αυξάνονται με το πλήθος των διαστάσεων του προς επίλυση προβλήματος.

- Η μέθοδος μπορεί να επιλύσει πεδία που περιέχουν όρους διάχυσης και μεταφοράς με επιτυχία, ανοίγοντας τον δρόμο για την ανάπτυξη αλγορίθμων επίλυσης προβλημάτων ΥΡΔ με τη χρήση του PGD. Επιπλέον, αναπτύχθηκαν και διατυπώθηκαν οι μέθοδοι για την επιβολή διαφόρων ειδών οριακών συνθηκών της ΥΡΔ σε έναν επιλύτη PGD, διευκολύνοντας μελλοντικές μελέτες.
- Αναδείχθηκε το PGD ως μέθοδος ικανή για την παραγωγή ενός πεδίου ικανοποιητικά ακριβούς ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια διαδικασία βελτιστοποίησης μέσω της συζυγούς μεθόδου (ιδιαίτερα ευαίσθητη σε μικρές αλλαγές του πεδίου). Επιπλέον, αναδείχθηκε ως ικανή μέθοδος να επιλύσει και το συζυγές πεδίο του προβλήματος και να υπολογίσει με ικανοποιητική ακρίβεια τις παραγώγους ευαισθησίας με σκοπό την χρήση τους σε μια διαδικασία βελτιστοποίησης. Στο παράδειγμα που παρουσιάστηκε διατηρήθηκαν όλοι οι όροι σε όλους τους κύκλους της διαδικασίας (επίλυση πρωτεύοντος-επίλυση συζυγούς-βελτιστοποίηση-επίλυση πρωτεύοντος κλπ) σε πλήρως διαχωρισμένη μορφή (χωρίς δηλαδή να γίνεται πουθενά αναδόμηση), ελαχιστοποιώντας την απαιτούμενη μνήμη.

Με βάση τα παραπάνω συμπεράσματα, τίθενται θέματα τα οποία προτείνονται για ενδεχόμενη μελλοντική μελέτη και ανάπτυξη. Κάποια από αυτά παρουσιάζονται παρακάτω:

- Η εργασία αυτή εστίασε στην 2Δ εξίσωση Burgers, με κύριο σκοπό την ορθή μοντελοποίηση των όρων συναγωγής και διάχυσης, οι οποίοι είναι κύριας σημασίας σε ένα πρόβλημα ρευστομηχανικής. Τα προβλήματα που διατυπώθηκαν περιγράφονται από δύο εξισώσεις, πεπλεγμένες. Μεγάλο ενδιαφέρον έχει η ανάπτυξη μεθόδου με τη χρήση του PGD για την επίλυση ΜΔΕ της ΥΡΔ με περισσότερες εξισώσεις (λ.χ. Euler, Navier-Stokes), μιας και η κύριος σκοπός της εργασίας αυτής είναι η τοποθέτηση των σωστών βάσεων, τεχνικών και θεωρητικών για την επιτυχή λειτουργία του PGD στα προβλήματα αυτά.
- Δεδομένου ότι το PGD ανά κύκλο προσθήκης ομάδας βάσεων προσθέτει ένα πεδίο στο ήδη υπάρχον, χάνεται κατά την επίλυση του πεδίου αυτού η φυσική έννοια της ροής που θα υπήρχε σε έναν συμβατικό επιλύτη. Στην παρούσα εργασία έγιναν βήματα για την ανάπτυξη ενός σωστού σχήματος διακριτοποίησης. Αυτό δίνει τις βάσεις για την χρήση των μεθόδων στις εξισώσεις Euler και Navier-Stokes, οι οποίες όντας βέβαια πιο πολύπλοκες, ενδέχεται να απαιτούν περαιτέρω ανάπτυξη. Η επιπλέον ανάπτυξη θα μπορούσε να εστιάσει στα ανάντι σχήματα διακριτοποίησης και στην περαιτέρω μελέτη του τρόπου επιβολής της ορθής μεταφοράς της πληροφορίας της ροής. Κάτι τέτοιο βέβαια στην εφαρμογή του PGD διαφοροποιείται σημαντικά. Λ.χ. σε ένα πλέγμα τύπου C όπου το πρόσημο της ροής αλλάζει κατά το μήκος του πεδίου, η χρήση ενός ανάντι σχήματος θα ήταν λανθασμένη, και θα απαιτείτο κάποια μέθοδος η οποία θα μπορεί να αντιληφθεί τη διεύθυνση της ροής από μεγέθη του διαχωρισμένου πεδίου, με τον ίδιο τρόπο όπως θα γινόταν σε έναν συμβατικό επιλύτη.
- Τέλος, μεγάλο ενδιαφέρον θα παρουσιάσει ο προγραμματισμός της συζυγούς μεθόδου για ένα μη-μόνιμο πρόβλημα ρευστομηχανικής, αξιοποιώντας έτσι στο μέγιστο βαθμό τη διαχωρισιμότητα του πεδίου για την ελάττωση της απαιτούμενης μνήμης (κυρίως στο πεδίο του χρόνου), ελαττώνοντας με αυτόν τον τρόπο τη μνήμη που απαιτείται για όλη τη διαδικασία βελτιστοποίησης ενός μη-μόνιμου προβλήματος υπολογιστικής ρευστοδυναμικής.

Παραρτήματα

Α' Παράρτημα: Προβολή Galerkin

Η προβολή Galerkin (Galerkin Projection) είναι η διαδικασία που χρησιμοποιείται κατά κόρον στη διατύπωση του PGD, είτε κατά τη συμπίεση ενός διαθέσιμου πεδίου, είτε κατά την επίλυση του. Σε αυτό το σημείο, θα παρουσιαστεί με έναν απλό, πρακτικό τρόπο, έτσι ώστε να γίνει κατανοητή η εκτενής εφαρμογή της στη διπλωματική εργασία. Για την επεξήγηση της ιδέας, ας θεωρηθεί μια εξίσωση, η $R(u) = 0$, $u = u(x, y)$, το πεδίο u της οποίας αποτελεί λύση της, ζητείται να προσεγγισθεί σε μορφή κατά PGD με ένα ζεύγος βάσεων, δηλαδή:

$$u(x, y) = X(x)Y(y)$$

Δηλαδή μπορεί πλέον να γραφεί $R = R(u) = R(X, Y)$. Για να βρεθεί το πεδίο u που θα προσεγγίζει βέλτιστα τη λύση της εξίσωσης, απαιτείται να ελαχιστοποιηθεί το σφάλμα:

$$E = \frac{1}{2} \int_x \int_y R^2 dy dx$$

ως προς και τις δύο συναρτήσεις-βάσεις του PGD .

Όταν απαιτηθεί η ελαχιστοποίηση ως προς τη συνάρτηση $X(x)$, αυτή θα ικανοποιηθεί από μια εξίσωση της μορφής:

$$\int_y Y R(X, Y) dy = 0$$

με τη συνάρτηση Y στην παραπάνω εξίσωση να καλείται συνάρτηση βάσης, και να συμβολίζεται ως $u^* = Y$. Στην παραπάνω εξίσωση, δεδομένου ότι όλα τα μεγέθη βρίσκονται σε διαχωρισμένη μορφή, είναι συνάρτηση (μια ΣΔΕ) της συνάρτησης $X(x)$.

Συμμετρικά, όταν απαιτηθεί ελαχιστοποίηση ως προς τη $Y(y)$, θα προκύψει η εξίσωση:

$$\int_x X R(X, Y) dx = 0$$

δηλαδή με συνάρτηση βάσης τη $u^* = X$. Λόγω της διαχωρισμένης μορφής όλων των μεγεθών, είναι μια ΣΔΕ της $Y(y)$.

Με αυτόν τον τρόπο λειτουργεί η προβολή Galerkin, όταν ζητείται να βρεθεί το «βέλτιστο» πεδίο που θα δομείται από τις δύο βάσεις X, Y (στην εργασία συμβολίζονται ως $X_n(x)$ και $Y_n(y)$). Καθώς οι δύο παραπάνω εξισώσεις υπολογίζουν τη μια συνάρτηση συναρτήσει της άλλης, είναι πεπλεγμένες, οπότε απαιτείται η χρήση επαναληπτικής διαδικασίας για την επίτευξη σύγκλισης.

B' Παράρτημα: Εκ των Υστέρων Συμπύεση Πεδίων με PGD

Η μέθοδος PGD δύναται να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή μιας προσεγγιστικής λύσης ενός ήδη γνωστού πεδίου, που έχει προκύψει από τη λύση μιας ΜΔΕ σε ένα (έστω 2Δ) δομημένο πλέγμα. Αναφέρεται ως διαχωρισμός πεδίου, καθώς το πεδίο αναδομείται ή διαχωρίζεται σε πολλές 1Δ συναρτήσεις, καθεμία από τις οποίες είναι συνάρτηση μιας και μόνο διάστασης.

Καθώς έχει προαναφερθεί εκτενώς η παραπάνω διαδικασία στη διπλωματική εργασία [5], θα γίνει εδώ μια σύντομη αναφορά στη μέθοδο.

Έστω ένα πεδίο u το οποίο είναι πλήρως γνωστό, και η λύση του βρίσκεται σε έναν χώρο q διαστάσεων. Σκοπός είναι να ξαναγραφεί στη μορφή ενός αθροίσματος M όρων, των γινομένων q ανεξάρτητων 1Δ συναρτήσεων, δηλαδή:

$$u(x_1, x_2, \dots, x_q) \approx \sum_{i=1}^M X_i^1(x_1)X_i^2(x_2)\dots X_i^q(x_q)$$

όπου ο πάνω δείκτης συμβολίζει τη συνάρτηση βάσης και ο κάτω δείκτης την ομάδα βάσεων στην οποία ανήκει η κάθε συνάρτηση. Έστω ότι είναι ήδη γνωστή η προσέγγιση της λύσης ενός πεδίου u διατυπωμένο σε δύο διαστάσεις, που αποτελείται από $n - 1$ βάσεις και αναζητείται ο επόμενος, (n -οστός) όρος. Συνεπώς, είναι ήδη γνωστή η προσέγγιση του πεδίου ως:

$$u_{n-1}(x, y) = \sum_{i=1}^{n-1} X_i(x)Y_i(y) \quad (7.1)$$

Επόμενο βήμα είναι να προστεθεί ένας επιπλέον όρος (ο n -οστός), ώστε το άθροισμα που θα προκύψει να προσεγγίσει όσο ακριβέστερα γίνεται το ήδη γνωστό πεδίο u , δηλαδή:

$$u_n(x, y) = u_{n-1}(x, y) + X_n(x)Y_n(y) = \sum_{i=1}^{n-1} X_i(x)Y_i(y) + X_n(x)Y_n(y) \quad (7.2)$$

Στο τρέχον βήμα, άγνωστες είναι οι δύο 1Δ συναρτήσεις $X_n(x)$ και $Y_n(y)$. Σκοπός της μεθόδου είναι να προσεγγισθεί το ήδη γνωστό πεδίο με τις ελάχιστες δυνατές βάσεις. Συνεπώς, σε κάθε βήμα είναι απαραίτητο να ελαχιστοποιείται η διαφορά μεταξύ του δομημένου διαχωρισμένου πεδίου και του πραγματικού, το οποίο γίνεται βρίσκοντας τις κατάλληλες συναρτήσεις $X_n(x)$ και $Y_n(y)$ που ελαχιστοποιούν τη διαφορά αυτή. Λύση στο παραπάνω πρόβλημα θα δώσει μια επαναληπτική διαδικασία. Σε κάθε εσωτερικό βήμα της διαδικασίας αυτής, ο όρος $X_n^p(x)$ (με p συμβολίζεται ο μετρητής των εσωτερικών επαναλήψεων) υπολογίζεται με βάση τον ήδη γνωστό όρο $Y_n^{p-1}(y)$, και αντίστροφα, έως ότου επιτευχθεί σύγκλιση, με την κατάλληλη ανοχή σφάλματος (2.30).

B'.1 Στρατηγική Εναλλασσόμενων Κατευθύνσεων

Κάθε εσωτερική επανάληψη εμπεριέχει q βήματα, εάν το πρόβλημα είναι διατυπωμένο σε q διαστάσεις, δηλαδή ένα βήμα ανά 1Δ συνάρτηση βάσης. Για ευκολότερη κατανόηση, θα θεωρηθεί

χωρίς βλάβη της γενικότητας, πως οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι δύο. Επίσης, για συντομία, οι συναρτήσεις $X_n^p(x)$ και $Y_n^p(y)$ θα συμβολίζονται με X_n^p και Y_n^p αντίστοιχα. Συνεπώς, θα υπάρχουν δύο βήματα:

• **Βήμα 1: Υπολογισμός του X_n^p από το Y_n^{p-1}**

Στο στάδιο αυτό της διαδικασίας εμπλουτισμού, το μέχρι τώρα πεδίο είναι:

$$u(x, y) \approx u_n(x, y) = \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n^{p-1} Y_n^{p-1} \quad (7.3)$$

και αναζητείται η συνάρτηση X_n^p , η οποία θα υπερτεθεί στα προηγούμενα, δηλαδή:

$$u(x, y) \approx u_n(x, y) = \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n^p Y_n^{p-1} \quad (7.4)$$

ελαχιστοποιώντας το σφάλμα.

Ο υπολογισμός βασίζεται στην προβολή Galerkin του σφάλματος μεταξύ πραγματικού και προσεγγιστικού πεδίου.

Σύμφωνα με αυτή, όλοι οι όροι της εξίσωσης μεταφέρονται στο πρώτο μέλος, πολλαπλασιάζονται με μια συνάρτηση βάσης $u^* = Y_n^{p-1}$ και, στη συνέχεια, ολοκληρώνονται κατά την y διεύθυνση, δηλαδή:

$$\int_y Y_n^{p-1} \left[u(x, y) - \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n^p Y_n^{p-1} \right] dy = 0 \quad (7.5)$$

Αναπτύσσοντας τους όρους, προκύπτει:

$$\int_y \left[Y_n^{p-1} u(x, y) - Y_n^{p-1} \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n^p (Y_n^{p-1})^2 \right] dy = 0$$

$$\int_y Y_n^{p-1} u(x, y) dy - \sum_{i=1}^{n-1} X_i \int_y Y_n^{p-1} Y_i dy + X_n^p \int_y (Y_n^{p-1})^2 dy = 0$$

$$X_n^p = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} X_i \int_y Y_n^{p-1} Y_i dy - \int_y Y_n^{p-1} u(x, y) dy}{\int_y (Y_n^{p-1})^2 dy} \quad (7.6)$$

Η παραπάνω εξίσωση προσδιορίζει τη συνάρτηση X_n^p της τρέχουσας βάσης μέσω πλήρως ορισμένων μεγεθών. Με γνωστή τη συνάρτηση X_n^p , επόμενο βήμα της επαναληπτικής διαδικασίας είναι ο υπολογισμός του Y_n^p .

• **Βήμα 2: Υπολογισμός του Y_n^p από το X_n^p**

Με αντίστοιχη ανάλυση όπως στο 1^ο βήμα, δεδομένου ότι πλέον αναζητείται η νέα μορφή του πεδίου:

$$u(x, y) \approx u_n(x, y) = \sum_{i=1}^{n-1} X_i Y_i + X_n^p Y_n^p \quad (7.7)$$

προκύπτει η αντίστοιχη σχέση που προσδιορίζει τη συνάρτηση Y_n^p :

$$Y_n^p = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} Y_i \int_x X_n^p X_i dx - \int_x X_n^p u(x, y) dx}{\int_x (X_n^{p-1})^2 dx} \quad (7.8)$$

Δεδομένου ότι οι συναρτήσεις X_n^p και Y_n^p είναι πεπλεγμένες, η παραπάνω διαδικασία γίνεται επαναληπτικά, έως ότου υπάρξει σύγκλιση μεταξύ τους. Το κριτήριο σύγκλισης είναι το ίδιο με αυτό της σύγκλισης κατά την επίλυση ενός πεδίου με τη χρήση του PGD, όπως αυτό αναφέρεται στην αντίστοιχη Ενότητα (2.30).

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να γενικευτεί και για πεδία οποιασδήποτε διάστασης q . Η διαδικασία εύρεσης των συναρτήσεων σε κάθε ομάδα βάσεων θα γίνει προφανώς q φορές, δηλαδή μια βάση ανά διάσταση του πεδίου.

Βιβλιογραφία

- [1] Alfio Quareteroni, Rozza Gianluigi : *Reduced Order Methods for Modeling and Computational Reduction*. Springer, 2014.
- [2] Francisco Chinesta, Roland Keunings, Adrien Leygue : *The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulations A Primer*. Springer, 2014.
- [3] Francisco Chinesta, Pierre Ladeveze : *Seperated Representations and PGD-Based Model Reduction-Fundamentals and Applications*. Springer, 2014.
- [4] Francisco Chinesta, Elias Cueto : *PGD-Based Modeling of Materials, Structures and Processes*. Springer, 2013.
- [5] Βασίλης, Παπαγεωργίου: *Προγραμματισμός της Μεθόδου του Ιδιο-Γενικευμένου Διαχωρισμού (Proper Generalized Decomposition) για την Πρόλεξη και/ή τη Συμπύεση της Λύσης 2Δ Μονίμων και Μη-Μονίμων ΜΔΕ. Εφαρμογή στη Βελτιστοποίηση με Χρήση της Συζυγούς Μεθόδου*. Διπλωματική Εργασία. Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., 2016.
- [6] Charles Hirsch : *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 2: Computational Methods of Inviscid and Viscous Flows*. Wiley-Interscience Publication, 1990.
- [7] Κυριάκος, Χ. Γιαννάκογλου: *Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στις Στροβιλομηχανές*. ΕΜΠ, 2006.
- [8] Vasilis Papageorgiou, Konstantinos Samouchos, Kyriakos Giannakoglou: *The unsteady continuous adjoint method assisted by the proper generalized decomposition method*. In EURO-GEN International Conference on Evolutionary and Deterministic Methods for Design Optimization and Control with Applications to Industrial and Societal Problems,, September 13-15 2017.