

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

Ανάπτυξη-Προγραμματισμός της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου για Διφασικές Ροές. Εφαρμογή στη Βελτιστοποίηση Στατικού Αναμίκτη Δύο Ρευστών

Διπλωματική Εργασία

Νικόλαος Γαλανός

Επιβλέπων: Κυριάχος Χ. Γιαννάχογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2020

Ευχαριστίες

Η ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας σηματοδοτεί το τέλος της πεμπτοετούς φοίτησης μου στη σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του ΕΜΠ. Έτσι, λοιπόν, κρίνω απαραίτητο να εκφράσω τις ευχαριστίες μου σε όλους τους ανθρώπους που συνέβαλαν στην ολοκλήρωση τόσο της παρούσης εργασίας, όσο και των προπτυχιακών μου σπουδών στο ΕΜΠ.

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Κυριάκο Γιαννάκογλου, για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον θέμα. Επίσης, θα ήθελα να τον ευχαριστήσω για όλη την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγηση κατά την εκπόνηση της εργασίας, αλλά και για όλες τις γνώσεις που μου προσέφερε καθ΄ όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

Επιπροσθέτως, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον διδάκτορα Βαγγέλη Παπουτσή, ο οποίος αφιέρωσε χρόνο από τις προσωπικές του ασχολίες, προκειμένου να απαντήσει στις απορίες μου και να μου δώσει την απαραίτητη καθοδήγηση. Χωρίς τις υποδείξεις του το έργο μου θα ήταν σαφώς δυσκολότερο.

Σε αυτό το σημείο, δεν θα μπορούσα να παραλείψω τους γονείς μου, Αργύρη και Φωτεινή, για τη στήριξη που μου παρείχαν όλα αυτά τα χρόνια στις επιλογές μου. Τέλος, θα ήθελα, να ευχαριστήσω όλα τα κοντινά μου πρόσωπα, συμφοιτητές και μη, για την κατανόηση και στήριξη τους αυτά τα πέντε χρόνια των σπουδών μου.



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

Ανάπτυξη-Προγραμματισμός της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου για Διφασικές Ροές. Εφαρμογή στη Βελτιστοποίηση Στατικού Αναμίκτη Δύο Ρευστών

Διπλωματική Εργασία

Νιχόλαος Γαλανός

Επιβλέπων: Κυριάχος Χ. Γιαννάχογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2020

Περίληψη

Αντικείμενο της διπλωματικής εργασίας είναι η μαθηματική διατύπωση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου (continuous adjoint method) σε προβλήματα διφασικών ροών με αναμίξιμα ρευστά, και η εφαρμογή της στη βελτιστοποίηση ενός στατικού αναμίκτη δύο ρευστών, με στόχο την ελαχιστοποίηση των απωλειών ολικής πίεσης και τη μεγιστοποίηση της ομοιομορφίας του μείγματος στην έξοδο. Η ροή θεωρείται στρωτή και οι δύο φάσεις αντιμετωπίζονται ως ασυμπίεστες και πλήρως αναμίξιμες, χωρίς να συμβαίνουν χημικές αντιδράσεις μεταξύ τους.

Οι συζυγείς μέθοδοι αποτελούν μαθηματικά-υπολογιστικά εργαλεία, για τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης-στόχου, εξασφαλίζοντας παράλληλα την ικανοποίηση των περιορισμών του προβλήματος (λ.χ. εξισώσεις Navier-Stokes). Στην εργασία αυτή, χρησιμοποιούνται δύο συναρτήσεις-στόχοι. Η πρώτη εκφράζει τις απώλειες ολικής πίεσης, και η δεύτερη την ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο του αναμίκτη. Εισάγοντας κατάλληλους συντελεστές βάρους προκύπτει η τελική συνάρτηση κόστους ως γραμμικός συνδυασμός των προηγούμενων και το πρόβλημα μετατρέπεται σε πρόβλημα μονοκριτηριακής βελτιστοποίησης (single objective optimization problem). Στη συνέχεια, ορίζεται η επαυξημένη συνάρτηση κόστους, και από την παραγώγισή της ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος προκύπτουν οι συζυγείς πεδιακές εξισώσεις, οι συζυγείς οριακές συνθήκες και η έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας. Για την επίλυση των εξισώσεων του ευθέος και συζυγούς προβλήματος προγραμματίστηκαν οι σχετικοί επιλύτες στο λογισμικό OpenFOAM v.1912. Έπειτα, υπολογίζεται η παράγωγος ευαισθησίας για κάθε μεταβλητή σχεδιασμού με τα γνωστά πεδία ροής, με βάση την οποία και ανανεώνονται οι μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος με τη μέθοδο της απότομης καθόδου.

Στην εργασία αυτή, επιλύεται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης μορφής (shape optimization), το οποίο αφορά ένα στατικό αναμίκτη δύο εισόδων και μιας εξόδου με την ανάμιξη να υποβοηθείται από σταθερά εμπόδια-φράκτες που παρεμβαίνουν στη ροή. Ο αναμίκτης έχει σταθερό μήκος και τα εμπόδια είναι τοποθετημένα εντός αυτού σε σταθερή απόσταση μεταξύ τους. Στόχος είναι ο σχεδιασμός της μορφής του κάθε εμποδίου ξεχωριστά, διατηρώντας σταθερό το πάχος του. Για την παραμετροποίηση της μορφής των εμποδίων χρησιμοποιείται η τεχνική της μορφοποίησης με ογκομετρικές B-Splines, με τις συντεταγμένες των σημείων ελέγχου του πλέγματος μορφοποίησης να αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος.

Επιλέγοντας διάφορους συνδυασμούς για τους συντελεστές βάρους των επιμέρους συναρτήσεων-στόχων, επιλύεται ένα σύνολο προβλημάτων βελτιστοποίησης και παράγεται το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων.



National Technical University of Athens School of Mechanichal Engineering Fluid Section Parallel CFD & Optimization Unit

Development-Programming of the Continuous Adjoint Method for Two-Phase Flows. Optimization of a Static Mixing Device

Diploma Thesis

Nikolaos Galanos

Advisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

Athens, 2020

Abstract

This diploma thesis aims at the mathematical formulation of the continuous adjoint method for two-phase flows and its utilization for the optimization of a static mixing device. In fact, a multi-objective optimization problem is formulated and solved for minimum total pressure losses inside the static mixing device and maximum mixture uniformity at the outlet. This diploma thesis is dealing with cases with two incompressible, miscible fluids, not chemically reacting, under the assumption of a laminar flow.

The adjoint method is a mathematical-computational tool, used to compute the gradient of an objective function in gradient-based optimization methods, while securing that the constraints of the problem are satisfied (i.e. the Navier-Stokes equations, in the case of CFD applications). This diploma thesis uses two objective functions. The first one is the total pressure losses inside the device which are equivalent to energy consumption, and the second one is the mixture uniformity at the outlet of the static mixing device. The weighted sum of these two quantities of interest was the objective function to be minimized in a Single Objective Optimization (SOO) problem. The augmented objective function is, then, formulated. Its differentiation with respect to (w.r.t.) the design variables of the optimization

problem results to the adjoint flow equations, the adjoint boundary conditions and the sensitivity derivatives (SD). In order to solve the primal and adjoint equations, the corresponding solvers were programmed using the open-source C++ libraries of OpenFOAM. Finally, the value of each design variable is updated with the use of its sensitivity derivative, according to the steepest-descent method.

With the developed/programmed method and software, this diploma thesis aims at the solution of shape optimization problems. The static mixing device is a pipe of fixed length, equiped with several baffles evenly distributed along the axial direction. The goal is to re-design the shape of each baffle seperately, not allowing the baffle to change along the longitudinal direction, thus retaing its flatness and thickness. In order to parametize the shape of the baffles, volumetric B-Splines morphing is utilized. The coordinates of the control points of the morphing box consitute the design variables of the problem.

Through the solution of a number of optimization problems, each of which with a different set of weights, the Pareto front of optimal solutions is computed.

Ακρωνύμια

| ЕМП | Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο | |
|--------------------|-------------------------------------------------------------------------|--|
| ΕΘΣ | Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών | |
| ΜΠΥΡ&Β | Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης | |
| $\Upsilon P\Delta$ | Υπολογιστική Ρευστοδυναμική | |
| 2Δ | Δ ιδιάστατος | |
| 3Δ | Τριδιάστατος | |
| μδε | μερική διαφορική εξίσωση | |
| CFD | Computational Fluid Dynamics National Technical University of Athens | |
| NTUA | | |
| PCopt | Copt Parallel CFD & Optimization un | |
| CAD | Computer Aided Design | |
| CPU | Central Processing Unit | |
| EA | Evolutionary Algorithms | |
| VoF | Volume of Fraction | |
| FAE | Field Adjoint Equations | |
| gdPDEs | grid-displacement Partial Differential Equations | |

Περιεχόμενα

| 1 | Εισ | Εισαγωγή | | | |
|-----------------------|---------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-----------|--|--|
| 1.1 Αναμίκτες Ρευστών | | Αναμίχτες Ρευστών | 1 | | |
| | 1.2 | Βελτιστοποίηση | 3 | | |
| | | 1.2.1 Γενικά περί βελτιστοποίησης | 3 | | |
| | | 1.2.2 Αιτιοκρατικές και Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης | 3 | | |
| | | 1.2.3 Η ανάπτυξη των Συζυγών Μεθόδων στην ΜΠΥΡ&Β | 5 | | |
| | | 1.2.4 Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος σε Διφασικές Ροές | 5 | | |
| | 1.3 | Δομή της Διπλωματικής Εργασίας | 6 | | |
| 2 | Σχε | εδιασμός του Στατικού Αναμίκτη | 9 | | |
| | 2.1 | Εξωτερική Γεωμετρία | 9 | | |
| | 2.2 | Εμπόδια-Φράχτες της Ροής | 10 | | |
| 3 | То | Διφασικό Μοντέλο Ροής | 13 | | |
| | 3.1 | Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής | 13 | | |
| | 3.2 | Διακριτοποίηση με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Όγκων | 15 | | |
| | | 3.2.1 Η διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς | 16 | | |
| | 3.3 | Ο Αλγόριθμος SIMPLE σε Διφασικές Ροές | 22 | | |
| 4 | 4 Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για Μόνιμες, Στρωτές, Διφα- | | | | |
| | σιχ | ές Ροές | 25 | | |
| | 4.1 | Εισαγωγικά σχόλια | 25 | | |
| | 4.2 | Επιλογή Συναρτήσεων-Στόχων | 26 | | |
| | 4.3 | Εισαγωγή των Πεδίων των Συζυγών Μεταβλητών | 27 | | |
| | | 4.3.1 Υπολογισμός 1ου χωρικού ολοκληρώματος | 30 | | |
| | | 4.3.2 Υπολογισμός 2ου χωρικού ολοκληρώματος | 30 | | |
| | | 4.3.3 Υπολογισμός 3ου χωρικού ολοκληρώματος | 34 | | |
| | 4.4 | Συζυγείς Πεδιακές Εξισώσεις | 35 | | |
| | 4.5 | Οριακές Συνθήκες του Συζυγούς Προβλήματος | 36 | | |
| | | 4.5.1 Όρια εισόδου S_I | 37 | | |
| | | 4.5.2 Όρια εξόδου S_O | 37 | | |
| | | 4.5.3 Στερεά τοιχώματα S_W | 38 | | |
| | 4.6 | Παράγωγοι Ευαισθησίας | 39 | | |

5 Γένεση του Υπολογιστικού Πλέγματος και Προλέξεις της Ροής 43

| | 5.1 | Γένεση του Υπολογιστιχού Πλέγματος | 43 |
|--------------|-----------------------------------|-----------------------------------------------------------------|----|
| | 5.2 | Πρόλεξη της Ροής | 43 |
| 6 | Πεε | οί Ακρίβειας Υπολογισμού των Παραγώγων Ευαισθησίας | 53 |
| | 6.1 | Εισαγωγικά σχόλια | 53 |
| | 6.2 | Η FI Συνεχής Συζυγής Μέθοδος | 54 |
| | | 6.2.1 Γενικά περί της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου | 54 |
| | | 6.2.2 Η FI Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για Διφασικές Ροές | 56 |
| | | 6.2.3 Οι Παράγωγοι Ευαισθησίας | 62 |
| | 6.3 | Η Enhanced-SI (E-SI) Συζυγής Διατύπωση | 64 |
| | 6.4 | Πιστοποίηση Υπολογισμού Παραγώγων Ευαισθησίας με τις Συζυγείς | |
| | | Μεθόδους | 69 |
| | 6.5 | Υπολογισμός των Παραγώγων Ευαισθησίας του Στατικού Αναμίκτη | 72 |
| 7 | Bελ | τιστοποίηση μιας Συσκευής Ανάμιξης Δύο Ρευστών | 77 |
| | 7.1 | Παραμετροποίηση της Γεωμετρίας των Εμποδίων με Ογκομετρικές Κα- | - |
| | | $\mu \pi 0 \lambda \epsilon \varsigma B$ -Splines | 78 |
| | 7.2 | Αλγόριθμος Βελτιστοποίησης | 80 |
| | 7.3 | Αποτελέσματα της Βελτιστοποίησης του Στατικού Αναμίκτη | 80 |
| 8 | Aνα | αχεφαλαίωση - Συμπεράσματα | 89 |
| \mathbf{A} | Α΄ Συναρτήσεις βάσης B-Splines 93 | | |
| B | Βιβλιογραφία | | |

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Αναμίκτες Ρευστών

Οι αναμίχτες είναι μηχανολογικές συσκευές που χρησιμοποιούνται για τη συνεχή ανάδευσηανάμιξη ρευστών διαφορετικής πυκνότητας και συνεκτικότητας. Ανάλογα με τον τρόπο που επιτυγχάνουν την ανάμιξη της ροής, διακρίνονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες, σε δυναμικούς (dynamic mixers) και στατικούς (static-motionless mixers). Η ειδοποιός διαφορά των δυναμικών αναμικτών έγκειται στο ότι χρησιμοποιούν περιστρεφόμενα εξαρτήματα (λ.χ. δρομείς) υποκινούμενα, συνήθως, από κάποιο ηλεκτροκινητήρα.

Οι στατιχοί αναμίχτες αποτελούν πλήρως αχίνητες διατάξεις με εμπόδια τοποθετημένα κατά μήκος, τα οποία είναι υπεύθυνα τη συστροφή της ροής, το διαχωρισμό της σε ρεύματα, την επιτάχυνση ή επιβράδυνσή της. Στόχος είναι να δημιουργήσουν ένα σύνθετο προφίλ ροής, ενισχύοντας το φαινόμενο της διάχυσης μάζας και μεταφοράς θερμότητας στη διεπιφάνεια των εμπλεχόμενων φάσεων. Οι αναμίχτες των ρευστών δεν αποτελούν νέες μηχανολογικές συσκευές. Το πρώτο μοντέλο στατικού αναμίκτη συναντάται το 1874 στην εργασία [3], με στόχο την ανάμιξη μεταξύ αέρα και αέριου καυσίμου. Ωστόσο, η χρήση τους επεκτάθηκε σε βιομηχανικές εφαρμογές μετά το 1970. Στην εργασία [4] παρουσιάζεται η χρήση τους ως ένας μηχανισμός που ενισχύει τη χημική αντίδραση μεταξύ των εμπλεκόμενων φάσεων. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι η χρήση των εν λόγω συσκευών στην βιομηχανία περιορίστηκε, αρχικά τουλάχιστον, στην ανάμιξη υγρών φάσεων χωρίς την εμφάνιση φαινομένων τύρβης στο εσωτεριχό [5] και, αργότερα, επεκτάθηκε σε προβλήματα μεταφοράς θερμότητας, τυρβώδους ροής και πολυφασικών ροών. Στην εργασία [6] πραγματοποιείται μια μελέτη ενίσχυσης του φαινομένου μεταφοράς θερμότητας και της θερμικής ομογενοποίησης με χρήση στατικών αναμικτών. Τέλος, στην εργασία [7] παρουσιάζονται αναλυτικά οι βιομηχανικές εφαρμογές στις οποίες προτιμάται η χρήση στατιχών, αντί των δυναμιχών, αναμιχτών.

Στο σχήμα 1.1 παρουσιάζεται ενδεικτικά το CAD μοντέλο για τρεις σύγχρονους εμπο-



Σχήμα 1.1: Στατικοί αναμίκτες [8]: (a) μοντέλο Kenics (γωνία συστροφής των πτερυγίων 180°), (β) μοντέλο Ross LPD (γωνία διασταύρωσης των εμποδίων $\theta = 90°$), (γ) μοντέλο Sulzer SMX

ρικούς στατικούς αναμίκτες. Με βάση το σχήμα 1.1 είναι εμφανές ότι η ανάδευση της ροής πραγματοποιείται κατά την αξονική κατεύθυνση του αγωγού. Ακόμα, είναι σημαντικό ότι η απόδοση ενός στατικού αναμίκτη μετράται με δύο κριτήρια: το πρώτο είναι η ισχύς που καταναλώνεται για την υλοποίηση της ροής στο εσωτερικό του αναμίκτη (η οποία ισοδυναμεί με την πτώση ολικής πίεσης στο εσωτερικό), και η δεύτερη είναι η ομοιομορφία του μείγματος που επιτυγχάνεται στην έξοδο.

Το αδιάστατο μήκος ενός στατικού αναμίκτη αποτελεί μια σημαντική σχεδιαστική παράμετρο και ορίζεται ως εξής

$$L' = \frac{L}{D} \tag{1.1}$$

όπου L είναι το συνολικό μήκος του αναμίκτη και D η διάμετρός του.

1.2 Βελτιστοποίηση

1.2.1 Γενικά περί βελτιστοποίησης

Η βελτιστοποίηση αποτελεί σημαντικό τομέα έρευνας στον κλάδο της μηχανολογίας, καθότι στην σημερινή εποχή είναι απαραίτητη, σε προβλήματα μηχανικού, η εύρεση της βέλτιστης λύσης που θα ικανοποιεί τις προδιαγραφές του προβλήματος. Η μέθοδος βελτιστοποίησης είναι το εργαλείο που ανιχνεύει τον χώρο των υποψήφιων λύσεων και οδηγεί (με έξυπνο και γρήγορο τρόπο αν είναι μια πραγματικά καλή μέθοδος) στον εντοπισμό της βέλτιστης λύσης. Είναι γνωστό ότι οι μηχανικοί, να γίνεται διάκριση ανάμεσα στους όρους 'βελτιστοποίηση' και 'βελτίωση'. Προφανώς, και οι δύο ενέργειες είναι επιθυμητές για τον σχεδιαστή (αφού ακόμα και η 'βελτίωση' οδηγεί σε καλύτερη λειτουργική αξία μιας υπάρχουσας διάταξης ή συνιστώσας μηχανολογικής κατασκευ-ής). Για ένα μηχανικό ο οποίος καλείται να σχεδιάσει το βέλτιστο σύστημα, στόχος του είναι να επιλέξει τον κατάλληλο αλγόριθμο ο οποίος θα οδηγήσει στη βέλτιστη λύση στον ελάχιστο δυνατό χρόνο. Με τον όρο 'βέλτιστη λύση' εννοούμε το σύνολο τιμών των σχεδιαστικών παραμέτρων του προβλήματος οι οποίες οδηγούν στην ελαχιστοδο τημάν των στόχων που έχουν τεθεί.

Ένα χαραχτηριστικό πρόβλημα βελτιστοποίησης ενός στόχου στον τομέα της εξωτεριχής αεροδυναμιχής, αποτελεί η ελαχιστοποίηση του συντελεστή οπισθέλχουσας c_D μιας αεροτομής διατηρώντας σταθερή την τιμή του συντελεστή άνωσης c_L , για δεδομένες συνθήχες επ΄ άπειρον ροής. Η παραπάνω διατύπωση δείχνει ότι, στην πραγματιχότητα, πρόκειται για πρόβλημα δύο στόχων: ελάχιστη τιμή του c_D και αμετάβλητη-γνωστή τιμή c_L. Παρόλα αυτά, όπως διατυπώθηχε στην αρχή της παραγράφου, η διαχείριση και επίλυση του προβλήματος γίνεται ως πρόβλημα ενός στόχου. Συγκεκριμένα, τίθεται ως στόχος η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης $(c_L - c_{L,desired})^2 + wc_D$, όπου $c_{L,desired}$ είναι η γνωστή τιμή του συντελεστή άνωσης που πρέπει να εξασφαλιστεί. Αξίζει να τονιστεί η παρουσία του συντελεστή w στην παραπάνω συνάρτηση. Η σημασία του δεν είναι αμελητέα, γιατί καθορίζει τη σχετική βαρύτητα μεταξύ των δύο στόχων (ελαχιστοποίηση c_D , διατήρηση c_L). Η τιμή του καθορίζεται από τον μηχανικό. Στην περίπτωση αυτού του παραδείγματος σχοπός της βελτιστοποίησης είναι ο επανασχεδιασμός της αεροτομής, ξεκινώντας από μια γνωστή γεωμετρία. Το συγκεκριμένο πρόβλημα εντάσσεται στην κατηγορία των 'προβλημάτων βελτιστοποίησης μορφής' (shape optimization problems).

1.2.2 Αιτιοκρατικές και Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης

Η κυριότερη διάκριση των μεθόδων, και όχι προβλημάτων βελτιστοποίησης, είναι σε στοχαστικές και αιτιοκρατικές. Οι πρώτες χαρακτηρίζονται από το γεγονός ότι χρησιμοποιούν στοιχεία και εργαλεία τυχαίας αναζήτησης προς εύρεση της βέλτι-

στης λύσης. Βασικό πλεονέκτημά τους είναι η ευκολία με την οποία προσαρμόζονται στο εκάστοτε πρόβλημα, αρκεί να υπάρχει ένα λογισμικό το οποίο θα πραγματοποιεί την αξιολόγηση των πιθανών λύσεων (θα υπολογίζει τις απαιτούμενες τιμές των συναρτήσεων-στόχων), καθώς και ότι δεν εγκλωβίζονται σε τοπικά ακρότατα. Κύριος εχπρόσωπος των στοχαστιχών μεθόδων βελτιστοποίησης αποτελούν οι εξελιχτιχοί αλγόριθμοι (ΕΑ) [21, 22, 23]. Οι τελευταίοι αποτελούν υπολογιστικά μοντέλα για την επίλυση προβλημάτων, τα οποία μιμούνται μηχανισμούς εξέλιξης προερχόμενους από τη φύση, όπως η επιλογή γονέων (parent selection), οι διασταυρώσεις μεταξύ υποψήφιων λύσεων-απογόνων (crossover) και οι μεταλλάξεις αυτών (mutation). Οι μέθοδοι αυτοί χρειάζονται έναν αρχικό πληθυσμό λύσεων, ο οποίος αξιολογείται και στη συνέχεια υπόκειται στις προαναφερθείσες διαδικασίες, προκειμένου να ανανεωθεί. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται μέχρις ότου βρεθεί η βέλτιστη λύση. Λαμβάνοντας υπόψη τον αριθμό αξιολογήσεων που εκτελούνται ανά κύκλο του αλγορίθμου βελτιστοποίησης, γίνεται αντιληπτό ότι το βασικό μειονέκτημα των ΕΑ είναι το αυξημένο υπολογιστικό χόστος, γεγονός που φαίνεται χυρίως όταν χρησιμοποιείται ένα χρονοβόρο λογισμικό αξιολόγησης (λ.χ. επιλύτη εξισώσεων Navier-Stokes σε προβλήματα ΥΡΔ). Εξαιτίας της αργής σύγκλισης των ΕΑ χρησιμοποιούνται συνήθως υποκατάστατα πρότυπα αξιολόγησης (μεταπρότυπα) [24], προχειμένου να τους επιταχύνουν. Στόχος τους είναι να προσεγγίσουν το πραγματικό πρόβλημα με συναρτήσεις οι οποίες μπορούν να υπολογιστούν σε μηδαμινό χρόνο σε σχέση με τον αχριβή υπολογισμό της συνάρτησης-στόχου του προβλήματος.

Οι αιτιοκρατικές μέθοδοι βασίζονται στην έννοια των παραγώγων μιας συνάρτησηςστόχου, τις οποίες καλούνται και να υπολογίσουν. Συχνά, μάλιστα, γίνεται υπολογισμός (ή προσέγγιση) υψηλότερης τάξης παραγώγων, το οποίο συντελεί σε ταχύτερη σύγκλιση της μεθόδου αυξάνοντας παράλληλα το υπολογιστικό κόστος. Επίσης, οι συγκεκριμένες μέθοδοι είναι όλες επαναληπτικές ή βηματικές, πραγματοποιώντας μια διαδρομή ζιγκ-ζαγκ στο χώρο των λύσεων. Ξεκινούν από μια αρχική υποψήφια λύση και πραγματοποιούν βήματα ή προόδους ακολουθώντας την κλίση της συνάρτησηςστόχου. Για τον λόγον αυτόν, ονομάζονται και μέθοδοι βασισμένες στην κλίση (gradient-based methods). Για τον υπολογισμό των παραγώγων της συνάρτησηςστόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού έχουν αναπτυχθεί αρκετές μέθοδοι. Λ.χ., η παράγωγος ως προς τον i-οστό βαθμό ελευθερίας είναι δυνατό να προσεγγιστεί με ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών

$$\frac{\delta F}{\delta b_i} = \frac{F(b_1, b_2, ..., b_i + \epsilon, ..., b_N) - F(b_1, b_2, ..., b_i, ..., b_N)}{\epsilon}$$
(1.2)

όπου ϵ μια σταθερά, πολύ μικρής τιμής, η οποία καθορίζεται από το χρήστη. Η εξ. 1.2 πρέπει να εφαρμοστεί N φορές (για τις N τιμές του δείκτη i) στην τρέχουσα λύση $\overrightarrow{b_n}$. Συνεπώς, το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη, αν ληφθεί υπόψη και ο υπολογισμός της $F(\overrightarrow{b_n})$, ανέρχεται σε N+1 αξιολογήσεις (και, μάλιστα, με ακρίβεια πρώτης τάξης). Μερικές ακόμα μέθοδοι υπολογισμού της κλίσης είναι μεταξύ άλλων η μέθοδος των συζυγών μεταβλητών (Complex Variable Method) [18, 19] και η μέθοδος της ευθείας διαφόρισης (Direct Differentiation) [20]. Κοινό χαρακτηριστικό των παραπάνω μεθόδων αποτελεί η άμεση εξάρτησή τους από το πλήθος μεταβλητών σχεδιασμού του προβλήματος, γεγονός που αυξάνει σημαντικά τον αριθμό αξιολογήσεων-υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη του αλγορίθμου βελτιστοποίησης.

Ένα σημαντικό μειονέκτημα αυτών των μεθόδων σε σύγκριση με τις στοχαστικές αποτελεί ο μεγάλος χρόνος επένδυσης, για τη μαθηματική διατύπωση και τον προγραμματισμό, καθώς, επίσης, και ότι είναι δύσκολα επεκτάσιμες σε άλλα παρεμφερή προβλήματα (λ.χ. αν αλλάξει η τιμή της συνάρτησης-στόχου). Επιπρόσθετα, μολονότι συγκλίνουν σχετικά γρήγορα, υπάρχει ο κίνδυνος εγκλωβισμού σε τοπικά ακρότατα.

1.2.3 Η ανάπτυξη των Συζυγών Μεθόδων στην ΜΠΥΡ&Β

Οι συζυγείς διατυπώσεις [14] είναι μαθηματικά-υπολογιστικά εργαλεία υπολογισμού της κλίσης μιας συνάρτησης-στόχου, εξασφαλίζοντας ταυτόχρονα την ικανοποίηση των βασικών εξισώσεων του προβλήματος (σε εφαρμογές υπολογιστικής ρευστομηχανικής, εξισώσεις ροής, εξισώσεις Euler ή Navier-Stokes). Τα τελευταία χρόνια, η ανάπτυξη των συζυγών μεθόδων για τον υπολογισμό πρώτης (και ανώτερης τάξης) παραγώγων, έχει αποτελέσει μια από τις κύριες δραστηριότητες της Μονάδας Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης (ΜΠΥΡΒ) του ΕΜΠ [25, 26, 27, 28]. Βασικό προταίρημα των συζύγων μεθόδων σε σύγκριση με άλλες μεθόδους υπολογισμού της κλίσης, όπως αυτές που αναφέρονται στην υποενότητα 1.2.2, είναι ότι επιτυγχάνουν σταθερό αριθμό αξιολογήσεων ανά κύκλο βελτιστοποίησης και ανεξαρτησία από το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού.

Οι συζυγείς μέθοδοι διαχρίνονται σε δύο χατηγορίες, στη διαχριτή και συνεχή συζυγή μέθοδο. Η ειδοποιός διαφορά της διαχριτής μεθόδου είναι ότι η αντιχειμενιχή συνάρτηση και οι εξισώσεις του προβλήματος πρώτα διαχριτοποιούνται και γραμμικοποιούνται και στη συνέχεια παράγεται η, προς επίλυση, συζυγής εξίσωση. Αντίθετα, η συνεχής συζυγής μέθοδος βασίζεται στην επαυξημένη συνάρτηση-στόχο F_{aug}, η οποία συντίθεται από την αναλυτική έχφραση της συνάρτησης-στόχου και από το ολοκλήρωμα σε όλο το χωρίο και στο χρόνο (στην περίπτωση των μη-μόνιμων προβλημάτων) των εξισώσεων κατάστασης πολλαπλασιασμένων με τη συνάρτηση των συζυγών μεταβλητών. Στη συνέχεια, εντοπίζονται οι ποσότητες που πρέπει να μηδενιστούν και αυτό παράγει τις συζυγείς εξισώσεις και τις οριαχές τους συνθήκες.

1.2.4 Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος σε Διφασικές Ροές

Αντικείμενο της διπλωματικής εργασίας αποτελεί η ανάπτυξη της συνεχούς συζυγούς μεθόδου για τον υπολογισμό της κλίσης συναρτήσεων-στόχων σε προβλήματα διφασικών ροών. Η συνεχής συζυγής μέθοδος έχει ήδη εφαρμοστεί σε περιπτώσεις ασυμπίεστης και συμπιεστής ροής, με τη διαφόριση των εξισώσεων Navier-Stokes και τις εξισώσεις μοντέλων τύρβης, με εφαρμογές σε προβλήματα βελτιστοποίησης μορφής

(shape optimization) και βελτιστοποίησης τοπολογίας (topology optimization).

Υπάρχουν αρχετά υπολογιστικά μοντέλα διαθέσιμα για τη μοντελοποίηση της ροής δύο ρευστών μέσα στο ίδιο χωρίο ολοκλήρωσης [32, 33, 34]. Η κυριότερη διάκριση μεταξύ αυτών σχετίζεται με το αν συμβαίνει ανάμιξη μεταξύ των φάσεων (miscible fluids) ή όχι (immiscible fluids), δηλαδή αν η επιφάνεια μεταξύ τους είναι διακριτή και δεν παρατηρείται διάχυση της μιας φάσης μέσα στην άλλη.

Η διπλωματική εργασία ειδικεύεται στη βελτιστοποίηση μορφής στατικών συσκευών, εντός των οποίων έχουμε παρουσία δύο ασυμπίεστων, αναμίξιμων υγρών φάσεων, χωρίς να λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις μεταξύ τους. Τέτοιου είδους μηχανολογικές διατάξεις έχουν ήδη παρουσιαστεί στην ενότητα 1.1. Γίνεται αντιληπτό ότι σε τέτοιου είδους εφαρμογές είναι πολύ σημαντικό η κατανομή της ροής στην έξοδο του αγωγού να διέπεται από ομοιομορφία των δύο φάσεων. Αχόμα, πρέπει να ελαχιστοποιηθεί η πτώση ολικής πίεσης κατά μήκος του αγωγού, διότι μεγάλες απώλειες ολικής πίεσης ισοδυναμούν με υψηλή κατανάλωση ισχύος για την υλοποίηση της ροής στον αναμίκτη. Στη βιβλιογραφία συναντώνται αρχετές εργασίες οι οποίες ασχολούνται με τη βελτιστοποίηση τέτοιων συσκευών τόσο ως προς την ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο [9, 10, 11], όσο και ως προς τις απώλειες ολικής πίεσης στο εσωτερικό [12, 13]. Ωστόσο, χαμία από αυτές δεν χρησιμοποιεί τη συνεχή συζυγή μέθοδο, τουλάχιστον κατά τις γνώσεις του συγγραφέα αυτής της εργασίας. Συγκεκριμένα, στην εργασία [9] πραγματοποιείται μια παραμετρική μελέτη και συγκρίνονται οι αποδόσεις δύο διαφορετικών εμπορικών αναμικτών σε διάφορες συνθήκες ροής. Παρόμοια, στην εργασία [10] γίνεται η συσχέτιση της γωνίας τοποθέτησης των εμποδίων στο εσωτερικό του αναμίχτη με την ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο χαι τις απώλειες ολιχής πίεσης και παρουσιάζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα. Τέλος, στην εργασία [13] προτείνεται μια συσχέτιση ανάμεσα στη γεωμετρία και την πτώση ολικής πίεσης στο εσωτερικό ενός αναμίχτη τύπου Kenics (σχήμα 1.1.α), και εξετάζεται η απόδοση του εν λόγω αναμίχτη για διαφορετιχούς αριθμούς Reynolds, ενώ στην εργασία [12] πραγματοποιείται μια μεταβολή στη γεωμετρία ενός αναμίκτη τύπου Sulzer SMX (σχήμα 1.1.γ) και επιτυγχάνεται μείωση της πτώσης ολικής πίεσης στο εσωτερικό.

1.3 Δομή της Διπλωματικής Εργασίας

Η διπλωματική αυτή εργασία δομείται ως εξής:

- Στο κεφάλαιο 2 καθορίζονται οι διαστάσεις του στατικού αναμίκτη και παρουσιάζεται το CAD μοντέλο, το οποίο σχεδιάστηκε στο πλαίσιο της εργασίας.
- Στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται οι εξισώσεις Navier-Stokes στην περίπτωση μόνιμης, στρωτής και διφασική ροής καθώς και οι επιβαλλόμενες οριακές συνθήκες. Επίσης, περιγράφεται ο τρόπος διακριτοποίησης των εξισώσεων στο λογισμικό Ο-

penFOAM έτσι ώστε να εξασφαλίζεται ακρίβεια δεύτερης τάξης. Ακόμα, δίνεται έμφαση στον αλγόριθμο επίλυσης των εξισώσεων ροής.

- Στο κεφάλαιο 4 αναπτύσσεται αναλυτικά η συνεχής συζυγής μέθοδος σε προβλήματα μόνιμων, στρωτών, διφασικών ροών. Συγκεκριμένα, ορίζονται οι συναρτήσειςστόχοι με τις οποίες ασχολείται η διπλωματική αυτή εργασία, παρουσιάζονται οι συζυγείς πεδιακές εξισώσεις και οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος. Επιπλέον, παρουσιάζονται οι πρώτες παράγωγοι της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.
- Στο κεφάλαιο 5 παρουσιάζεται η γένεση του υπολογιστικού πλέγματος του στατικού αναμίκτη και εφαρμόζεται το λογισμικό, το οποίο αναπτύχθηκε στο πλαίσιο αυτής της εργασίας, για την επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος.
- Στο κεφάλαιο 6 αναπτύσσονται οι υπόλοιπες συζυγείς διατυπώσεις και δίνεται έμφαση στην ακρίβεια υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας. Συγκεκριμένα, γίνεται πιστοποίηση του λογισμικού υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με τις συζυγείς μεθόδους (FI, SI, E-SI), το οποίο προγραμματίστηκε στο πλαίσιο της εργασίας. Επίσης, υπολογίζονται οι τιμές των παραγώγων ευαισθησίας στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη με την SI και την E-SI συζυγή διατύπωση και με ένα κεντρικό σχήμα Πεπερασμένων Διαφορών.
- Στο κεφάλαιο 7, ως εφαρμογή των ανωτέρω, πραγματοποιείται η βελτιστοποίηση του στατικού αναμίκτη, και παρουσιάζονται τα σχετικά αποτελέσματα.
- Στο κεφάλαιο 8 συνοψίζονται τα αποτελέσματα της διπλωματικής εργασίας και εξάγονται συμπεράσματα.

Κεφάλαιο 2

Σχεδιασμός του Στατικού Αναμίκτη

Το κεφάλαιο αυτό αποτελεί μια εισαγωγή στο μοντέλο του στατικού αναμίκτη το οποίο σχεδιάστηκε και βελτιστοποιήθηκε στο πλαίσιο της διπλωματικής εργασίας. Στόχος είναι να καθοριστεί πλήρως η γεωμετρία του αναμίκτη και να παρουσιαστούν οι κύριες διαστάσεις του.

2.1 Εξωτερική Γεωμετρία

Πρωταρχικός στόχος αυτής της εργασίας αποτελεί ο σχεδιασμός της γεωμετρίας του αναμίκτη της ροής σε λογισμικό CAD, ώστε να προκύψει το σχήμα πάνω στο οποίο θα πραγματοποιηθεί η αριθμητική πρόλεξη της ροής. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό SolidWorks.

Σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 1.1 σχετικά με μοντέλα στατικού αναμίκτη, γίνεται αντιληπτό ότι η εν λόγω συσκευή πρέπει να αποτελεί έναν αγωγό σταθερού μήκους και διαμέτρου. Η διάμετρος του αναμίκτη επιλέχθηκε να είναι 100mm και το αδιάστατο μήκος (εξ. 1.1) έλαβε την τιμή 7, η οποία αποτελεί μια αρκετά ρεαλιστική τιμή για τη συγκεκριμένη παράμετρο σχεδιασμού [8]. Έτσι, λοιπόν, σύμφωνα με την εξ. 1.1 προκύπτει το συνολικό μήκος του αγωγού

$$L = L' \cdot D = 700mm$$

Επειδή στο εσωτερικό του αναμίκτη υλοποιείται η ροή δύο ρευστών με διαφορετικές ιδιότητες, τοποθετήθηκαν δύο είσοδοι, καθεμιά με διάμετρο 50mm. Η πρώτη είσοδος είναι πλήρως ευθυγραμμισμένη με το κυρίως σώμα του αναμίκτη, ενώ η δεύτερη σχηματίζει με αυτό γωνία ίση με 30°. Επίσης, ο αναμίκτης διαθέτει ενιαία έξοδο, από όπου εξέρχεται το ομογενοποιημένο μείγμα, διαμέτρου 50mm και ευθυγραμμισμένη με το χυρίως σώμα του αγωγού. Η γεωμετρία παρουσιάζεται στο σχήμα 2.1.

2.2 Εμπόδια-Φράχτες της Ροής

Εξετάζοντας τα επιμέρους σχέδια από διάφορες μελέτες που έχουν πραγματοποιηθεί σχετικά με στατικούς αναμίκτες, όπως εκείνα που παρουσιάζονται στο σχήμα 1.1, γίνεται αντιληπτό ότι στο εσωτερικό του αναμίκτη πρέπει να υπάρχει μια κατάλληλη διάταξη η οποία θα ενισχύει την ομογενοποίηση των δύο φάσεων. Στην εργασία αυτή, επιλέχθηκε να τοποθετηθούν στο εσωτερικό του αγωγού συνολικά έξι εμπόδιαφράκτες που παρεμβαίνουν στη ροή και είναι υπεύθυνα για την απότομη στένωση της διατομής και τη δημιουργία ανακυκλοφορίας κατάντι. Τα παραπάνω εμπόδια έχουν, αρχικά, σχήμα ημικυκλίου, πάχος ίσο με 5mm και είναι ομοιόμορφα τοποθετημένα σε ίσες



Σχήμα 2.1: Η γεωμετρία του στατικού αναμίκτη στο εξωτερικό: Αριστερά οι δύο είσοδοι από όπου εισέρχονται τα δύο ρεύματα ρευστών με διαφορετικές ιδιότητες, δεξιά η ενιαία έξοδος από όπου εξέρχεται το τελικό μείγμα και, στη μέση, το κυρίως σώμα του αγωγού



Σχήμα 2.2: Η μορφή των εμποδίων στο εσωτερικό του στατικού αναμίκτη

αποστάσεις μεταξύ τους. Η αρχική μορφή των εμποδίων στο εσωτερικό του αναμίκτη παρουσιάζεται στο σχήμα 2.2. Τέλος, στον πίνακα 2.1 συνοψίζονται οι κυριότερες διαστάσεις του αναμίκτη.

| Δ ιάσταση | Τιμή (mm) | |
|--------------------------------------|-----------|--|
| Εσωτερική διάμετρος | 100 | |
| Μήκος κυρίως σώματος | 700 | |
| Μήχος εισόδων και εξόδου | 50 | |
| Δ ιάμετρος εισόδων και εξόδου | 50 | |
| Πάχος τοιχωμάτων | 2 | |
| Πάχος εμποδίων | 5 | |
| Απόσταση μεταξύ εμποδίων | 120 | |

Πίνακας 2.1: Κύριες διαστάσεις της αρχικής γεωμετρίας του στατικού αναμίκτη, πριν διεξαχθεί η διαδικασία της βελτιστοποίησης

Κεφάλαιο 3

Το Διφασικό Μοντέλο Ροής

Σε αυτή την ενότητα αναπτύσσονται οι εξισώσεις διφασικής ροής, ο τρόπος διακριτοποίησης τους στο λογισμικό OpenFOAM και παρουσιάζεται ένας κατάλληλος αλγόριθμος για την επίλυση του προβλήματος. Η εργασία αυτή αποσκοπεί στο σχεδιασμό της μορφής ενός στατικού αναμίκτη, ο οποίος επιτυγχάνει τη βέλτιστη ανάμιξη της ροής και ομοιομορφία στην έξοδο. Οι δύο υγρές φάσεις εντός του αναμίκτη θεωρούνται ασυμπίεστες και πλήρως αναμίζιμες. Επίσης, γίνεται η υπόθεση στρωτής και μόνιμης ροής και χρησιμοποιείται το μοντέλο κλάσματος όγκου (VoF method) [35, 36, 37].

3.1 Μαθηματική διατύπωση εξισώσεων ροής

Στην περίπτωση μόνιμης, στρωτής και διφασικής ροής οι εξισώσεις διατήρησης μάζας και ορμής παίρνουν τη μορφή

$$R^{p} = -\frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{i}} = 0$$
(3.1)

$$R_i^v = \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0, i = 1, 2, 3$$
(3.2)

όπου

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \tag{3.3}$$

είναι ο τανυστής των παραμορφώσεων. Στην εργασία αυτή, οι εξισώσεις γράφονται σύμφωνα με τη σύμβαση του Einstein, σύμφωνα με την οποία επαναλαμβανόμενοι δείκτες υποδηλώνουν άθροιση. Στην περίπτωση διφασικής ροής, στην οποία ακολουθείται η μέθοδος VoF, εισάγεται το βαθμωτό μέγεθος α (το κλάσμα όγκου που καταλαμβάνει η μία από τις δύο φάσεις προς τον όγκο του κελιού Ω_i). Το μέγεθος α , το οποίο θα αναφέρεται ως κλάσμα όγκου για το υπόλοιπο αυτής της εργασίας, φράσσεται μεταξύ των τιμών μηδέν και ένα, με την τιμή 1 να σημαίνει ότι ο στοιχειώδης όγκος Ω_i καταλαμβάνεται εξ ολοκλήρου από τη δεύτερη. Η εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος όγκου έχει τη μορφή

$$R^{\alpha} = v_i \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) = 0$$
(3.4)

όπου D ο συντελεστής διάχυσης μάζας. Αυτός λαμβάνει σταθερή τιμή μέσα στο χωρίο ολοκλήρωσης, με την τιμή του να εξαρτάται από χαρακτηριστικά της ροής, όπως η θερμοκρασία, η συνεκτικότητα και το μέγεθος των σωματιδίων των φάσεων. Η τιμή του μπορεί επίσης να προσδιοριστεί και πειραματικά και συναντάται σε σχετικούς πίνακες [38]. Γίνεται αντιληπτό ότι μεγαλύτερες τιμές του συντελεστή διάχυσης ευνοούν το φαινόμενο της ανάμιξης μεταξύ των δύο φάσεων. Η εξ. 3.4 είναι ισοδύναμη με τον Νόμο Διάχυσης του Fick.

Αξίζει να σημειωθεί ότι, παρόλο που οι δύο φάσεις είναι ασυμπίεστες, η πυχνότητα του μείγματος δεν είναι σταθερή εντός του χωρίου ολοκλήρωσης. Στην πραγματικότητα, υπάρχει μια μη-ομοιόμορφη κατανομή της πυκνότητας η οποία εξαρτάται από την κατανομή του κλάσματος όγκου. Το γεγονός αυτό δεν επιτρέπει να αμελήσουμε την επιρροή της χωρικής παραγώγου $\frac{\partial \rho}{\partial x_i}$, όπως συμβαίνει στην περίπτωση ασυμπίεστης μονοφασικής ροής. Το ίδιο ισχύει και για τις χωρικές παραγώγους της δυναμικής συνεκτικότητας μ. Η τιμή της πυκνότητας και της συνεκτικότητας του μείγματος προκύπτει ως συνάρτηση του κλάσματος όγκου και των γνωστών, σταθερών τιμών πυκνότητας και συνεκτικότητας για τις δύο φάσεις

$$\rho = \alpha \rho_1 + (1 - \alpha) \rho_2 \tag{3.5}$$

$$\mu = \alpha \mu_1 + (1 - \alpha) \mu_2 \tag{3.6}$$

όπου οι δείκτες 1, 2 υποδηλώνουν τις φάσεις με δείκτη 1 και 2, αντίστοιχα. Με τις εξ. 3.5, 3.6 ολοκληρώνεται το σύστημα των εξισώσεων ροής και μπορούν να υπολογιστούν όλα τα άγνωστα ροϊκά μεγέθη. Στην ενότητα 3.3 παρουσιάζεται ο αλγόριθμος επίλυσης της ροής.

Ο αναμίκτης αποτελείται από εισόδους, στερεά τοιχώματα και εξόδους. Οι οριακές συνθήκες που επιβάλλονται στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης είναι:

• Στα τμήματα εισόδου S_I, από όπου έχουμε είσοδο των φάσεων στο εσωτερικό

του αναμίκτη, επιβάλλεται συνθήκη Dirichlet για την ταχύτητα και το κλάσμα όγκου, μαζί με μηδενική συνθήκη Neumann για την πίεση.

- Στην περιοχή εξόδου S₀, για την ταχύτητα και το κλάσμα όγκου επιβάλλεται μηδενική συνθήκη Neumann, ενώ για την πίεση μηδενική συνθήκη Dirichlet.
- Στα στερεά τοιχώματα του αναμίκτη S_W, επιβάλλεται η συνθήκη μη-ολίσθησης για την ταχύτητα (μηδενική συνθήκη Dirichlet), ενώ για την πίεση και το κλάσμα όγκου επιβάλλονται μηδενικές συνθήκες Neumann.

3.2 Διακριτοποίηση με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Όγκων

Η διαχριτοποίηση των εξισώσεων ροής αποσχοπεί στον μετασχηματισμό των μεριχών διαφοριχών εξισώσεων σε ένα σύστημα αλγεβριχών εξισώσεων. Από την επίλυση του συστήματος των αλγεβριχών εξισώσεων προχύπτει η τιμή των ροϊχών μεγεθών σε συγχεχριμένα σημεία του χώρου χαι του χρόνου εντός του πεδίου ολοχλήρωσης. Για την επίλυση των εξισώσεων χρησιμοποιείται ως βάση προγραμματισμού το λογισμιχό OpenFOAM, το οποίο αχολουθεί την μέθοδο των πεπερασμένων όγχων με χεντροχυψελιχό σύστημα αποθήχευσης για τη διαχριτοποίηση των εξισώσεων. Έτσι, λοιπόν, το πεδίο επίλυσης διαμερίζεται σε έναν πεπερασμένο αριθμό διαχριτών περιοχών, ή διαφορετιχά όγχων ελέγχου, οι οποίοι περιλαμβάνουν τις θέσεις των σημείων στα οποία αναζητείται η λύση. Για την επίλυση ως προς το χρόνο, σε περίπτωση μη-μόνιμων προβλημάτων, ο χρόνος επίλυσης χωρίζεται σε έναν πεπερασμένο αριθμό διαχριτών περιοχών, ή βημάτων. Οι όγχοι ελέγχου έχουν γενιχά πολυεδριχό σχήμα, δεν αλληλοχαλύπτονται χαι χαλύπτουν πλήρως το χωρίο ολοχλήρωσης. Το χέντρο Ρ του όγχου ελέγχου Ω_P, στο οποίο υπολογίζεται η λύση, έχει συντεταγμένες **χ**_P τέτοιες ώστε

$$\int_{\Omega_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}}) d\Omega = 0$$

Για χάθε όγχο ελέγχου-χυψέλη του πλέγματος ορίζεται ένα σύνολο από επίπεδες επιφάνειες ('πλευρές'), που τον περιβάλλουν. Κάθε 'πλευρά' του πλέγματος συνορεύει με δύο χυψέλες, με εξαίρεση τις οριαχές. Για χάθε 'πλευρά' χρησιμοποιείται από το OpenFOAM η εξής σύμβαση: Η χυψέλη με το μιχρότερο αριθμό ονομάζεται 'ιδιοχτήτης' (owner) της 'πλευράς', ενώ η χυψέλη με τον μεγαλύτερο αριθμό 'γείτονας' (neighbour) της 'πλευράς'. Επιπλέον, οι οριαχές 'πλευρές' του πλέγματος συνορεύουν με μόνο μία χυψέλη, που ονομάζεται 'ιδιοχτήτης' της 'πλευράς'. Μία 'πλευρά' είναι ένα σύνολο δειχτών σε αντίστοιχα σημεία του πλέγματος. Η αρίθμηση των σημείων είναι τέτοια ώστε το χάθετο στην 'πλευρά' μοναδιαίο διάνυσμα να έχει φορά από τον 'ιδιοχτήτη' προς τον 'γείτονά' της. Τέλος, το χέντρο της 'πλευράς' με συντεταγμένες **x**f προσδιορίζεται από τη σχέση

$$\int_{S_f} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS = 0$$



Σχήμα 3.1: Διαμέριση του πεδίου επίλυσης σε πολυεδρικούς όγκους ελέγχου

3.2.1 Η διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς

Η εξίσωση μεταφοράς στη γενική της μορφή, για ένα βαθμωτό μέγεθος ϕ , γράφεται

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Xpovixóc 'Opoc}} + \underbrace{\frac{\partial (v_j \phi)}{\partial x_j}}_{\text{Opoc Metagopác}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{\text{Opoc Aláyugns}} = \underbrace{S_{\phi}(\phi)}_{\text{Opoc IInyrhs}}$$
(3.7)

Συγκρίνοντας την εξ. 3.7 με τις εξισώσεις ροής καθώς και με τις αντίστοιχες συζυγείς πεδιακές εξισώσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στην ενότητα 4.4, είναι εμφανής η ομοιότητα τους ως προς τους όρους από τους οποίους αποτελούνται. Συνεπώς, η μέθοδος διακριτοποίησης που αναλύεται για την εξισώση μεταφοράς μπορεί να εφαρμοστεί στις εξισώσεις Navier-Stokes για διφασική ροή καθώς και στις αντίστοιχες συζυγείς τους εξισώσεις. Εδώ, επιλύονται μόνο χρονικά μόνιμα προβλήματα. Συνεπώς, ο χρονικός όρος δεν λαμβάνεται υπόψη στις εξισώσεις ροής. Ωστόσο, για λόγους πληρότητας, γίνεται μία σύντομη ανάλυση σχετικά με τον τρόπο διακριτοποίησης των χρονικών παραγώγων. Σύμφωνα με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων, η εξ. 3.7 πρέπει να ικανοποιείται στο εσωτερικό του όγκου ελέγχου Ω_P και κέντρου P στην ολοκληρωματική της μορφή

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_P} \frac{\partial (v_j \phi)}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega_P} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega_P} S_{\phi}(\phi) d\Omega \qquad (3.8)$$

Η εξ. 3.8 είναι δεύτερης τάξης, διότι ο όρος διάχυσης περιέχει τις δεύτερες παραγώγους της ποσότητας φ ως προς το χώρο. Για τον λόγον αυτόν, είναι σημαντικό τα σχήματα διακριτοποίησης να είναι ίσης ή μεγαλύτερης τάξης, προκειμένου να εξασφαλίζεται καλή ακρίβεια. Συγκεκριμένα, για τη βαθμωτή συνάρτηση φ αναλύεται το ανάπτυγμα Taylor

γύρω από το σημείο Ρ

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}_{\mathbf{P}}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}}) : (\nabla \phi)_{P} + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}})^{2} :: (\nabla \nabla \phi)_{P} + \frac{1}{3!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}})^{3} ::: (\nabla \nabla \nabla \phi)_{P} + \dots$$
(3.9)

όπου ο τελεστής :: εχφράζει το εσωτερικό γινόμενο τανυστών ν-οστής τάξης.

Συνεπώς, η μεταβολή της ποσότητας φ στο χώρο γύρω από το σημείο P και στο χρόνο γύρω από τη δεδομένη χρονική στιγμή t θεωρείται γραμμική, διότι σύμφωνα με το ανάπτυγμα Taylor το σφάλμα αποκοπής είναι δεύτερης τάξης και επιτυγχάνεται, τελικά, δεύτερης τάξης ακρίβεια. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}_{\mathbf{P}}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}}) \cdot (\nabla \phi)_P$$
(3.10)

και

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) + \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_t \Delta t$$
(3.11)

Έτσι, ο υπολογισμός ενός χωρικού ολοκληρώματος μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\int_{\Omega_P} \phi(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Omega_P} \phi(\mathbf{x}_{\mathbf{P}}) d\Omega + \int_{\Omega_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}}) \cdot (\nabla \phi)_P d\Omega$$

$$= \phi(\mathbf{x}_{\mathbf{P}}) \int_{\Omega_P} d\Omega + (\nabla \phi)_P \cdot \int_{\Omega_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathbf{P}}) d\Omega$$

$$= \phi(\mathbf{x}_{\mathbf{P}}) \Omega_P$$
 (3.12)

Επιπλέον, με χρήση του θεωρήματος Gauss, τα χωρικά ολοκληρώματα μετατρέπονται σε επιφανειακά στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial a_i}{\partial x_j} d\Omega = \oint_{\partial\Omega} a_i n_j dS \tag{3.13}$$

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} d\Omega = \oint_{\partial \Omega} \phi n_i dS \tag{3.14}$$

όπου $\partial \Omega$ η κλειστή επιφάνεια που περιβάλλει τον όγκο ελέγχου Ω_P και n_j το μοναδιαίο διάνυσμα με κατεύθυνση κάθετη στην επιφάνεια $\partial \Omega$ και φορά προς τα έξω.



Σχήμα 3.2: Τμήμα μη-δομημένου 2Δ πλέγματος το οποίο έχει δημιουργηθεί στο περιβάλλον του OpenFOAM

Όρος Μεταφοράς

Σύμφωνα με τα παραπάνω, ο όρος μεταφοράς στην εξ. 3.7 γράφεται

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial(v_j \phi)}{\partial x_j} d\Omega = \oint_{\partial \Omega} v_j n_j \phi dS$$

$$\approx \sum_{\substack{f:faces\\f:faces}} (v_j n_j \phi)^f \Delta S^f$$

$$= \sum_{\substack{f:faces\\f:faces}} F^f \phi^f$$
(3.15)

όπου οι όροι με δείκτη f αφορούν την τιμή στο κέντρο της 'πλευράς' του όγκου ελέγχου, ενώ η συνάρτηση $F^f = (v_j n_j)^f \Delta S^f$ είναι η ροή μάζας (flux) που διέρχεται από την αντίστοιχη 'πλευρά'. Η ταχύτητα στο κέντρο της 'πλευράς' που χρειάζεται για τον υπολογισμό της ποσότητας F^f υπολογίζεται με γραμμική παρεμβολή των ταχυτήτων ως προς τα κέντρα των κυψελών εκατέρωθεν. Στην εξ. 3.15 χρειάζεται, επίσης, η ποσότητα φ υπολογισμένη στο κέντρο της κάθε 'πλευράς' του όγκου ελέγχου, κάτι το οποίο εξαρτάται από το σχήμα διακριτοποίησης. Για παράδειγμα, για την κυψέλη 3 του

σχήματος 3.2 ο όρος μεταφοράς διαχριτοποιείται, σύμφωνα με την εξ. 3.15, ως εξής

$$\int_{\Omega_3} \frac{\partial (v_j \phi)}{\partial x_j} d\Omega = -F_{23} \left(\omega^{23} \phi^2 + (1 - \omega^{23}) \phi^3 \right) -F_{13} \left(\omega^{13} \phi^1 + (1 - \omega^{13}) \phi^3 \right) +F_{34} \left(\omega^{34} \phi^3 + (1 - \omega^{34}) \phi^4 \right) +F_{35} \left(\omega^{35} \phi^3 + (1 - \omega^{35}) \phi^5 \right)$$
(3.16)

όπου οι συντελεστές ω εξαρτώνται από το σχήμα διακριτοποίησης. Στην εργασία αυτή, επιλέγονται ανάντι σχήματα διακριτοποίησης (upwing schemes). Για παράδειγμα, αν επιλεγούν 1^{ης} τάξης σχήματα διακριτοποίησης για τον όρο μεταφοράς και θεωρηθεί ότι η ταχύτητα έχει φορά από την κυψέλη 2 προς την κυψέλη 3, τότε ο συντελεστής ω^{23} παίρνει την τιμή 1, δηλαδή λαμβάνεται υπόψη μόνο η τιμή της ποσότητας ϕ στο κέντρο της κυψέλης 2.

Όρος Διάχυσης

Με χρήση του θεωρήματος Gauss, ο όρος διάχυσης γράφεται

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\partial \Omega} \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j dS \\
\approx \sum_{f:faces} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \right)^f \Delta S^f$$
(3.17)

Ο παραπάνω όρος μπορεί να διαχριτοποιηθεί με δύο τρόπους. Εξετάζεται εάν το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τα χέντρα δύο γειτονιχών χυψελών είναι χάθετο στην χοινή τους 'πλευρά' ή όχι. Οι δύο αυτές περιπτώσεις παρουσιάζονται στο σχήμα 3.3. Έχει νόημα να εξεταστεί η δεύτερη περίπτωση, η οποία παρουσιάζεται στο σχήμα 3.3. καθώς είναι και η γενιχότερη. Το χάθετο μοναδιαίο διάνυσμα \overrightarrow{n} αναλύεται σε δύο συνιστώσες, μία παράλληλη στο ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τα χέντρα των χυψελών (\overrightarrow{e}) χαι μία χάθετη σε αυτό (\overrightarrow{t}). Για τα διανύσματα αυτά ισχύει $\overrightarrow{n} + \overrightarrow{t} = \overrightarrow{e}$. Έτσι, λοιπόν, ισχύει ότι

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j = \frac{\partial \phi}{\partial x_j} e_j - \frac{\partial \phi}{\partial x_j} t_j \tag{3.18}$$

Ο πρώτος όρος στο δεξί μέλος της σχέσης 3.18 διαχριτοποιείται ως εξής

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_j} e_j = \frac{\phi^N - \phi^P}{\Delta} \tag{3.19}$$

όπου η ποσότητα Δ εκφράζει την απόσταση ανάμεσα στα κέντρα των κυψελών εκα-



Σχήμα 3.3: Δύο γειτονικές κυψέλες ενός πλέγματος όπου, (a) το ευθύγραμμο τμήμα μεταξύ των κέντρων των κυψελών είναι κάθετο στην κοινή τους 'πλευρά', (β) το ευθύγραμμο τμήμα μεταξύ των κέντρων των κυψελών δεν είναι κάθετο στην κοινή τους 'πλευρά'

τέρωθεν της 'πλευράς'. Για τον δεύτερο όρο, ο οποίος αποτελεί μια διόρθωση, γίνεται μια παρεμβολή από τα κέντρα των κυψελών στην 'πλευρά' ως εξής

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_j}\Big|_f = \omega^P \frac{\partial \phi}{\partial x_j}\Big|_P + \omega^N \frac{\partial \phi}{\partial x_j}\Big|_N \tag{3.20}$$

Για τον υπολογισμό των χωρικών παραγώγων στα κέντρα των κυψελών γίνεται η παραδοχή ότι είναι σταθερές στον όγκο ελέγχου και χρησιμοποιείται το θεώρημα Gauss

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_j}\Big|_{P,N} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial \Omega} \phi n_j dS = \frac{1}{\Omega} \sum_{f:faces} (\phi n_j)^f \Delta S^f$$
(3.21)

Τελικά, ο όρος διάχυσης για την κυψέλη 3 του σχήματος 3.2 γράφεται σε διακριτοποιημένη μορφή ως εξής

$$\int_{\Omega_{3}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \right) d\Omega = \Gamma_{\phi} \left(\frac{\phi^{3} - \phi^{1}}{\Delta^{13}} \Delta S^{13} + \frac{\phi^{3} - \phi^{2}}{\Delta^{23}} \Delta S^{23} + \frac{\phi^{4} - \phi^{3}}{\Delta^{34}} \Delta S^{34} + \frac{\phi^{5} - \phi^{3}}{\Delta^{35}} \Delta S^{35} \right) \\
+ \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{13} t_{j}^{13} \Delta S^{13} + \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{23} t_{j}^{23} \Delta S^{23} \\
+ \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{34} t_{j}^{34} \Delta S^{34} + \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{35} t_{j}^{35} \Delta S^{35} \tag{3.22}$$

Οι μερικές παράγωγοι στις 'πλευρές' αναλύονται με τον εξής τρόπο

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{13} t_{j}^{13} \Delta S^{13} &= \omega^{13} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{1} t_{j}^{13} \Delta S^{13} + (1 - \omega^{13}) \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \Big|_{3} t_{j}^{13} \Delta S^{13} \\ &= \frac{\omega^{13}}{\Omega_{1}} \sum_{f:faces1} (\phi n_{j})^{f} \Delta S^{f} t_{j}^{13} \Delta S^{13} + \frac{1 - \omega^{13}}{\Omega_{3}} \sum_{f:faces3} (\phi n_{j}) \Delta S^{f} t_{j}^{13} \Delta S^{13} \\ &= \frac{\omega^{13}}{\Omega_{1}} \left(\phi^{16} n_{j}^{16} \Delta S^{16} + \phi^{110} n_{j}^{110} \Delta S^{110} + \phi^{18} n_{j}^{18} \Delta S^{18} + \phi^{13} n_{j}^{13} \Delta S^{13} \right) t_{j}^{13} \Delta S^{13} + \frac{1 - \omega^{13}}{\Omega_{3}} \left(\phi^{13} n_{j}^{13} \Delta S^{13} + \phi^{23} n_{j}^{23} \Delta S^{23} + \phi^{34} n_{j}^{34} \Delta S^{35} + \phi^{35} n_{j}^{35} \Delta S^{35} \right) t_{j}^{13} \Delta S^{13} \\ &= (3.23) \end{aligned}$$

όπου Ω ο όγκος της κυψέλης, και οι συντελεστές ω εξαρτώνται από το σχήμα διακριτοποίησης. Τέλος, η τιμή του φ στο κέντρο κάθε 'πλευράς' υπολογίζεται με γραμμική παρεμβολή ανάμεσα στα κέντρα των κυψελών.

Όρος Πηγής

Όσοι όροι δεν μπορούν να γραφτούν στη μορφή των όρων μεταφοράς ή διάχυσης μοντελοποιούνται ως όροι πηγής. Πριν τη διαχριτοποίηση, ο όρος πηγής γραμμιχοποιείται, σε περίπτωση που είναι μη-γραμμιχός, χαι στη συνέχεια διαχριτοποιείται ως εξής

$$S_{\phi} = S_u + S_P \phi$$
$$\int_{\Omega_P} S_{\phi} d\Omega = S_u \Omega_P + S_P \phi_P \Omega_P$$

Χρονιχός Όρος

Όπως αναφέρθηκε νωρίτερα σε αυτήν την ενότητα, η διακριτοποίηση του χρονικού όρου πρέπει να είναι τέτοια ώστε να εξασφαλίζεται ακρίβεια δεύτερης τάξης. Γράφοντας το ανάπτυγμα Taylor της ποσότητας φως προς το χρόνο για την επόμενη χρονική στιγμή

$$\phi^{n} = \phi^{0} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial t^{2}} \Delta t^{2} + O\left(\Delta t^{3}\right)$$
$$\phi^{n} = \phi^{00} + \frac{\partial \phi}{\partial t} 2\Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial t^{2}} (2\Delta t)^{2} + O\left(\Delta t^{3}\right)$$

όπου $\phi^n = \phi(t + \Delta t)$ η τιμή της ποσότητας ϕ την επόμενη χρονική στιγμή, $\phi^0 = \phi(t)$ η τιμή της ποσότητας ϕ τη δεδομένη χρονική στιγμή και $\phi^{00} = \phi(t - \Delta t)$ η τιμή της ποσότητας ϕ την προηγούμενη χρονική στιγμή. Αφαιρώντας τις παραπάνω εξισώσεις κατά μέλη, με κατάλληλο τρόπο ώστε η δεύτερη χρονική παράγωγος να απλοποιηθεί,

προχύπτει η διαχριτοποιημένη μορφή του χρονιχού όρου

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{3\phi^n - 4\phi^0 + \phi^{00}}{2\Delta t} + O\left(\Delta t^2\right) \tag{3.24}$$

Συγκεντρώνοντας όλους τους παραπάνω όρους, προκύπτει η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης μεταφοράς (σχέση 3.7)

$$a_r\phi_r = \sum_{n=1}^{NB} a_n\phi_n + b \tag{3.25}$$

όπου ο δείκτης r υποδηλώνει την κυψέλη που εξετάζεται, a_r και a_n οι συντελεστές, NB ο αριθμός των γειτονικών κυψελών και b είναι ένας όρος που περιέχει τους όρους που δεν αντιμετωπίζονται με πεπλεγμένο (implicit) τρόπο. Η εξ. 3.25 αποτελεί ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων που επιλύεται με σκοπό τον προσδιορισμό του πεδίου τιμών των ϕ .

3.3 Ο Αλγόριθμος SIMPLE σε Διφασικές Ροές

Οι εξισώσεις διφασικής ροής επιλύονται στο περιβάλλον του OpenFOAM, το οποίο αποτελεί ένα ανοικτό λογισμικό υπολογιστικών προσομοιώσεων στη γλώσσα προγραμματισμού C++. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιείται για την επίλυση της ροής είναι μια επέκταση του αλγορίθμου SIMPLE (Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equations), δεδομένου ότι πρέπει να λαμβάνεται υπόψη η ύπαρξη δύο διαφορετικών φάσεων εντός του χωρίου ολοκλήρωσης.

Η εξίσωση μεταφοράς του χλάσματος όγχου α (εξ. 3.4) διαχριτοποιείται χατά τα γνωστά, σύμφωνα με όσα ειπώθηχαν στην προηγούμενη ενότητα, χαι επιλύεται για τον υπολογισμό του α με δεδομένο το πεδίο ταχύτητας από την προηγούμενη επανάληψη. Με το νέο πεδίο για το χλάσμα όγχου γίνεται η διόρθωση των ιδιοτήτων του μείγματος, δηλαδή της πυχνότητας χαι της δυναμιχής συνεχτιχότητας, με χρήση των εξ. 3.5, 3.6. Έπειτα, η εξίσωση της ορμής γράφεται σε ημι-διαχριτοποιημένη μορφή ως εξής

$$\alpha_P \mathbf{v}_P = H(\mathbf{v}) - \nabla p \tag{3.26}$$

όπου α_P οι διαγώνιοι συντελεστές του μητρώου που προχύπτουν από τη διαχριτοποίηση της εξ. 3.2, $H(\mathbf{v})$ το μητρώο των συντελεστών για τα γειτονιχά χελιά, που προχύπτουν από τη διαχριτοποίηση των όρων μεταφοράς χαι διάχυσης πολλαπλασιασμένων με τις

αντίστοιχες ταχύτητες. Ξαναγράφοντας την εξ. 3.26 ως προς τον όρο \mathbf{v}_P

$$\mathbf{v}_P = \frac{H(\mathbf{v})}{\alpha_P} - \frac{\nabla p}{\alpha_P} \tag{3.27}$$

Η τιμή της ταχύτητας στις 'πλευρές' των όγκων ελέγχου υπολογίζεται από την παρεμ-βολή

$$\mathbf{v}^{f} = \left(\frac{H(\mathbf{v})}{\alpha_{P}}\right)_{f} - \left(\frac{\nabla p}{\alpha_{P}}\right)_{f}$$
(3.28)

Για να προχύψει η ρητή έχφραση για το πεδίο πίεσης, η εξίσωση της συνέχειας για χαθαρά ασυμπίεστη ροή γράφεται σε διαχριτοποιημένη μορφή ως εξής

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \Rightarrow \sum_{f:faces} \mathbf{v}^f \cdot \mathbf{S} = 0 \tag{3.29}$$

όπου **S** είναι το κάθετο στην 'πλευρά' διάνυσμα με μέτρο ίσο με την επιφάνεια της 'πλευράς'. Αντικαθιστώντας την εξ. 3.28 στην εξ. 3.29 προκύπτει η ρητή έκφραση για το πεδίο πίεσης

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\alpha_P}\right) = \nabla \cdot \left(\frac{H(\mathbf{v})}{\alpha_P}\right) \tag{3.30}$$

η οποία, σε διαχριτοποιημένη μορφή, γράφεται

$$\sum_{f:faces} \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\nabla p}{\alpha_P}\right)_f = \sum_{f:faces} \mathbf{S} \cdot \left(\frac{H(\mathbf{v})}{\alpha_P}\right)_f$$
(3.31)

Επιπλέον, οι ροές στα 'πλευρές' των όγκων ελέγχου υπολογίζονται από τη σχέση

$$F^{f} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{v}^{f} = \mathbf{S} \cdot \left[\left(\frac{H(\mathbf{v})}{\alpha_{P}} \right)_{f} - \left(\frac{\nabla p}{\alpha_{P}} \right)_{f} \right]$$
(3.32)

Ανακεφαλαιώνοντας, ο αλγόριθμος επίλυσης των εξισώσεων ροής περιγράφεται από τα παρακάτω βήματα:

- Επιλύεται η διαχριτοποιημένη εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος όγκου α (εξ. 3.4) με χρήση του ήδη υπάρχοντος πεδίου πίεσης και ταχύτητας από την προηγούμενη επανάληψη του αλγορίθμου
- ii) Γίνεται η διόρθωση της πυκνότητας και της συνεκτικότητας του μείγματος με χρήση των εξ. 3.5, 3.6

- iii) Με τις πλέον διορθωμένες ιδιότητες του μείγματος επιλύεται η διακριτοποιημένη εξίσωση της ορμής (εξ. 3.2) και γίνεται μια πρόβλεψη για το πεδίο ταχύτητας
- iv) Με το διορθωμένο πεδίο ταχύτητας σχηματίζεται το μητρώο $H(\mathbf{v})$ και επιλύεται η εξ. 3.31 για να γίνει μια πρόβλεψη του πεδίου πίεσης p
- v) Με το διορθωμένο πεδίο πίεσης γίνεται η διόρθωση του ροών στις 'πλευρές' των όγχων ελέγχου με χρήση της εξ. 3.32. Παράλληλα, διορθώνεται το πεδίο ταχύτητας με χρήση της εξ. 3.27.

Τα βήματα (i)-(v) επαναλαμβάνονται μέχρις ότου ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο σύγκλισης.
Κεφάλαιο 4

Η Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για Μόνιμες, Στρωτές, Διφασικές Ροές

4.1 Εισαγωγικά σχόλια

Όπως έχει γίνει ήδη αντιληπτό από το χεφ. 1, οι συζυγείς μέθοδοι είναι ιδιαίτερα σημαντιχές για τις αιτιοχρατιχές μεθόδους βελτιστοποίησης, οι οποίες βασίζονται στον υπολογισμό της χλίσης της συνάρτησης-στόχου, διότι επιτρέπουν τον υπολογισμό των παραγώγων με υπολογιστιχό χόστος ανεξάρτητο από το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού του προβλήματος. Το γεγονός αυτό είναι πολύ σημαντιχό για το μηχανιχόσχεδιαστή, ο οποίος δεν χρειάζεται πλέον να περιορίσει τον αριθμό των μεταβλητών με τις οποίες παραμετροποιεί το πρόβλημα προχειμένου να διατηρήσει αρχετά χαμηλό το υπολογιστιχό χόστος. Στην ενοτήτα αυτή, αναλύεται η συνεχής συζυγής μέθοδος για μόνιμες, στρωτές χαι διφασιχές ροές. Αφού προσδιοριστεί η έχφραση της παραγώγου της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού \overrightarrow{b} , οι τελευταίες ανανεώνονται ως εξής

$$\overrightarrow{b}^{n+1} = \overrightarrow{b}^n + \overrightarrow{p}^n \tag{4.1}$$

όπου οι δείκτες n, n+1 αναφέρονται στην τρέχουσα και στην επόμενη επανάληψη του αλγόριθμου βελτιστοποίησης, αντίστοιχα, ενώ ο όρος \overrightarrow{p}^n αποτελεί μια διόρθωση. Στην εργασία αυτή, χρησιμοποιείται η μέθοδος της απότομης καθόδου για τον υπολογισμό της διόρθωσης των μεταβλητών σχεδιασμού και η εξ. 4.1 γίνεται

$$\overrightarrow{b}^{n+1} = \overrightarrow{b}^n - \eta \nabla F(\overrightarrow{b}^n) \tag{4.2}$$

όπου $\nabla F(\overrightarrow{b}^n)$ η κλίση της συνάρτησης-στόχου και η μια κατάλληλα επιλεγμένη, θετική

ποσότητα η οποία καθορίζει το μέγεθος του βήματος.

4.2 Επιλογή Συναρτήσεων-Στόχων

Η διπλωματική εργασία αποσκοπεί στον σχεδιασμό μιας συσκευής ανάμιξης δύο ρευστών, η οποία θα επιτυγχάνει όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο. Η μαθηματική διατύπωση της παραπάνω απαίτησης είναι η κατανομή του κλάσματος όγκου της φάσης 1 στο μείγμα να κυμαίνεται όσο το δυνατόν πιο κοντά στη μέση τιμή του στην επιφάνεια εξόδου. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει η πρώτη συνάρτηση κόστους, η οποία έχει τη μορφή

$$F_U = \frac{1}{2} \int_{S_O} v_i n_i \left(\alpha - \overline{\alpha}\right)^2 dS \tag{4.3}$$

όπου με $\overline{\alpha}$ συμβολίζεται η μέση τιμή του κλάσματος όγκου για τη φάση 1 στις επιφάνειες εξόδου

$$\overline{\alpha} = \frac{1}{|S_O|} \int_{S_O} \alpha dS \tag{4.4}$$

Επίσης, σε τέτοιου είδους εφαρμογές, είναι σημαντικό να επιτυγχάνεται χαμηλή πτώση ολικής πίεσης. Στόχος είναι, λοιπόν, ο σχεδιασμός μιας συσκευής καλής ενεργειακής απόδοσης. Η δεύτερη συνάρτηση κόστους του προβλήματος είναι

$$F_P = -\frac{1}{2} \int_{S_I, S_O} v_i n_i \left(p + \frac{1}{2} \rho v_j^2 \right) dS$$
(4.5)

Με βάση τα παραπάνω, γίνεται αντιληπτό ότι το προς επίλυση πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι δικριτηριακό. Η τελική έκφραση της συνάρτησης-στόχου που 'βλέπει' ο κώδικας βελτιστοποίησης προκύπτει εισάγοντας κατάλληλους συντελεστές βάρους w_1, w_2 ώστε

$$F = w_1 F_U + w_2 F_P \tag{4.6}$$

όπου οι συντελεστές w είναι σταθερές τιμές οι οποίες καθορίζονται από το χρήστη. Ο ρόλος τους είναι να ρυθμίσουν τη σχετική βαρύτητα ανάμεσα στους δύο στόχους του προβλήματος.

4.3 Εισαγωγή των Πεδίων των Συζυγών Μεταβλητών

Ως εισαγωγή, η συνεχής συζυγής μέθοδος σε προβλήματα διφασικών, στρωτών και χρονικά-μόνιμων ροών αναλύεται στη γενικότητά της, ανεξάρτητα δηλαδή με την συνάρτησηστόχο η οποία πρέπει να ελαχιστοποιηθεί. Για την ακρίβεια, κάθε συνάρτηση-στόχος, συμπεριλαμβανομένων και των συναρτήσεων ομοιομορφίας του μείγματος και απωλειών ολικής πίεσης που παρουσιάζονται προηγουμένως στην ενότητα 4.2, είναι μια έκφραση της μορφής

$$F = \int_{S_{I}} F_{S_{I_{i}}} n_{i} dS + \int_{S_{O}} F_{S_{O_{i}}} n_{i} dS$$
(4.7)

Επίσης, είναι άξιο αναφοράς το γεγονός ότι η εξάρτηση μιας συνάρτησης στόχου από τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος είναι διττή. Αφενός μεν η τιμή της εξαρτάται άμεσα από αυτές, αφετέρου δε εξαρτάται και έμμεσα διότι κάθε μεταβολή στις μεταβλητές σχεδιασμού οδηγεί σε διαφορετικό πεδίο ροής και, συνεπώς, σε διαφορετική τιμή της συνάρτησης-στόχου.

Η θεμελιώδης αρχή για τη διατύπωση της συζυγούς μεθόδου αποτελεί ο προσδιορισμός της επαυξημένης συνάρτησης L. Η τελευταία προχύπτει από την αναλυτική έκφραση της συνάρτησης-στόχου αν σε αυτή προστεθεί το χωρικό ολοκλήρωμα (σε όλο το πεδίο ροής) των εξισώσεων ροής πολλαπλασιασμένων με τα αντίστοιχα πεδία των πολλαπλασιαστών Lagrange. Οι τελευταίοι αποτελούν τις λεγόμενες συζυγείς μεταβλητές, οι οποίες μεταβάλλονται στο χώρο (και στο χρόνο αν πρόκειται για μη-μονιμο πρόβλημα). Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η επαυξημένη συνάρτηση έχει τη μορφή

$$L = F + \int_{\Omega} q R^{p} d\Omega + \int_{\Omega} u_{i} R_{i}^{v} d\Omega + \int_{\Omega} \phi R^{\alpha} d\Omega$$
(4.8)

όπου q είναι η συζυγής πίεση, u_i η συζυγής ταχύτητα και ϕ το συζυγές κλάσμα όγκου, ενώ R^p, R^v_i, R^α τα υπόλοιπα των εξ. 3.1, 3.2, 3.4 αντίστοιχα. Επειδή οι εξισώσεις ροής πρέπει να ικανοποιούνται παντού στο εσωτερικό του χωρίου ολοκλήρωσης, τα ολοκληρώματα στο δεξί μέλος της εξ. 4.8 είναι μηδενικά. Συνεπώς, η παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού της επαυξημένης συνάρτησης L και της αρχικής συνάρτησης-στόχου F είναι ίσες, υπό την προϋπόθεση ότι οι εξισώσεις ροής ικανοποιούνται πλήρως εντός του χωρίου ολοκλήρωσης. Σκοπός της συζυγούς μεθόδου είναι ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας $\frac{\delta F}{\delta t}$.

Η ολική μεταβολή μιας ροϊκής ποσότητας
 Φ είναι

$$\delta \Phi = \frac{\partial \Phi}{\partial b_n} \delta b_n + \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \delta x_k \tag{4.9}$$

όπου με δ συμβολίζεται η ολική μεταβολή και με ∂ η μερική μεταβολή. Ο όρος $\frac{\partial \Phi}{\partial b_n} \delta b_n$ εκφράζει τη μεταβολή της ποσότητας Φ εξαιτίας μεταβολής κάποιας μεταβλητής σχεδιασμού, ενώ ο όρος $\frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \delta x_k$ εκφράζει την επίδραση της αλλαγής της γεωμετρίας του αγωγού στην ολική μεταβολή της ποσότητας Φ . Με χρήση της εξ. 4.9, η ολική παράγωγος της συνάρτησης κόστους (εξ. 4.7) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού γράφεται

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \int_{S_I \cup S_O} \frac{\partial F_{S_i}}{\partial b_n} n_i dS + \int_{S_I \cup S_O} \frac{\partial F_{S_i}}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_i dS + \int_{S_I \cup S_O} F_{S_i} \frac{\delta (n_i dS)}{\delta b_n} \tag{4.10}$$

Στην διπλωματική εργασία, οποιαδήποτε αλλαγή στις μεταβλητές σχεδιασμού δεν οδηγεί στη μεταβολή της γεωμετρίας του αγωγού στις περιοχές εισόδου και εξόδου. Επομένως, τα δύο τελευταία ολοκληρώματα στο δεξί μέλος της εξ. 4.10 λαμβάνουν την τιμή μηδέν.

Ακόμα, το θεώρημα ολοκλήρωσης κατά Leibniz για μια συνάρτηση f(x,t) γράφεται

$$\frac{\delta}{\delta\theta} \int_{\alpha(\theta)}^{\beta(\theta)} f(x,t) \, dx = \int_{\alpha(\theta)}^{\beta(\theta)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial \theta} dx + f(\beta(\theta),t) \, \frac{\delta\beta(\theta)}{\delta\theta} - f(\alpha(\theta),t) \, \frac{\delta\alpha(\theta)}{\delta\theta} \quad (4.11)$$

Το παραπάνω θεώρημα στις τρεις διαστάσεις για μια συνάρτηση $F\left(\mathbf{x},t\right)$ γράφεται ως εξής

$$\frac{\delta}{\delta\theta} \int_{\Omega(\theta)} F\left(\mathbf{x}, t\right) d\Omega = \int_{\Omega(\theta)} \frac{\partial F\left(\mathbf{x}, t\right)}{\partial \theta} d\Omega + \int_{S} F\left(\mathbf{x}, t\right) \frac{\delta \mathbf{x}}{\delta\theta} \cdot \mathbf{n} dS \tag{4.12}$$

Επειδή τα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης εξαρτώνται άμεσα από τις μεταβλητές σχεδιασμού, η παράγωγος της επαυξημένης συνάρτησης L (εξ. 4.8) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος αναλύεται με βάση τον κανόνα ολοκλήρωσης Leibniz ως εξής

$$\frac{\delta L}{\delta b_{n}} = \frac{\delta F}{\delta b_{n}} + \underbrace{\int_{\Omega} q \frac{\partial R^{p}}{\partial b_{n}} d\Omega}_{\int_{\Omega} q \frac{\partial R^{p}}{\partial b_{n}} d\Omega} + \underbrace{\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial R^{v}_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega}_{\int_{\Omega} \phi \frac{\partial R^{\alpha}}{\partial b_{n}} d\Omega} + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega + \underbrace{\int_{S} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{\partial b_{n}} d\Omega}_{$$

όπου S είναι το σύνορο του χωρίου ολοκλήρωσης. Στα χωρικά ολοκληρώματα της εξ. 4.13 εμφανίζονται οι μικτές μερικές παράγωγοι των ροϊκών μεγεθών ως προς το χώρο και τις μεταβλητές σχεδιασμού. Για μια ροϊκή ποσότητα Φ μπορεί να γίνει εναλλαγή της σειράς μερικής παραγώγισης ως εξής

$$\frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial b_n} \right) \tag{4.14}$$

Επίσης, το θεώρημα Green-Gauss για μια διανυσματική συνάρτηση γράφεται ως εξής

$$\iiint_{\Omega} \left(\nabla \cdot \mathbf{F} \right) d\Omega = \iint_{S} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS \tag{4.15}$$

ή σε τανυστική γραφή

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F_i}{\partial x_i} d\Omega = \int_S F_i n_i dS \tag{4.16}$$

Οι εξ. 4.14, 4.16 αποδειχνύονται ιδιαίτερα χρήσιμες για τον υπολογισμό των χωρικών ολοκληρωμάτων στην εξ. 4.13, όπως φαίνεται στη συνέχεια.

Τέλος, η παραγώγιση των εξ. 3.5, 3.6 ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος δίνει

$$\frac{\partial \rho}{\partial b_n} = \rho_\Delta \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \tag{4.17}$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial b_n} = \mu_\Delta \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \tag{4.18}$$

όπου

$$\rho_{\Delta} = \rho_1 - \rho_2 \tag{4.19}$$

$$\mu_{\Delta} = \mu_1 - \mu_2 \tag{4.20}$$

είναι οι διαφορές πυχνότητας και δυναμικής συνεκτικότητας των δύο φάσεων, αντίστοιχα.

4.3.1 Υπολογισμός 1ου χωρικού ολοκληρώματος

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, ο όρος $\int_\Omega q \frac{\partial R^p}{\partial b_n} d\Omega$ αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} q \frac{\partial R^{p}}{\partial b_{n}} d\Omega = -\int_{\Omega} q \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{i}} \right) d\Omega$$

$$= -\int_{\Omega} q \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} + \rho \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} \right) d\Omega$$

$$= -\int_{\Omega} q \rho_{\Delta} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{\Omega} \rho_{\Delta} q v_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) d\Omega$$

$$= -\int_{\Omega} q \rho_{\Delta} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{\Omega} \rho_{\Delta} q v_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) d\Omega$$

$$= -\int_{\Omega} q \rho_{\Delta} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho_{\Delta} v_{i}q)}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega$$

$$= -\int_{\Omega} q \rho_{\Delta} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho q n_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho_{\Delta} v_{i}q)}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS$$

$$= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS$$

$$= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS$$

$$= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega - \int_{S} \rho q n_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} dS$$

$$= (4.21)$$

4.3.2 Υπολογισμός 2ου χωρικού ολοκληρώματος

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, ο όρος $\int_\Omega u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega$ αναλύεται ως εξής

$$\begin{split} \int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega &= \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega \\ &= \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opos Metagopás}} + \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right) d\Omega}_{\text{`Opos Iléons}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opos Aláxuons}}$$

Προς διευκόλυνση του αναγνώστη, ο οποίος ενδιαφέρεται για τη μαθηματική διατύπωση του όρου $\int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega$, τα τρία ολοκληρώματα στο δεξί μέλος της εξ. 4.22 αναλύονται το καθένα ξεχωριστά παρακάτω.

Όρος Μεταφοράς

Το χωρικό ολοκλήρωμα του όρου μεταφοράς αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \rho_\Delta u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_i v_j \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega$$

$$(4.23)$$

Στο δεύτερο ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξ. 4.23 επιτρέπεται η εναλλαγή της σειράς των δεικτών i, j χωρίς να επηρεάζεται η ορθότητα των υπολογισμών. Επιπλέον, για το τρίτο ολοκλήρωμα γίνεται εναλλαγή της σειράς μερικής παραγώγισης, σύμφωνα με την εξ. 4.14. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\rho v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \rho_{\Delta} u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega
+ \int_{\Omega} \rho u_{i} v_{j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} \right) d\Omega
= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega
+ \int_{S} \rho u_{i} v_{j} n_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho v_{j} u_{i})}{\partial x_{j}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega$$
(4.24)

Όρος Πίεσης

Με χρήση του θεωρήματος Green-Gauss, το χωρικό ολοκλήρωμα του όρου πίεσης γράφεται στη μορφή

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\frac{\partial p}{\partial x_{i}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\partial p}{\partial b_{n}} \right) d\Omega
= \int_{S} u_{i} n_{i} \frac{\partial p}{\partial b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial p}{\partial b_{n}} d\Omega$$
(4.25)

Όρος Διάχυσης

Το χωρικό ολοκλήρωμα του όρου διάχυσης αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial b_n} \right) d\Omega$$
$$= \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_\Delta \varepsilon_{ij} \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{\text{T1}} + \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} \right) d\Omega}_{\text{T2}}$$
(4.26)

Η ανάλυση του όρου (T1) της εξ. 4.26 δίνει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\mu_{\Delta} \varepsilon_{ij} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \mu_{\Delta} u_{i} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) d\Omega
= \int_{\Omega} \mu_{\Delta} u_{i} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} n_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS
- \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij})}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega
= - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \varepsilon_{ij} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} n_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS$$

$$(4.27)$$

Η ανάλυση του όρου (Τ2) της εξ. 4.26 δίνει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\mu \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial \mu}{\partial x_{j}} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} u_{i} \mu \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} \right) d\Omega
= \int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial \mu}{\partial x_{j}} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \mu u_{i} n_{j} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} dS
- \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu u_{i})}{\partial x_{j}} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} d\Omega
= - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \mu u_{i} n_{j} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} dS$$
(4.28)

Στην εξ. 4.28 ο τανυστής των παραμορφώσεων ε_{ij} αντικαθίσταται από τη σχέση 3.3 προκειμένου, τελικά, ο όρος (T2) να περιλαμβάνει εντός των χωρικών ολοκληρωμάτων τις παραγώγους μόνο των ροϊκών μεγεθών (πίεση p, ταχύτητα v_i , κλάσμα όγκου α) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Επίσης, γίνεται κατά τα γνωστά εναλλαγή των δεικτών i, j όπου κρίνεται απαραίτητο, καθώς και εναλλαγή της σειράς μερικών παραγώγων

σύμφωνα με την εξ. 4.14. Έτσι, με περαιτέρω ανάλυση του όρου προχύπτει

$$\begin{split} \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} \right) d\Omega &= -\int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) d\Omega \\ &+ \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega \\ &+ \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega \\ &+ \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{\Omega} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{S} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_i}{\partial b_n} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{S} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial}{\partial u_i} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega \\ &+ \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{S} \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_i} dS \\ &= -\int_{S} \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS \\ &= -\int_{S} \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS$$

όπου

$$\varepsilon_{ij}^{\alpha} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{4.30}$$

είναι ο τανυστής των συζυγών παραμορφώσεων.

Αντικαθιστώντας τους όρους (T1) και (T2) στην εξ. 4.26, προκύπτει η τελική έκφραση του χωρικού ολοκληρώματος του όρου διάχυσης

$$\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega = -\int_{\Omega} \mu_\Delta \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} \mu_\Delta u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} dS - \int_{S} \mu \varepsilon_{ij}^\alpha n_j \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij}^\alpha)}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS$$
(4.31)

4.3.3 Υπολογισμός 3ου χωρικού ολοκληρώματος

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, ο όρος $\int_\Omega \phi \frac{\partial R^\alpha}{\partial b_n} d\Omega$ αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial R^{\alpha}}{\partial b_{n}} d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right) \right) d\Omega \\
= \underbrace{\int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega}_{\mathrm{T3}} - \underbrace{\int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right) \right) d\Omega}_{\mathrm{T4}} \quad (4.32)$$

Ο όρος (T3) αναλύεται κατά τα γνωστά ως εξής

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \phi v_{i} \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega \\
= \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \phi v_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) d\Omega \\
= \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \phi v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS \\
- \int_{\Omega} \frac{\partial (v_{i}\phi)}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega$$
(4.33)

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 3.1, ο συντελεστής διάχυσης D λαμβάνει σταθερή τιμή εντός του χωρίου ολοκλήρωσης. Η τιμή αυτή εξαρτάται από τις ιδιότητες των δύο φάσεων. Συνεπώς, η χωρική παράγωγος $\frac{\partial D}{\partial x_i}$ και η παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού $\frac{\partial D}{\partial b_n}$ είναι μηδενικές. Έτσι, λοιπόν, είναι δυνατό να μεταφερθεί εκτός της χωρικής παραγώγου και της παραγώγου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Η ανάλυση του όρου (T4) δίνει

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) \right) d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial}{\partial b_n} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) \right) d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \phi D \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \right) d\Omega$$

$$= \int_{S} \phi D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \right) n_j dS - \int_{\Omega} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial b_n} dS$$

$$= \int_{S} \phi D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_n} \right) n_j dS - \int_{S} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} dS$$

$$+ \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} d\Omega$$
(4.34)

Τέλος, η αντικατάσταση των όρων (T3) και (T4) στην εξ. 4.32 δίνει

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\partial R^{\alpha}}{\partial b_{n}} d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \phi v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial (v_{i}\phi)}{\partial x_{i}} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega
- \int_{S} \phi D \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} \right) n_{j} dS + \int_{S} D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} n_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS
- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \right) \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega$$
(4.35)

4.4 Συζυγείς Πεδιαχές Εξισώσεις

Με αντικατάσταση των εξ. 4.21, 4.24, 4.25, 4.31, 4.35 στην εξ. 4.13 προκύπτει

$$\frac{\delta L}{\delta b_{n}} = \int_{\Omega} \left(\rho u_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{\partial (\rho v_{j} u_{i})}{\partial x_{j}} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_{j}} + \rho \frac{\partial q}{\partial x_{i}} + \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} d\Omega + \\
\int_{\Omega} \left(-\frac{\partial (v_{i}\phi)}{\partial x_{i}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \right) + \rho_{\Delta} \left(v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} + u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \right) + \mu_{\Delta} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \varepsilon_{ij} \right) \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} d\Omega \\
- \int_{\Omega} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\partial p}{\partial b_{n}} d\Omega + \int_{S} \left(u_{i} n_{i} + \frac{\partial F_{S_{i}}}{\partial p} n_{i} \right) \frac{\partial p}{\partial b_{n}} dS \\
+ \int_{S} \left(-\rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} - \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} n_{j} + \phi v_{i} n_{i} + D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} n_{j} + \frac{\partial F_{S_{i}}}{\partial \alpha} n_{i} \right) \frac{\partial \alpha}{\partial b_{n}} dS \\
+ \int_{S} \left(-\rho q n_{i} + \rho u_{i} v_{j} n_{j} + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_{j} + \frac{\partial F_{S_{j}}}{\partial v_{i}} n_{j} \right) \frac{\partial v_{i}}{\partial b_{n}} dS \\
- \int_{S} \mu u_{i} n_{j} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_{n}} dS - \int_{S} \phi D \frac{\partial}{\partial b_{n}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right) n_{j} dS \\
+ \int_{S} \left(q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS$$
(4.36)

Από την εξ. 4.36, είναι προφανές ότι η ολική μεταβολή της επαυξημένης συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού έχει εκφραστεί συναρτήσει των μεταβολών των ροϊκών μεγεθών $\frac{\partial p}{\partial b_n}, \frac{\partial v_i}{\partial b_n}$ και $\frac{\partial \alpha}{\partial b_n}$, τόσο στο εσωτερικό όσο και στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης. Δεδομένου ότι οι μεταβολές αυτές δεν είναι επιθυμητό να υπολογιστούν απαιτείται η απαλοιφή των ολοκληρωμάτων που τις περιέχουν. Επιβάλλοντας τον μηδενισμό των όρων στο εσωτερικό των χωρικών ολοκληρωμάτων προκύπτουν οι συζυγείς πεδιακές εξισώσεις, στη μορφή

$$R^q = -\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{4.37}$$

$$R_i^u = \rho u_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial (\rho v_j u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial q}{\partial x_i} + \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} = 0, i = 1, 2, 3$$
(4.38)

$$R^{\phi} = -\frac{\partial(v_i\phi)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\frac{\partial\phi}{\partial x_j} \right) + \rho_{\Delta} \left(v_i \frac{\partial q}{\partial x_i} + u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} = 0 \quad (4.39)$$

Συγκρίνοντας τις παραπάνω εξισώσεις με τις εξισώσεις ροής που παρουσιάζονται στην ενότητα 3.1, παρατηρείται σημαντική ομοιότητα ως προς τους όρους που περιέχουν. Επομένως, η μέθοδος διακριτοποίησης και ο αλγόριθμος επίλυσης που χρησιμοποι-ήθηκαν για την επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος προβλήματος μπορούν να εφαρμοστούν και για το συζυγές πρόβλημα. Ο επιπλέον όρος της εξ. 4.38, $\rho u_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$, ο οποίος ονομάζεται όρος ATC (Adjoint Transpose Convection Term), μοντελοποιείται ως όρος πηγής, σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην υποενότητα 3.2.1.

4.5 Οριακές Συνθήκες του Συζυγούς Προβλήματος

Με την απαλοιφή των χωρικών ολοκληρωμάτων, η παράγωγος ευαισθησίας της επαυξημένης συνάρτησης γίνεται ανεξάρτητη των άμεσων μεταβολών των ροϊκών μεγεθών εντός του χωρίου ροής. Έτσι, η σχέση που δίνει την ολική παράγωγο της συνάρτησηςστόχου γράφεται, πλέον, στη μορφή

$$\frac{\delta L}{\delta b_n} = \int_{S} \left(-\rho_{\Delta} q v_i n_i - \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j + \phi v_i n_i + D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j + \frac{\partial F_{S_i}}{\partial \alpha} n_i \right) \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} dS
+ \int_{S} \left(-\rho q n_i + \rho u_i v_j n_j + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS
+ \int_{S} \left(u_i n_i + \frac{\partial F_{S_i}}{\partial p} n_i \right) \frac{\partial p}{\partial b_n} dS
- \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS - \int_{S} \phi D \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j dS
+ \int_{S} \left(q R^p + u_i R_i^v + \phi R^\alpha \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS$$
(4.40)

Καθιστώντας την παραπάνω έκφραση ανεξάρτητη των άμεσων μεταβολών των ροϊκών μεγεθών στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης προκύπτουν οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος. Τέλος, οι εναπομείναντες όροι στην εξ. 4.40 αποτελούν την τελική έκφραση της παραγώγου ευαισθησίας της συνάρτησης-στόχου.

4.5.1 Όρια εισόδου S_I

Στις περιοχές εισόδου του στατικού αναμίκτη, πιθανή μεταβολή των τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού δεν οδηγεί σε αλλαγή της γεωμετρίας. Συνεπώς, η παράγωγος $\frac{\delta x_k}{\delta b_n}$, η οποία εκφράζει τη μεταβολή των κόμβων του υπολογιστικού πλέγματος εξαιτίας της μεταβολής των βαθμών ελευθερίας (grid-sensitivity derivatives), είναι μηδενική στα όρια εισόδου του χωρίου ολοκλήρωσης. Σύμφωνα, λοιπόν, με την εξ. 4.9, οι ολικές και μερικές μεταβολές των ροϊκών μεγεθών είναι ίσες.

Σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 3.1, στη διατομή εισόδου της ροής στον αναμίκτη επιβάλλονται συνθήκες Dirichlet για το κλάσμα όγκου α. Συνεπώς, η ολική μεταβολή ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού (αλλά και η μερική) είναι μηδέν $\frac{\delta \alpha}{\delta b_n} = \frac{\partial \alpha}{\partial b_n} = 0$. Έτσι, το πρώτο επιφανειακό ολοκλήρωμα στην εξ. 4.40 γραμμένο στα όρια εισόδου της ροής απαλείφεται.

Επιπλέον, λόγω συνθηκών Dirichlet για την ταχύτητα v_i στα όρια εισόδου του αναμίκτη, το δεύτερο επιφανειακό ολοκλήρωμα στην εξ. 4.40 γραμμένο στα όρια εισόδου της ροής απαλείφεται.

Η απαλοιφή των υπόλοιπων επιφανειαχών ολοχληρωμάτων τα οποία περιέχουν την άμεση μεταβολή των ροϊχών μεγεθών εξαιτίας της μεταβολής των μεταβλητών σχεδιασμού δίνει τις συζυγείς οριαχές συνθήχες στα όρια εισόδου του αναμίχτη

$$u_i n_i = u_{\langle n \rangle} = -\frac{\partial F_{S_{I,j}}}{\partial p} n_{S_{I,j}} \tag{4.41}$$

$$u_{\langle t\rangle}^{I} = u_{\langle t\rangle}^{II} = 0 \tag{4.42}$$

$$\phi = 0 \tag{4.43}$$

όπου $u_{\langle t \rangle}^{I}$, $u_{\langle t \rangle}^{II}$ οι δύο εφαπτομενικές συνιστώσες της ταχύτητας u_i . Τέλος, και χωρίς να απορρέει από τις παραπάνω απαλοιφές, επιβάλλεται για τη συζυγή πίεση q στις εισόδους του χωρίου ολοκλήρωσης μηδενική συνθήκη Neumann $\frac{\partial q}{\partial x_i}n_j = 0$.

4.5.2 Όρια εξόδου S_O

Στις περιοχές εξόδου του στατικού αναμίκτη, η αλλαγή των μεταβλητών σχεδιασμού δεν οδηγεί σε αλλαγή της γεωμετρίας. Έτσι, λοιπόν, όμοια με όσα αναφέρθηκαν προηγουμένως, ισχύει σύμφωνα με την εξ. 4.9 η ισότητα ολικής και μερικής παραγώγου. Σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 3.1, στις περιοχές εξόδου του αναμίκτη επιβάλλονται συνθήκες Dirichlet για την πίεση. Συνεπώς, η ολική μεταβολή της πίεσης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού (αλλά και η μερική) είναι μηδέν $\frac{\delta p}{\delta b_n} = \frac{\partial p}{\partial b_n} = 0$. Έτσι, το τρίτο επιφανειακό ολοκλήρωμα στην εξ. 4.40 γραμμένο στα όρια εξόδου της ροής απαλείφεται.

Επίσης, ο όρος $\int_S \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial b_n} dS$ μπορεί να θεωρηθεί αμελητέος, λόγω ότι η κατανομή ταχύτητας στην έξοδο του αναμίκτη διέπεται από ικανοποιητική ομοιογένεια.

Το πέμπτο επιφανειακό ολοκλήρωμα στην εξ. 4.40 απαλείφεται δεδομένου ότι, σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 3.1, επιβάλλεται μηδενική συνθήκη Neumann για το κλάσμα όγκου στην έξοδο.

Οι συζυγείς οριαχές συνθήχες στα όρια εξόδου του χωρίου ολοχλήρωσης προχύπτουν επιβάλλοντας τον μηδενισμό των όρων

$$-\rho_{\Delta}qv_{i}n_{i} - \mu_{\Delta}u_{i}\varepsilon_{ij}n_{j} + \phi v_{i}n_{i} + D\frac{\partial\phi}{\partial x_{j}}n_{j} + \frac{\partial F_{S_{O,j}}}{\partial\alpha}n_{S_{O,j}} = 0 \qquad (4.44)$$

$$-\rho q n_i + \rho u_i v_j n_j + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_{O,j}}}{\partial v_i} n_{S_{O,j}} = 0$$
(4.45)

Από την εξ. 4.44 προχύπτει η τιμή της συζυγούς μεταβλητής ϕ στα όρια εξόδου της ροής. Πολλαπλασιάζοντας την εξ. 4.45 με το μοναδιαίο χάθετο n_i και το μοναδιαίο εφαπτομενικό t_i διάνυσμα, ως προς την επιφάνεια εξόδου, προχύπτει η τιμή της συζυγούς πίεσης q και συζυγούς ταχύτητας u_i στις επιφάνειες εξόδου του αναμίκτη

$$q = u_{\langle n \rangle} v_{\langle n \rangle} + 2\nu \frac{\partial u_{\langle n \rangle}}{\partial n} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{S_{O,k}}}{\partial v_i} n_{S_{O,k}} n_i$$
(4.46)

$$v_{\langle n \rangle} u_{\langle t \rangle} + \nu \left(\frac{\partial u_{\langle t \rangle}}{\partial n} + \frac{\partial u_{\langle n \rangle}}{\partial t} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{S_{O,k}}}{\partial v_i} n_{S_{O,k}} t_i = 0$$
(4.47)

όπου $u_{\langle n \rangle} = u_i n_i, \ u_{\langle t \rangle} = u_i t_i$ η κάθετη και εφαπτομενική συνιστώσα της συζυγούς ταχύτητας στην επιφάνεια εξόδου, αντίστοιχα.

4.5.3 Στερεά τοιχώματα S_W

Με σχοπό την απαλοιφή του πρώτου, τρίτου χαι τέταρτου επιφανειαχού ολοχληρώματος της εξ. 4.40 προχύπτουν οι συζυγείς οριαχές συνθήχες στο στερεό σύνορο του

αναμίκτη, οι οποίες έχουν τη μορφή

$$D\frac{\partial\phi}{\partial x_{i}}n_{j} = -\frac{\partial F_{S_{W}}}{\partial\alpha}n_{S_{W}}$$

$$(4.48)$$

$$u_i n_i = u_{\langle n \rangle} = -\frac{\partial F_{S_W}}{\partial p} n_{S_W} \tag{4.49}$$

$$u_{\langle t\rangle}^I = u_{\langle t\rangle}^{II} = 0 \tag{4.50}$$

Επειδή οι συναρτήσεις στόχου ομοιομορφίας του μείγματος στην έξοδο και απώλειας ολικών πιέσεων, οι οποίες χρησιμοποιούνται στην εργασία αυτή (ενότητα 3.2), δεν υπολογίζονται στα στερεά τοιχώματα, ισχύει ότι

$$\frac{\partial F_{S_W}}{\partial \alpha} = \frac{\partial F_{S_W}}{\partial p} = 0 \tag{4.51}$$

Έτσι, τελικά, επιβάλλεται μηδενική συνθήκη Neumann για τη συζυγή μεταβλητή ϕ και μηδενική συνθήκη Dirichlet για τη συζυγή ταχύτητα u_i στο στερεό σύνορο. Ακόμα, για τη συζυγή πίεση επιβάλλεται μηδενική συνθήκη Neumann, $\frac{\partial q}{\partial x_j}n_j = 0$.

4.6 Παράγωγοι Ευαισθησίας

Οι εναπομείναντες όροι στην εξ. 4.40, μετά την ικανοποίηση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων και των συζυγών οριακών συνθηκών, σχηματίζουν την παράγωγο ευαισθησίας

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \int_{S_W} \left(-\rho q n_i + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial b_n} dS
- \int_{S_W} \phi D \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j dS + \int_S \left(q R^p + u_i R_i^v + \phi R^\alpha \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS$$
(4.52)

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 3.1, στα στερεά τοιχώματα του αναμίκτη η ταχύτητα λαμβάνει μηδενική τιμή, λόγω της συνθήκης μη-ολίσθησης. Έτσι, λοιπόν, η ολική παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού στο όριο S_W είναι μηδενική $\frac{\delta v_i}{\delta b_n} = 0$, και η μερική παράγωγος γράφεται, με χρήση της εξ. 4.9, ως εξής

$$\frac{\partial v_i}{\partial b_n} = -\frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} \tag{4.53}$$

Επιπλέον, υπό την παραδοχή ότι η εφαπτομενιχή συνιστώσα του όρου $\frac{\delta x_k}{\delta b_n}$ δεν έχει

σημαντική επιρροή στη μεταβολή της γεωμετρίας του στερεού ορίου, παραλείπεται και διατηρείται μόνο η κάθετη συνιστώσα. Οπότε, προκύπτει

$$\frac{\partial v_i}{\partial b_n} = -\frac{\partial v_i}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k \tag{4.54}$$

Αχολουθεί σύντομη ανάλυση του όρου $\int_{S_W} \phi D \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j dS$, προτού εξαχθεί η τελική έκφραση για την παράγωγο ευαισθησίας του προβλήματος. Κάνοντας χρήση της εξ. 4.9, προκύπτει

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n}$$
(4.55)

και

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} n_j \right) = \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j + \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} \\
= \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j + \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n}$$
(4.56)

Το αριστερό μέλος της εξ. 4.56 μπορεί να αμεληθεί λόγω του ότι επιβάλλεται μηδενική συνθήκη Neumann για το κλάσμα όγκου α στο όριο S_W. Συνεπώς, κάνοντας χρήση της εξ. 4.56, το δεύτερο επιφανειακό ολοκλήρωμα στην εξ. 4.52 γράφεται στη μορφή

$$\int_{S_W} \phi D \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS + \int_{S_W} \phi D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} dS$$

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η ολική παράγωγος της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού γράφεται στη μορφή

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = -\int_{S_W} \left(-\rho q n_i + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS
+ \int_{S_W} \phi D \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS + \int_{S_W} \phi D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} dS
+ \underbrace{\int_{S} (q R^p + u_i R_i^v + \phi R^\alpha) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS}_{\text{Optor Leibniz}}$$
(4.57)

Η παραπάνω έκφραση αποτελεί την Surface-Integral (SI) συζυγή διατύπωση [26], διότι η παράγωγος της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού προκύπτει από τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης. Δεν πρέπει να αμεληθεί η παρουσία του όρου Leibniz στην εξ. 4.57. Στις περισσότερες των περιπτώσεων, ο όρος Leibniz αμελείται υπό τη 'βολική' παραδοχή ότι τα υπόλοιπα των εξισώσεων ροής είναι μηδέν στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης [16, 17, 42]. Στην πραγματικότητα, όμως, η συγκεκριμένη υπόθεση δεν είναι αληθής διότι στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης δεν ικανοποιούνται οι εξισώσεις Navier-Stokes, αλλά οι οριακές τους συνθήκες. Σύμφωνα με την εργασία [39], στην περίπτωση που το υπολογιστικό πλέγμα είναι αρκετά πυκνό η επίδραση του συγκεκριμένου όρου μπορεί πράγματι να θεωρηθεί αμελητέα. Ωστόσο, για λόγους που εξαρτώνται από τη γεωμετρία και την πυκνότητα του πλέγματος, ο όρος Leibniz μπορεί να είναι αρκετά σημαντικός επηρεάζοντας την ακρίβεια υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με την SI συζυγή μέθοδο.

Κεφάλαιο 5

Γένεση του Υπολογιστικού Πλέγματος και Προλέξεις της Ροής

5.1 Γένεση του Υπολογιστικού Πλέγματος

Η διπλωματική εργασία αυτή ασχολείται με τη μελέτη της ροής δύο φάσεων στο εσωτερικό ενός αναμίκτη. Η γεωμετρία της εν λόγω συσκευής έχει ήδη παρουσιαστεί στο κεφ. 2. Προκειμένου να επιλυθούν οι εξισώσεις που διέπουν τη ροή καθώς και οι συζυγείς πεδιακές εξισώσεις στο εσωτερικό του αναμίκτη είναι απαραίτητη η γένεση του υπολογιστικού πλέγματος. Η διαδικασία γένεσης του πλέγματος πραγματοποιηθήκε με το εργαλείο snappyHexMesh του λογισμικού OpenFOAM. Το πλέγμα που δημιουργήθηκε παρουσιάζεται στο σχήμα 5.1 και αποτελείται από περίπου 209.500 κυψέλες-όγκους ελέγχου, μεταξύ των οποίων εξάεδρα, πρισματικά στοιχεία και πολύεδρα. Επίσης, αποτελείται από επιμέρους στρώματα (layers) κοντά στα στερεά τοιχώματα του αναμίκτη και γύρω από τα εμπόδια όπου αναπτύσσονται τα οριακά στρώματα και εμφανίζεται ανακυκλοφορία της ροής.

5.2 Πρόλεξη της Ροής

Αφού δόθηκαν τα βασικά χαρακτηριστικά της γεωμετρίας του προβλήματος, ακολουθεί η επίλυση των εξισώσεων που περιγράφουν τη ροή. Για την πρόλεξη της ροής χρησιμοποιήθηκε το ανοιχτό λογισμικό OpenFOAM, στο οποίο και προγραμματίστηκε ο επιλύτης των εξισώσεων του συζυγούς προβλήματος. Για την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος δύναται να χρησιμοποιηθεί ο επιλύτης twoLiquidMixingFoam. Ωστόσο, ο εν λόγω επιλύτης επιλύει χρονικά μη-μόνιμα προβλήματα. Έτσι, λοιπόν, χρειάστηκε να προγραμματιστεί εκ νέου αυτή τη φορά για την επίλυση χρονικά μόνιμης



(α) Γενική εικόνα του πλέγματος



(β) Λεπτομέρεια γύρω από
 (γ) Επιφανειαχό πλέγμα
 (δ) Λεπτομέρεια στην
 την περιοχή ενός εμποδίου
 ενός εμποδίου
 έξοδο του αναμίχτη

Σχήμα 5.1: Υπολογιστικό πλέγμα στατικού αναμίκτη, παραγμένο από το λογισμικό snappyHexMesh του OpenFOAM

ροής, απαλείφοντας τον χρονικό όρο από τις εξισώσεις Navier-Stokes και την εξίσωση μεταφοράς του κλάσματος όγκου. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι οι επιλύτες των εξισώσεων του πρωτεύοντος και συζυγούς προβλήματος επιδέχονται παραλληλοποίηση σε συστοιχίες CPUs, μειώνοντας έτσι αρκετά το χρόνο που απαιτείται για την αριθμητική επίλυση. Έτσι, λοιπόν, τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτή την ενότητα προέκυψαν από τη χρήση του προγραμματισμένου επιλύτη, ο οποίος εκτελέστηκε σε δεκαέξι πυρήνες επεξεργαστή τύπου Intel Xeon CPU E5-2630 v4 στα 2.2 GHz.

Στον πίνακα 5.1 παρουσιάζονται οι σταθερές τιμές πυκνότητας και συνεκτικότητας των δύο φάσεων. Επίσης, θεωρώντας ομοιόμορφη κατανομή ταχύτητας στις εισόδους του αγωγού μέτρου 0.1m/s προκύπτει η τιμής της παροχής μάζας σε κάθε είσοδο του αναμίκτη. Ο αριθμός Reynolds της ροής μπορεί να εκτιμηθεί, λαμβάνοντας υπόψη τη μέση τιμή των κινηματικών συνεκτικοτήτων των δύο φάσεων, ως εξής

$$Re = \frac{vD}{\nu} \approx 715$$

| | Ρευστό 1 | Ρευστό 2 |
|-----------------------------------------|---------------------|-------------------|
| Πυχνότητα $({ m kg}/m^3)$ | 1500 | 1300 |
| Κινηματική Συνεκτικότητα $(m^2/{ m s})$ | $1.5 \cdot 10^{-5}$ | $1.3\cdot10^{-5}$ |
| Παροχή μάζας στην είσοδο $({ m kg/s})$ | 0.295 | 0.255 |

Πίνακας 5.1: Στατικός αναμίκτης: Ιδιότητες των δύο ρευστών

Τέλος, ο συντελεστής διάχυσης των δύο φάσεων λαμβάνει την τιμή $D = 1.5 \cdot 10^{-8} \frac{m^2}{s}$.

Για τις μελέτες που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή θεωρείται ότι ο αγωγός είναι ευθυγραμμισμένος με τον άξονα x. Οι οριαχές συνθήχες του προβλήματος, σύμφωνα με όσα ειπώθηχαν στην ενότητα 3.1, είναι:

- i) Στην πρώτη είσοδο του αναμίκτη (είσοδος της πρώτης φάσης), η οποία είναι ευθυγραμμισμένη με το κυρίως σώμα του αγωγού
 - ταχύτητα: $\mathbf{v} = (0.1, 0, 0) \frac{m}{s}$
 - πίεση: $\frac{\partial p}{\partial x_i}n_j = 0$
 - κλάσμα όγκου: $\alpha = 1$
- ii) Στην δεύτερη είσοδο του αναμίχτη, όπου εισέρχεται η δεύτερη υγρή φάση
 - ταχύτητα: $\mathbf{v} = (0.0866, -0.05, 0) \frac{m}{s}$
 - πίεση: $\frac{\partial p}{\partial x_i}n_j = 0$
 - κλάσμα όγκου: $\alpha = 0$
- iii) Στην ενιαία έξοδο του αναμίχτη
 - ταχύτητα: $\frac{\partial v_i}{\partial x_i} n_j = 0, i = 1, 2, 3$
 - πίεση: p = 0
 - κλάσμα όγκου: $\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} n_j = 0$
- iv) Στο στερεό τοίχωμα του αναμίκτη
 - ταχύτητα: $v_i = 0, i = 1, 2, 3$
 - πίεση: $\frac{\partial p}{\partial x_i}n_j = 0$
 - κλάσμα όγκου: $\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} n_j = 0$

Για το συζυγές πρόβλημα οι οριαχές συνθήχες προχύπτουν σύμφωνα με όσα αναφέρθηχαν στην ενότητα 4.5. Το συζυγές πρόβλημα επιλύεται τόσο ως προς τη συνάρτηση στόχο F_P (εξ. 4.5), όσο χαι ως προς της συνάρτηση στόχο F_U (εξ. 4.3). Είναι άξιο αναφοράς ότι διαφορετικές συναρτήσεις-στόχοι F οδηγούν σε διαφορετικά συζυγή πεδία, διότι, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 4.5, στις οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος εμφανίζεται η μερική παράγωγος της συνάρτησης-στόχου ως προς τα ροϊκά μεγέθη. Με βάση τα παραπάνω γίνεται η επίλυση των εξισώσεων ροής και προκύπτουν τα πεδία ταχύτητας, πίεσης και κλάσματος όγκου καθώς και η επίλυση των συζυγών εξισώσεων, όπως φαίνεται στα σχήματα 5.5, 5.6, 5.7, αντίστοιχα. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στα παραπάνω σχήματα προέκυψαν μετά από αριθμό επαναλήψεων περίπου ίσο με 1000. Στο σχήμα 5.4 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης των εξισώσεων του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος για τις συναρτήσεις-στόχους F_P και F_U , αντίστοιχα.

Αχόμα, από την επίλυση των εξισώσεων ροής προχύπτουν οι τιμές των συναρτήσεων-



Σχήμα 5.3: Γραμμές ροής στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη χρωματισμένες με την τιμή της ολικής πίεσης

στόχων F_U και F_P , οι οποίες έχουν ήδη παρουσιαστεί στην ενότητα 4.2.

$$F_U = \frac{1}{2} \int_{S_O} v_i n_i \left(\alpha - \overline{\alpha}\right)^2 dS = 1.5697 \cdot 10^{-6} \frac{m^3}{s}$$
$$F_P = -\frac{1}{2} \int_{S_I \cup S_O} v_i n_i \left(p + \frac{1}{2}\rho v_j^2\right) dS = 1.0143 \cdot 10^{-2} Watt$$

Η μέση τιμή του κλάσματος όγκου $\overline{\alpha}$ στην επιφάνεια εξόδου του αναμίκτη (εξ. 4.4), που εμφανίζεται στη συνάρτηση-στόχο F_U , προκύπτει ίση με $\overline{\alpha} = 0.5003$. Είναι εμφανές ότι η παρουσία των εμποδίων στο εσωτερικό του αναμίκτη ευνοεί την ανάμιξη των δύο φάσεων, διότι κατάντι των εμποδίων παρατηρείται ανακυκλοφορία της ροής. Στο σχήμα 5.2 φαίνεται η κατανομή της κλάσματος όγκου α στην έξοδο της αρχικής γεωμετρίας του στατικού αναμίκτη, προτού γίνει η βελτιστοποίηση της μορφής των εμποδίων.



Σχήμα 5.4: Γραμμές ροής στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη χρωματισμένες με (a) την τιμή της στατικής πίεσης, (β) το μέτρο της ταχύτητας, (γ) την τιμή του κλάσματος όγκου



Σχήμα 5.5: Γραμμές ροής στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη, για τη συνάρτηση στόχο F_P , χρωματισμένες με (a) την τιμή της συζυγούς πίεσης, (β) το μέτρο της συζυγούς ταχύτητας, (γ) την τιμή του συζυγούς κλάσματος όγκου



Σχήμα 5.6: Γραμμές ροής στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη, για τη συνάρτηση στόχο F_U , χρωματισμένες με (a) την τιμή της συζυγούς πίεσης, (β) το μέτρο της συζυγούς ταχύτητας, (γ) την τιμή του συζυγούς κλάσματος όγκου



Σχήμα 5.7: Η πορεία σύκλισης των εξισώσεων: (a) του πρωτεύοντος προβλήματος, (β) του συζυγούς προβλήματος για τη συνάρτηση στόχο F_P , (γ) του συζυγούς προβλήματος για τη συνάρτηση στόχο F_U

Κεφάλαιο 6

Περί Ακρίβειας Υπολογισμού των Παραγώγων Ευαισθησίας

6.1 Εισαγωγικά σχόλια

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία [26], υπάρχουν τρεις διατυπώσεις για τη συνεχή συζυγή μέθοδο. Και οι τρεις καταλήγουν στις ίδιες συζυγείς πεδιακές εξισώσεις και συζυγείς οριακές συνθήκες, με διαφορερική, ωστόσο, έκφραση για την ολική παράγωγο της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού \overrightarrow{b} . Η πρώτη συζυγής διατύπωση οδηγεί στην εμφάνιση χωρικών ολοκληρωμάτων σε όλο το χωρίο ολοκλήρωσης που περιλαμβάνουν τις μεταβλητές σχεδιασμού \overrightarrow{b} (grid-sensitivities). Η παραπάνω διατύπωση, η οποία ονομάζεται FI (Field Integral) συζυγής διατύπωση, αυξάνει το υπολογιστικό κόστος της συζυγούς μεθόδου διότι απαιτεί τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας πλέγματος $\frac{\delta \overrightarrow{x}}{\delta \overrightarrow{b}}$ και την ολοκλήρωσή τους σε ολόκληρο το χωρίο ολοκλήρωσης.

Αργότερα, όπως προτείνεται από τους Anderson [40] και Jameson [41], προέκυψαν οι λεγόμενες 'reduced' διατυπώσεις υπολογισμού της κλίσης της συνάρτησης-στόχου, οι οποίες απαιτούν τον υπολογισμό επιφανειακών ολοκληρωμάτων στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης, εξ ου και ονομάζονται SI (Surface Integral) συζυγείς διατυπώσεις. Η παραπάνω διατύπωση είναι αυτή που αναπτύσσεται στο κεφ. 4. Είναι προφανές ότι η SI μέθοδος παρουσιάζει χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος συγκριτικά με την FI μέθοδο, η οποία απαιτεί τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας του πλέγματος $\frac{\delta \vec{x}}{\delta \vec{b}}$. Σε περίπτωση που οι προαναφερθείσες παράγωγοι υπολογίζονται με πεπερασμένες διαφορές γίνεται αντιληπτό ότι το υπολογιστικό κόστος αυξάνει γραμμικά με τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού, διότι απαιτείται η επίλυση 2N εξισώσεων μετατόπισης του πλέγματος (gdPDEs). Στην εργασία [26], αναπτύσσεται η Enhanced-SI (E-SI) συζυγής διατύπωση, η οποία οδηγεί στον υπολογισμό της παραγώγου της συνάρτησης-στόχου με την ακρίβεια της FI συζυγούς διατύπωσης και διατηρεί το χαμηλό υπολογιστικό κόστος της SI μεθόδου. Στην ενότητα αυτή, αναπτύσσεται η FI συζυγής διατύπωση και αποδεικνύεται η ότι η κατά FI έκφραση της παραγώγου ευαισθησίας είναι μαθηματικά ισοδύναμη με την αντίστοιχη κατά SI (εξ. 4.57), υπό την προϋπόθεση πως δεν γίνεται η απαλοιφή του όρου Leibniz. Έπειτα, γίνεται η διατύπωση της E-SI συζυγούς μεθόδου για τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης-στόχου σε προβλήματα διφασικών ροών, με τα οποία ασχολείται η διπλωματική εργασία. Τέλος, υπολογίζονται οι παράγωγοι ευαισθησίας εξάγονται τα σχετικά συμπεράσματα.

6.2 Η FI Συνεχής Συζυγής Μέθοδος

6.2.1 Γενικά περί της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου

Σαν εισαγωγή, είναι σημαντικό να γίνει μια περιγραφή της συζυγούς μεθόδου σε ένα γενικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, στο οποίο τίθεται η ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης κόστους F, ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού b_n , (n = 1, ..., N), υπό τους ισοτικούς περιορισμούς $R_i = 0$, (i = 1, ..., E) όπου E ο αριθμός των εξισώσεων. Σύμφωνα και με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 4.3, ορίζεται η επαυξημένη συνάρτηση L, από την αναλυτική έκφραση της συνάρτησης κόστους F, εάν σε αυτή προστεθούν τα χωρικά ολοκληρώματα των περιορισμών ισότητας πολλαπλασιασμένων με τα αντίστοιχα πεδία των συζυγών μεταβλητών

$$L = F + \int_{\Omega} \Psi_i R_i d\Omega \tag{6.1}$$

όπου Ψ_i είναι οι συζυγείς μεταβλητές του προβλήματος και Ω το χωρίο ολοκλήρωσης. Κατά τα γνωστά, επειδή οι εξισώσεις περιορισμού πρέπει να ικανοποιούνται στο εσωτερικό του χωρίου ολοκλήρωσης ισχύει ότι οι συναρτήσεις L, F έχουν την ίδια τιμή και τις ίδιες παραγώγους.

Η παραγώγιση της εξ. 6.1 ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος b_n δίνει

$$\frac{\delta L}{\delta b_n} = \frac{\delta F}{\delta b_n} + \frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} \Psi_i R_i d\Omega \tag{6.2}$$

Σύμφωνα με την FI συζυγή διατύπωση, η ανάπτυξη του τελευταίου όρου γίνεται ως

εξής

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} \Psi_i R_i d\Omega = \int_{\Omega} \Psi_i \frac{\delta R_i}{\delta b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \Psi_i R_i \frac{\delta \left(d\Omega \right)}{\delta b_n} \tag{6.3}$$

Στην εργασία [41] αποδεικνύεται για την περίπτωση δομημένων πλεγμάτων, και στην συνέχεια γενικεύεται για την περίπτωση μη-δομημένων πλεγμάτων [42], ότι

$$\frac{\delta\left(d\Omega\right)}{\delta b_n} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n}\right) d\Omega \tag{6.4}$$

Για την περαιτέρω ανάπτυξη των χωρικών ολοκληρωμάτων $\int_{\Omega} \Psi_i \frac{\delta R_i}{\delta b_n} d\Omega$, χρησιμοποιείται η σχέση που συνδέει την ολική παράγωγο με τη μερική χωρική μεταβολή μιας οποιασδήποτε ροϊκής ποσότητας Φ

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta \Phi}{\delta b_n} \right) - \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right)$$
(6.5)

Απόδειξη της εξ. 6.5 : Με χρήση της εξ. 4.9, η ολιχή παράγωγος της χλίσης του ροϊχού μεγέθους Φ ως προς το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού \overrightarrow{b} δίνει

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n}$$
(6.6)

Η χωρική μεταβολή της παραγώγου της ροϊκής ποσότητα
ς Φ ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού \overrightarrow{b} είναι

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta \Phi}{\delta b_n} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial b_n} \right) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} + \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right)$$
(6.7)

Αφαιρώντας την εξ. 6.7 από την εξ. 6.6 προκύπτει η εξ. 6.5.

Κάνοντας χρήση του Θεωρήματος Gauss (εξ. 3.13) και της εξ. 6.5, γίνεται η ανάλυση των χωρικών ολοκληρωμάτων της εξ. 6.2 και, αφού μηδενιστούν οι όροι στο εσωτερικό των χωρικών και επιφανειακών ολοκληρωμάτων που περιέχουν τις ολικές μεταβολές των ροϊκών μεγεθών ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού οι οποίοι θα αποτελέσουν τις συζυγείς πεδιακές εξισώσεις και οριακές συνθήκες, αντίστοιχα, προκύπτει η FI συζυγής διατύπωση της παραγώγου ευαισθησίας.

Τέλος, κάνοντας χρήση των εξ. 6.3, 6.4 είναι εύκολο να αποδειχθεί ότι η SI και η FI διατύπωση είναι ισοδύναμες. Είναι

$$\begin{split} \frac{\delta L}{\delta b_n}\Big|_{FI} &= \frac{\delta F}{\delta b_n} + \int_{\Omega} \Psi_i \frac{\delta R_i}{\delta b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \Psi_i R_i \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n}\right) d\Omega \\ &= \frac{\delta F}{\delta b_n} + \int_{\Omega} \Psi_i \frac{\partial R_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \Psi_i \frac{\partial R_i}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \frac{\delta F}{\delta b_n} + \int_{\Omega} \Psi_i \frac{\partial R_i}{\partial b_n} d\Omega + \underbrace{\int_{S} \Psi_i R_i \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS}_{\text{Opos Leibniz}} \\ &- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\Psi_i \frac{\delta x_k}{\delta b_n}\right) R_i d\Omega = \frac{\delta L}{\delta b_n}\Big|_{SI} \end{split}$$

επειδή οι εξισώσεις ροής ικανοποιούνται στο εσωτερικό του χωρίου ολοκλήρωσης $(R_i = 0)$. Είναι προφανές η FI και η SI συζυγής διατύπωση διαφέρουν ως προς τον τρόπο ανάπτυξής τους: η πρώτη αναπτύσσεται ως προς τις ολικές παραγώγους των ροϊκών μεγεθών, και λαμβάνει υπόψη την αλλαγή της γεωμετρίας εξαιτίας της μεταβολής των μεταβλητών σχεδιασμού, ενώ η τελευταία αναπτύσσεται με χρήση των μερικών παραγώγων των ροϊκών μεγεθών, και η μετατόπιση της γεωμετρίας υπεισέρχεται στον όρο Leibniz.

6.2.2 Η FI Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για Διφασικές Ροές

Οι εξισώσεις Navier-Stokes για στρωτές, ασυμπίεστες, μόνιμες ροές όπου συνυπάρχουν δύο αναμίξιμες υγρές φάσεις εντός του χωρίου ολοκλήρωσης παρουσιάζονται στην ενότητα 3.1. Αυτές γράφονται στη μορφή $R^p = 0, R^v_i = 0, R^\alpha = 0$, όπου

$$R^p = -\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i}$$

$$R_{i}^{v} = \rho v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{j}} + \frac{\partial p}{\partial x_{i}}, i = 1, 2(, 3)$$
$$R^{\alpha} = v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right)$$

όπου

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$$

είναι ο τανυστής των παραμορφώσεων, σύμφωνα και με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 3.1.

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, ορίζεται η επαυξημένη συνάρτηση (εξ. 4.8), της

οποίας η παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού δίνει

$$\frac{\delta L}{\delta b_{n}} = \frac{\delta F}{\delta b_{n}} + \int_{\Omega} q \frac{\delta R^{p}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} u_{i} \frac{\delta R^{v}_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \phi \frac{\delta R^{\alpha}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta (d\Omega)}{\delta b_{n}} = \frac{\delta F}{\delta b_{n}} + \underbrace{\int_{\Omega} q \frac{\delta R^{p}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{10 \text{ xweixo oloch/fpeuma}} + \underbrace{\int_{\Omega} u_{i} \frac{\delta R^{v}_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{20 \text{ xweixo oloch/fpeuma}} + \int_{\Omega} (6.8)$$

$$\underbrace{\int_{\Omega} \phi \frac{\delta R^{\alpha}}{\delta b_{n}} d\Omega}_{30 \text{ xweixo oloch/fpeuma}} + \int_{\Omega} (q R^{p} + u_{i} R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega$$

Επειδή οι εξισώσεις ροής ικανοποιούνται στο εσωτερικό του χωρίου ολοκλήρωσης, ο τελευταίος όρος στο δεξί μέλος της εξ. 6.8 μηδενίζεται.

Ανάλυση 1ου χωρικού ολοκληρώματος

Κάνοντας χρήση του Θεωρήματος Gauss και των εξ. 6.4, 6.5, η ανάλυση του όρου $\int_\Omega q \frac{\delta R^p}{\delta b_n} d\Omega$ δίνει

$$\int_{\Omega} q \frac{\delta R^{p}}{\delta b_{n}} d\Omega = -\int_{\Omega} q \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(\frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{i}}\right) d\Omega \\
= -\int_{\Omega} q \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta(\rho v_{i})}{\delta b_{n}}\right) d\Omega + \int_{\Omega} q \frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{k}} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}}\right) d\Omega \\
= -\int_{S} q n_{i} \frac{\delta(\rho v_{i})}{\delta b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\delta(\rho v_{i})}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{S} q \frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{k}} n_{i} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS \\
- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(q \frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{k}}\right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega \\
= -\int_{S} \rho q n_{i} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} dS - \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} dS + \int_{\Omega} \rho \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega \\
+ \int_{\Omega} \rho_{\Delta} v_{i} \frac{\partial q}{\partial x_{i}} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{S} \rho q n_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS \\
+ \int_{S} \rho_{\Delta} q v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(q \frac{\partial(\rho v_{i})}{\partial x_{k}}\right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega \tag{6.9}$$

Ανάλυση 2ου χωρικού ολοκληρώματος

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, ο όρος $\int_\Omega u_i \frac{\delta R_i^v}{\delta b_n} d\Omega$ αναλύεται ως εξής

$$\begin{split} \int_{\Omega} u_i \frac{\delta R_i^v}{\delta b_n} d\Omega &= \int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) d\Omega \\ &= \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} + \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega}_{\text{`Opoc metagords}} -$$

Ως μαθηματική διατύπωση του όρου $\int_{\Omega} u_i \frac{\partial R_i^v}{\partial b_n} d\Omega$, τα τρία ολοκληρώματα στο δεξί μέλος της εξ. 6.10 αναλύονται το καθένα ξεχωριστά παρακάτω.

Το χωρικό ολοκλήρωμα του όρου μεταφοράς αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \rho_\Delta u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\delta v_j}{\delta b_n} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_i v_j \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega$$

$$(6.11)$$

Στο δεύτερο ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξ. 6.11 επιτρέπεται η εναλλαγή της σειράς των δεικτών i, j χωρίς να επηρεάζεται η ορθότητα των υπολογισμών. Επίσης, η περαιτέρω ανάπτυξη του τρίτου ολοκληρώματος γίνεται με χρήση της εξ. 6.5. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(\rho v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \rho_{\Delta} u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega
+ \int_{\Omega} \rho v_{j} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \rho v_{j} u_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega
= \int_{\Omega} \rho_{\Delta} u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \rho u_{j} \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega
+ \int_{S} \rho u_{i} v_{j} n_{j} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho v_{j} u_{i})}{\partial x_{j}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega
- \int_{S} \rho u_{i} v_{j} n_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho v_{j} u_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega$$
(6.12)

Κάνοντας χρήση της εξ. 6.5, η ανάλυση του όρου πίεσης στην εξ. 6.11 δίνει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(\frac{\partial p}{\partial x_{i}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta p}{\delta b_{n}} \right) d\Omega - \int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega \\
= \int_{S} u_{i} n_{i} \frac{\delta p}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{i}} \frac{\delta p}{\delta b_{n}} d\Omega \\
- \int_{S} u_{i} n_{i} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(u_{i} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega$$
(6.13)

Το χωρικό ολοκλήρωμα του όρου διάχυσης αναλύεται ως εξής

$$\int_{\Omega} u_i \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_j} \right) d\Omega = \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta(\mu \varepsilon_{ij})}{\delta b_n} \right) d\Omega}_{\text{T1}} - \underbrace{\int_{\Omega} u_i \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) d\Omega}_{\text{T2}}$$
(6.14)

Η ανάλυση του όρου (Τ1) δίνει

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\delta(\mu \varepsilon_{ij})}{\delta b_{n}} \right) d\Omega = \int_{S} u_{i} n_{j} \frac{\delta(\mu \varepsilon_{ij})}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\delta(\mu \varepsilon_{ij})}{\delta b_{n}} d\Omega
= \int_{S} \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} n_{j} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} + \int_{S} \mu u_{i} n_{j} \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_{n}} dS
- \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_{n}} d\Omega$$
(6.15)

Στο τελευταίο ολοκλήρωμα της εξ. 6.15 ο τανυστής των παραμορφώσεων ε_{ij} αντικαθίσταται από τη σχέση 3.3 προκειμένου, τελικά, ο όρος (T1) να περιλαμβάνει εντός των χωρικών ολοκληρωμάτων τις παραγώγους μόνο των ροϊκών μεγεθών (πίεση p, ταχύτητα v_i , κλάσμα όγκου α) ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Επίσης, γίνεται εναλλαγή της σειράς των δεικτών i,jόπου κρίνεται απαραίτητο. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει

$$\begin{split} \int_{\Omega} u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta(\mu \varepsilon_{ij})}{\delta b_n} \right) d\Omega &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega \\ &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\delta \delta_{b_n}}{\delta b_n} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) d\Omega \\ &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{S} \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\delta \omega_i}{\delta \delta m_j} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \int_{S} \mu_{\Delta} u_i \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\delta x_j} \frac{\delta \omega}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \mu_{\Delta} \frac{\delta \omega_i}{\delta b_n} \varepsilon_{ij} \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &\quad - \int_{S} \mu \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \omega_i}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\delta x_j} \frac{\delta \omega_i}{\delta b_n} dS - \int_{\Omega} \frac{\delta \omega_i}{\delta b_n} dS \\ &\quad - \int_{S} \mu \varepsilon_{ij} n_j \frac{\delta \omega_i}{\delta b$$

όπου

$$\varepsilon_{ij}^{\alpha} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

είναι ο τανυστής των συζυγών παραμορφώσεων.

Ο όρος (T2) στην εξ. 6.14 αναλύεται χάνοντας χρήση του Θεωρήματος Gauss (εξ.
3.13) ως εξής

$$\int_{\Omega} u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega = \int_{S} u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} n_{j} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega
= \int_{S} \mu_{\Delta} u_{i} \varepsilon_{ij} n_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS + \int_{S} \mu u_{i} n_{j} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS
- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega$$
(6.17)

Ανάλυση 3ου χωρικού ολοκληρώματος

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η ανάλυση του όρου $\int_\Omega \phi \frac{\delta R^\alpha}{\delta b_n} d\Omega$ δίνει

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\delta R^{\alpha}}{\delta b_{n}} d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right) \right) d\Omega$$
$$= \underbrace{\int_{\Omega} \phi \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega}_{\mathrm{T3}} - \underbrace{\int_{\Omega} \phi \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \right) \right) d\Omega}_{\mathrm{T4}}$$
(6.18)

Ο όρος (T3) αναλύεται με χρήση της εξ. 6.5. Έτσι, προχύπτει

$$\int_{\Omega} \phi \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \phi v_{i} \frac{\delta}{\delta b_{n}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \right) d\Omega \\
= \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{\Omega} \phi v_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} \right) d\Omega \\
- \int_{\Omega} \phi v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} \right) d\Omega \\
= \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{i}} \frac{\delta v_{i}}{\delta b_{n}} d\Omega + \int_{S} \phi v_{i} n_{i} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} dS - \int_{\Omega} \frac{\partial (v_{i}\phi)}{\partial x_{i}} \frac{\delta \alpha}{\delta b_{n}} d\Omega \\
- \int_{S} \phi v_{i} n_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\phi v_{i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} \right) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega \tag{6.19}$$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 3.1, ο συντελεστής διάχυσης D λαμβάνει σταθερή τιμή εντός του χωρίου ολοκλήρωσης. Η τιμή αυτή εξαρτάται από τις ιδιότητες των εμπλεκόμενων φάσεων. Συνεπώς, η χωρική παράγωγος $\frac{\partial D}{\partial x_i}$ και η παράγωγος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού $\frac{\partial D}{\partial b_n}$ είναι μηδενικές. Σύμφωνα με την εξ. 4.9, η ολική μεταβολή του συντελεστή διάχυσης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού είναι επίσης

μηδενική. Η ανάλυση του όρου (Τ4) δίνει

$$\begin{split} \int_{\Omega} \phi \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) \right) d\Omega &= \int_{\Omega} D\phi \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) d\Omega \\ &= \int_{S} D\phi \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j dS - \int_{\Omega} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \int_{S} D\phi \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) n_j dS - \int_{\Omega} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta \alpha}{\delta b_n} \right) d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j \partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right) d\Omega - \int_{S} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &= \int_{S} D\phi \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} n_j \right) dS - \int_{S} D\phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} dS \\ &+ \int_{\Omega} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\ &+ \int_{S} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \frac{\partial \alpha}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &+ \int_{S} D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &- \int_{S} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \left(D \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k} \right) \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k \partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_{\Omega} D\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k \partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta$$

6.2.3 Οι Παράγωγοι Ευαισθησίας

Αντικαθιστώντας τους όρους των εξ. 6.9, 6.12, 6.13, 6.16, 6.17, 6.19, 6.20 στην εξ. 6.8 προκύπτει η ολική παράγωγος της επαυξημένης συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές

σχεδιασμού του προβλήματος, η οποία έχει τη μορφή

$$\frac{\delta L}{\delta b_n} = \int_{\Omega} \left(\rho u_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial (\rho v_j u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij}^{\alpha})}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial q}{\partial x_i} + \varphi \frac{\partial q}{\partial x_i} \right) \frac{\delta v_i}{\delta b_n} d\Omega + \\
\int_{\Omega} \left(-\frac{\partial (v_i \phi)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + \rho_\Delta \left(v_i \frac{\partial q}{\partial x_i} + u_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \mu_\Delta \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \varepsilon_{ij} \right) \frac{\delta \alpha}{\delta b_n} d\Omega \\
- \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\delta p}{\delta b_n} d\Omega + \int_S \left(u_i n_i + \frac{\partial F_S_i}{\partial p} n_i \right) \frac{\delta p}{\delta b_n} dS \\
+ \int_S \left(-\rho_\Delta q v_i n_i - \mu_\Delta u_i \varepsilon_{ij} n_j + \phi v_i n_i + D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} n_j \right) \frac{\delta v_i}{\delta b_n} dS \\
+ \int_S \left(-\rho q n_i + \rho u_i v_j n_j + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_i}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\delta v_i}{\delta b_n} dS \\
- \int_S \mu u_i n_j \frac{\delta \varepsilon_{ij}}{\delta b_n} dS - \int_S \phi D \frac{\delta}{\delta b_n} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_j} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\delta v_i} \deltaS \\
- \int_S \left(-\rho q n_i + \rho u_i v_j n_j + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS \\
- \int_S \left(-\rho q n_i + \rho u_i v_j n_j + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS \\
- \int_S \left(u_i n_i + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial p} n_j \right) \frac{\partial p}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS + \int_S \mu u_i n_j \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS \\
- \int_\Omega \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ q \frac{\partial (\rho v_j)}{\partial x_k} - \rho v_j u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - u_j \frac{\partial p}{\partial x_k} + u_i \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_k} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\delta v_i}{\delta b_n} dS \\
- \int_\Omega \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \left\{ q \frac{\partial \rho v_j}{\partial x_k} - \rho v_j u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - u_j \frac{\partial p}{\partial x_k} \right\} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega$$
(6.21)

Στην εξ. 6.21 η ολιχή μεταβολή της επαυξημένης συνάρτησης έχει εκφραστεί συναρτήσει των ολιχών μεταβολών των ροϊχών μεγεθών $\frac{\delta \mathbf{U}}{\delta b_n}$, όπου $\mathbf{U} = [p, v_i, \alpha]$, τόσο στο εσωτεριχό όσο χαι στα όρια του χωρίου ολοχλήρωσης. Επιβάλλοντας τον μηδενισμό των όρων στο εσωτεριχό των χωριχών ολοχληρωμάτων προχύπτουν οι συζυγείς πεδιαχές εξισώσεις, ενώ από τον μηδενισμό των όρων στο εσωτεριχό των επιφανειαχών ολοχληρωμάτων αποχτούν μορφή οι οριαχές συνθήχες του συζυγούς προβλήματος. Είναι άξιο αναφοράς το γεγονός ότι χαι οι μεν χαι οι δε έχουν την ίδια μορφή με αυτήν που περιγράφεται στις ενότητες 4.4 χαι 4.5, αντίστοιχα. Αυτό είναι αναμενόμενο διότι, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 6.1, όλες οι συζυγές διατυπώσεις οδηγούν στις ίδιες συζυγείς πεδιαχές εξισώσεις χαι οριαχές συνθήχες.

Οι εναπομείναντες όροι στην εξ. 6.21, μετά την ικανοποίηση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων και οριακών συνθηκών, αποτελούν την κατά FI συζυγή διατύπωση παράγω-

γο ευαισθησίας

$$\frac{\delta L}{\delta b_n}\Big|_{FI} = -\int_{S_W} \left(-\rho q n_i + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS
+ \int_{S_W} D\phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} dS + \int_{S_W} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS
- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ q \frac{\partial (\rho v_j)}{\partial x_k} - \rho v_j u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - u_j \frac{\partial p}{\partial x_k} + u_i \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_k} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right.
\left. - \phi v_j \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} - D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} + D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \right\} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega$$
(6.22)

Εφόσον στα όρια εισόδου και εξόδου του χωρίου ολοκλήρωσης οι αλλαγές στις μεταβλητές σχεδιασμού δεν οδηγούν σε μεταβολή της γεωμετρίας $\frac{\delta x_k}{\delta b_n} = \frac{\delta n_j}{\delta b_n} = 0$, τα επιφανειακά ολοκληρώματα που εμφανίζονται στην εξ. 6.22 υπολογίζονται πάνω στα στερεά τοιχώματα του χωρίου ολοκλήρωσης.

6.3 Η Enhanced-SI (E-SI) Συζυγής Διατύπωση

Σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην υποενότητα 6.2.1, οι SI και FI συζυγείς διατυπώσεις είναι μαθηματικά ισοδύναμες. Εφόσον και οι δύο οδηγούν στις ίδιες συζυγείς πεδιακές εξισώσεις και οριακές συνθήκες, αρκεί να γίνει η σύγκριση των όρων που εμφανίζονται στις παραγώγους ευαισθησίας, δεδομένου ότι πρέπει να ισχύει

$$\frac{\delta L}{\delta b_n}\Big|_{SI} = \frac{\delta L}{\delta b_n}\Big|_{FI}$$

Συγκρίνοντας τους όρους που εμφανίζονται στις εξ. 4.57 και 6.22, και απαλείφοντας τους κοινούς όρους, είναι φανερό ότι ο όρος Leibniz είναι ισοδύναμος με το χωρικό ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξ. 6.22

$$\int_{S} (qR^{p} + u_{i}R^{v}_{i} + \phi R^{\alpha}) \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \rho v_{j} u_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} + u_{j} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} - u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} - q \frac{\partial(\rho v_{j})}{\partial x_{k}} \right. \\ \left. + \mu \varepsilon^{\alpha}_{ij} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} + \phi v_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} + D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} - D \phi \frac{\partial^{2} \alpha}{\partial x_{k} \partial x_{j}} \right\} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega$$

$$(6.23)$$

Επίσης, είναι άξιο αναφοράς το γεγονός ότι ο όρος Leibniz είναι δύσκολο να υπολογιστεί αριθμητικά. Για την ακρίβεια, παρουσιάζει αρκετή δυσκολία ο υπολογισμός των υπολοίπων των εξισώσεων ροής πάνω στο όριο του χωρίου ολοκλήρωσης. Λ.χ., ο υπολογισμός του υπολοίπου της εξίσωσης της ορμής R_i^v πάνω στο στερεό σύνορο απαιτεί τον υπολογισμό των δεύτερων χωρικών παραγώγων. Σε μη-δομημένα πλέγματα η ακρίβεια υπολογισμού δεύτερων χωρικών παραγώγων επί του ορίου εισάγει ανακρίβειες. Στην εργασία [26] γίνεται εκτενής ανάλυση των λόγων που καθιστούν τον υπολογισμό του όρου Leibniz αριθμητικά δύσκολο.

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, εφόσον ο υπολογισμός του όρου Leibniz παρουσιάζει σχετική δυσκολία θα μπορούσε στη θέση του να υπολογιστεί το χωρικό ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξ. 6.23, καθώς οι δύο όροι είναι ισοδύναμοι. Ο προαναφερθείς όρος, ο οποίος στη βιβλιογραφία [26] ονομάζεται VTerm, αντικαθιστά τον όρο Leibniz.

$$VTerm = -\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ q \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_k} - \rho v_j u_i \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - u_j \frac{\partial p}{\partial x_k} + u_i \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_k} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \phi v_j \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} - D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} + D \phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \right\} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} d\Omega$$
(6.24)

Ωστόσο, ο υπολογισμός του όρου VTerm αντί του όρου Leibniz, προχειμένου να γεφυρωθεί το χάσμα υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας μεταξύ της SI και FI μεθόδου, αυξάνει σημαντικά το υπολογιστικό κόστος. Γίνεται αντιληπτό ότι η παρουσία των μεταβολών των συντεταγμένων των σημείων του πλέγματος ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού $\frac{\delta x_k}{\delta b_n}$, επιβάλλει την επίλυση 2N εξισώσεων μετατόπισης του πλέγματος (gdPDEs). Για παράδειγμα, στην περίπτωση που οι ενδιαφερόμενες μεταβολές υπολογιστούν με ένα σχήμα Πεπερασμένων Διαφορών, κάθε μεταβλητή σχεδιασμού του προβλήματος πρέπει να μεταβληθεί κατά ± ϵ , όπου ϵ μια θετική ποσότητα πολύ μικρής τιμής. Κάθε μεταβολή στην τιμή μιας εκ των μεταβλητών σχεδιασμού οδηγεί σε μεταβολή της γεωμετρίας του στερεού συνόρου, η οποία διαδίδεται στο εσωτερικό του χωρίου ολοκλήρωσης μέσω της επίλυσης μιας, ελλειπτικής συνήθως, μδε. Οι οριακές συνθήκες της τελευταίας είναι οι παραμορφώσεις του στερεού συνόρου, ενώ στα υπόλοιπα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης επιβάλλονται μηδενικές συνθήκες Dirichlet για τις μετατοπίσεις των σημείων του πλέγματος.

Βασική αρχή της E-SI συζυγούς μεθόδου είναι να αποφευχθεί ο υπολογισμός των παραγώγων $\frac{\delta x_k}{\delta b_n}$ στο εσωτερικό του πεδίου, δεδομένου ότι, όπως έγινε αντιληπτό, ο υπολογισμός τους παρουσιάζει αυξημένο υπολογιστικό κόστος. Στο σημείο αυτό γίνεται η υπόθεση ότι οι παραπάνω παράγωγοι υπολογίζονται από την επίλυση μιας μδε τύπου Laplace, η οποία έχει τη μορφή

$$R_i^m = \frac{\partial^2 m_i}{\partial x_i^2} = 0 \tag{6.25}$$

όπου m_i είναι η μετατόπιση των καρτεσιανών συντεταγμένων των σημείων του πλέγματος. Το μέγεθος m_i αποτελεί συνάρτηση των συντεταγμένων των σημείων του πλέγματος x_k αλλά και των μεταβλητών σχεδιασμού του προβλήματος, γιατί αυτές καθορίζουν τις οριακές συνθήκες της εξ. 6.25.

Η συνάρτηση L (εξ. 4.8) επαυξάνεται με το χωρικό ολοκλήρωμα σε όλο το χωρίο ολοκλήρωσης του υπολοίπου της εξ. 6.25 πολλαπλασιασμένο με την αντίστοιχη συζυγή μεταβλητή. Έτσι, λοιπόν, προκύπτει

$$L = F + \int_{\Omega} q R^{p} d\Omega + \int_{\Omega} u_{i} R^{v}_{i} d\Omega + \int_{\Omega} \phi R^{\alpha} + \int_{\Omega} m^{\alpha}_{i} R^{m}_{i} d\Omega$$
(6.26)

όπου m_i^{α} είναι η συζυγής ποσότητα για το m_i . Η παραγώγιση της συνάρτησης L ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος δίνει

$$\frac{\delta L}{\delta b_n} = \frac{\delta F}{\delta b_n} + \frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} q R^p d\Omega + \frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} u_i R^v_i d\Omega + \frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} \phi R^\alpha d\Omega + \frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} m^\alpha_i R^m_i d\Omega$$
(6.27)

Η ανάλυση των όρων $\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} q R^p d\Omega$, $\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} u_i R_i^v d\Omega$, $\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} \phi R^\alpha d\Omega$ στο δεξί μέλος της εξ. 6.27 έχει ήδη παρουσιαστεί στην ενότητα 4.3 με την SI συζυγή διατύπωση καθώς και στην υποενότητα 6.2.2 με την FI συζυγή διατύπωση. Η ανάλυση του τελευταίου όρου στο δεξί μέλος της εξ. 6.27 γίνεται με χρήση του θεωρήματος ολοκλήρωσης

Leibniz ($\varepsilon\xi$. 4.12) ως $\varepsilon\xi\eta\varsigma$

$$\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} m_i^{\alpha} R_i^m d\Omega = \int_{\Omega} m_i^{\alpha} \frac{\partial R_i^m}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{\Omega} m_i^{\alpha} \frac{\partial}{\partial b_n} \left(\frac{\partial^2 m_i}{\partial x_j^2} \right) d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{\Omega} m_i^{\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \left(\frac{\partial m_i}{\partial b_n} \right) d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{S} m_i^{\alpha} n_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial m_i}{\partial b_n} \right) dS - \int_{\Omega} \frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial m_i}{\partial b_n} \right) d\Omega \\
+ \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \tag{6.28} \\
= \int_{S} m_i^{\alpha} n_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial m_i}{\partial b_n} \right) dS - \int_{S} \frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial x_j} n_j \frac{\partial m_i}{\partial b_n} dS \\
+ \int_{\Omega} \frac{\partial^2 m_i^{\alpha}}{\partial x_j^2} \frac{\partial m_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{S} m_i^{\alpha} n_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_i}{\delta b_n} \right) dS - \int_{S} \frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_i}{\delta b_n} dS \\
+ \int_{\Omega} \frac{\partial^2 m_i^{\alpha}}{\partial x_j^2} \frac{\partial m_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{S} m_i^{\alpha} n_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_i}{\delta b_n} \right) dS - \int_{S} \frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_i}{\delta b_n} dS \\
+ \int_{\Omega} \frac{\partial^2 m_i^{\alpha}}{\partial x_j^2} \frac{\partial m_i}{\partial b_n} d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS \\
= \int_{S} m_i^{\alpha} n_j \frac{\partial x_j}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_i}{\delta b_n} \right) dS - \int_{S} \frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_i}{\delta b_n} dS \\
+ \int_{\Omega} \frac{\partial^2 m_i^{\alpha}}{\partial x_j^2} \frac{\delta x_i}{\delta b_n} d\Omega + \int_{S} m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS$$

Στο τελευταίο βήμα της ανάλυσης του όρου $\frac{\delta}{\delta b_n} \int_{\Omega} m_i^{\alpha} R_i^m d\Omega$ χρησιμοποιείται η σχέση που συνδέει τη μεριχή παράγωγο της ποσότητας m_i ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με τις παραγώγους ευαισθησίας των χόμβων του πλέγματος

$$\frac{\delta x_i}{\delta b_n} = \frac{\partial m_i}{\partial b_n} \tag{6.29}$$

Από την εξ. 6.28 γίνεται αντιληπτό ότι η ολική παράγωγος του όρου $\int_{\Omega} m_i^{\alpha} R_i^m d\Omega$ ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού δεν εξαρτάται των ολικών μεταβολών των ροϊκών μεγεθών. Συνεπώς, οι συζυγείς πεδιακές εξισώσεις και οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος παραμένουν οι ίδιες. Προσθέτοντας τους όρους της εξ. 6.28 στην

παράγωγο ευαισθησίας (εξ. 6.22) προκύπτει

$$\frac{\delta L}{\delta b_{n}} = -\int_{S_{W}} \left(-\rho q n_{i} + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_{j} + \frac{\partial F_{S_{j}}}{\partial v_{i}} n_{j} \right) \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} dS
+ \int_{S_{W}} D\phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_{j}} \frac{\delta n_{j}}{\delta b_{n}} dS + \int_{S_{W}} D\phi \frac{\partial^{2} \alpha}{\partial x_{k} \partial x_{j}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{j} dS
+ \int_{S} m_{i}^{\alpha} n_{j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\delta x_{i}}{\delta b_{n}} \right) dS - \int_{S} \frac{\partial m_{i}^{\alpha}}{\partial x_{j}} n_{j} \frac{\delta x_{i}}{\delta b_{n}} dS
+ \int_{S} m_{i}^{\alpha} R_{i}^{m} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} n_{k} dS + \int_{\Omega} \frac{\partial^{2} m_{k}^{\alpha}}{\partial x_{j}^{2}} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega
- \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ q \frac{\partial (\rho v_{j})}{\partial x_{k}} - \rho v_{j} u_{i} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} - u_{j} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} + u_{i} \frac{\partial (\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}}
- \phi v_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} - D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} + D\phi \frac{\partial^{2} \alpha}{\partial x_{k} \partial x_{j}} \right\} \frac{\delta x_{k}}{\delta b_{n}} d\Omega$$
(6.30)

Δεδομένου ότι, σύμφωνα με την E-SI συζυγή διατύπωση, οι μεταβολές των συντεταγμένων των εσωτεριχών χόμβων του πλέγματος (grid-sensitivities) δεν είναι επιθυμητό να υπολογιστούν, επιβάλλεται ο μηδενισμός των όρων στο εσωτεριχό των χωριχών ολοχληρωμάτων που τις περιέχουν. Έτσι, προχύπτει η συζυγής εξίσωση μετατόπισης του πλέγματος (adjoint mesh movement equation), η οποία έχει τη μορφή

$$R_{k}^{m^{\alpha}} = \frac{\partial^{2}m_{k}^{\alpha}}{\partial x_{j}^{2}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ q \frac{\partial(\rho v_{j})}{\partial x_{k}} - \rho u_{i} v_{j} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} - u_{j} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} + u_{i} \frac{\partial(\mu \varepsilon_{ij})}{\partial x_{k}} - \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} \frac{\partial v_{i}}{\partial x_{k}} - \rho v_{j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} - D \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \frac{\partial \alpha}{\partial x_{k}} + D \phi \frac{\partial^{2} \alpha}{\partial x_{k} \partial x_{j}} \right\} = 0$$

$$(6.31)$$

Επιβάλλοντας τον μηδενισμό των συντελεστών του όρου $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right)$ στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης, προκύπτουν οι οριακές συνθήκες για τη συζυγή μεταβλητή m_i^{α} . Εφόσον το μόνο ολοκλήρωμα που περιέχει τον όρο $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\delta x_k}{\delta b_n} \right)$ είναι το πρώτο ολοκλήρωμα στην εξ. 6.28 έχουμε ότι

$$m_k^{\alpha} = 0 \tag{6.32}$$

σε όλο το όριο του χωρίου ολοκλήρωσης. Συνεπώς, ο όρος $\int_S m_i^{\alpha} R_i^m \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS$ απαλείφεται και οι εναπομείναντες όροι στην εξ. 6.30 αποτελούν την E-SI διατύπωση των παραγώγων ευαισθησίας

$$\frac{\delta L}{\delta b_n} = -\int_{S_W} \left(-\rho q n_i + \mu \varepsilon_{ij}^{\alpha} n_j + \frac{\partial F_{S_j}}{\partial v_i} n_j \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_k dS
+ \int_{S_W} D\phi \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \frac{\delta n_j}{\delta b_n} dS + \int_{S_W} D\phi \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\delta x_k}{\delta b_n} n_j dS
- \int_{S_W} \frac{\partial m_k^{\alpha}}{\partial x_j} n_j \frac{\delta x_k}{\delta b_n} dS$$
(6.33)

Το πρόσθετο υπολογιστικό κόστος υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με χρήση της εξ. 6.33, αντί της εξ. 4.57, έγκειται στην επίλυση της συζυγούς εξίσωσης παραμόρφωσης του πλέγματος (εξ. 6.31). Η τελευταία επιλύεται απεμπλεγμένα, μετά δηλαδή την επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος και συζυγούς προβλήματος, διότι η ποσότητα m_i^{α} δεν συνεισφέρει στις συζυγείς πεδιακές εξισώσεις. Επίσης, είναι άξιο αναφοράς ότι το υπολογιστικό κόστος επίλυσης της εξ. 6.31 είναι αμελητέο συγκριτικά με την επίλυση των εξισώσεων ροής και την επίλυση των συζυγών πεδιακών εξισώσεων. Επομένως, είναι προφανές ότι η Ε-SI συζυγής διατύπωση επιτυγχάνει τα δύο προτερήματα της SI μεθόδου: ανεξαρτησία υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας από το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού του προβλήματος και ο υπολογισμός τους βασίζεται σε επιφανειακά ολοκληρώματα στα όρια του χωρίου ολοκλήρωσης.

6.4 Πιστοποίηση Υπολογισμού Παραγώγων Ευαισθησίας με τις Συζυγείς Μεθόδους

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα αποτελέσματα υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας σε μια 2Δ γεωμετρία ενός αγωγού με δύο εισόδους, από όπου εισέρχονται δύο φάσεις με διαφορετικές ιδιότητες, και ενιαία έξοδο, από όπου εξέρχεται το μείγμα. Το υπολογιστικό πλέγμα για την παραπάνω γεωμετρία παρουσιάζεται στο σχήμα 6.1 και αποτελείται από περίπου 72.000 κυψέλες-όγκους ελέγχου. Οι ιδιότητες των δύο φάσεων στο εσωτερικό του αγωγού παρουσιάζονται στον πίνακα 6.1. Επίσης, το μέτρο της ταχύτητας στις δύο εισόδους του αγωγού λαμβάνεται ίσο με 0.05m/s και έτσι μπορεί να προσδιοριστεί η τιμή του αριθμού Reynolds της ροής χρησιμοποιώντας τη μέση τιμή της κινηματικής συνεκτικότητας για το μείγμα

$$Re = \frac{vD}{\nu} \approx 357$$

όπου D = 0.1m η εσωτερική διάμετρος του αγωγού. Η τιμή του αριθμού Reynolds είναι αρχετά χαμηλή ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί το μοντέλο στρωτής ροής χαι να αποφευχθεί η χρήση μοντέλου τύρβης.

Ο αγωγός περιλαμβάνει ένα συγκλίνον τμήμα, λίγο πριν την έξοδο, το οποίο παρα-

| | Ρευστό 1 | Ρευστό 2 |
|-----------------------------------------|---------------------|--------------------|
| Πυκνότητα $({ m kg}/m^3)$ | 1500 | 1300 |
| Κινηματική Συνεκτικότητα $(m^2/{ m s})$ | $1.5 \cdot 10^{-5}$ | $1.3\cdot 10^{-5}$ |

Πίνακας 6.1: 2 Δ αγωγός με δύο εισόδους και ενιαία έξοδο: Ιδιότητες ρευστών



Σχήμα 6.1: 2Δ αγωγός με δύο εισόδους και ενιαία έξοδο: (a) γενική εικόνα υπολογιστικού πλέγματος, (β) λεπτομέρεια του πλέγματος στο συγκλίνον τμήμα του αγωγού, (γ) τοποθέτηση σημείων ελέγχου της γεωμετρίας στο συγκλίνον τμήμα του αγωγού

μετροποιείται με χρήση ογχομετριχών χαμπυλών B-Splines. Τα σημεία ελέγχου της γεωμετρίας αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος χαι ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας της εχάστοτε συνάρτησης-στόχου γίνεται ως προς τις μετατοπίσεις αυτών. Στο σχήμα 6.1.γ παρουσιάζεται το 9 × 5 δομημένο πλέγμα μορφοποίησης που τοποθετήθηχε στην περιοχή στένωσης της διατομής του αγωγού. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα σημεία ελέγχου που χρωματίζονται με χόχχινο χρώμα στο σχήμα 6.1.γ είναι ανενεργά.

Οι παράγωγοι ευαισθησίας του προβλήματος υπολογίζονται και με τις τρεις συζυγείς μεθόδους (SI, FI, E-SI). Για αυτόν τον σκοπό, απαιτείται πρώτα η επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος στο εσωτερικό του αγωγού και, στη συνέχεια, με διαφορετική επεξεργασία των γνωστών πεδίων του πρωτεύοντος και συζυγούς προβλήματος γίνεται ο υπολογισμός των παραγώγων με την SI, FI και E-SI συζυγή διατύπωση. Για την επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος και συζυγο-



Σχήμα 6.2: 2Δ αγωγός με δύο εισόδους και ενιαία έξοδο: Οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου J_P ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Αριστερά παρουσιάζονται οι παράγωγοι ως προς τις μετατοπίσεις των σημείων ελέγχου κατά τη διεύθυνση-x, δεξιά κατά τη διεύθυνση-y



Σχήμα 6.3: 2Δ αγωγός με δύο εισόδους και ενιαία έξοδο: Οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου J_{α} ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Αριστερά παρουσιάζονται οι παράγωγοι ως προς τις μετατοπίσεις των σημείων ελέγχου κατά τη διεύθυνση-x, δεξιά κατά τη διεύθυνση-y

ύς προβλήματος χρησιμοποιήθηκαν οι σχετικοί επιλύτες που προγραμματίστηκαν στο πλαίσιο της εργασίας, ενώ για την επεξεργασία των πεδίων ροής και των συζυγών πεδίων με σκοπό τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας με τις συζυγείς μεθόδους αναπτύχθηκε κατάλληλο λογισμικό σε γλώσσα προγραμματισμού C++ και σε περιβάλλον OpenFOAM. Ακόμα, προκειμένου να πιστοποιηθεί η ορθότητα υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με τις συζυγείς μεθόδους, οι τελευταίες υπολογίζονται και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, η οποία απαιτεί την επίλυση του πρωτεύοντος προβλήματος δύο φορές για κάθε μεταβλητή σχεδιασμού και ανά κατεύθυνση μετατόπισης των σημείων ελέγχου. Οι συναρτήσεις-στόχοι που χρησιμοποιήθηκαν για τη μελέτη αυτή είναι οι απώλειες ολικής πίεσης στο εσωτερικό του αγωγού και η μέση τιμή του κλάσματος όγκου στην έξοδο του αγωγού πολλαπλασιασμένη με την επιφάνεια εξόδου. Η μαθηματική έκφραση των προηγούμενων συναρτήσεων-στόχων είναι

$$J_P = -\frac{1}{2} \int_{S_{I,O}} v_i n_i \left(p + \frac{1}{2} \rho v_j^2 \right) dS$$
 (6.34)

$$J_{\alpha} = \overline{\alpha} |S_O| = \int_{S_O} \alpha dS \tag{6.35}$$

Στα σχήματα 6.2 παρουσιάζονται οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου J_P ως προς τις μεταβολές των μεταβλητών σχεδιασμού. Παρατηρώντας το σχήμα 6.2 είναι εμφανές ότι οι παράγωγοι της συνάρτησης J_P που υπολογίζονται με τις συζυγείς μεθόδους ταυτίζονται, σχεδόν, μεταξύ τους, αλλά και με τις πεπερασμένες διαφορές. Στο σχήμα 6.3 παρουσιάζονται οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου J_α ως προς τις μεταβολές των μεταβλητών σχεδιασμού. Και σε αυτήν την περίπτωση παρατηρείται ομοιότητα των παραγώγων που υπολογίζονται με τις συζυγείς μεθόδους και με τις πεπερασμένες διαφορές.

6.5 Υπολογισμός των Παραγώγων Ευαισθησίας του Στατικού Αναμίκτη

Στην ενότητα αυτή υπολογίζονται οι παράγωγοι ευαισθησίας στο πρόβλημα βελτιστοποίησης του στατιχού αναμίχτη, με το οποίο ασχολείται η παρούσα εργασία. Συγκεχριμένα, γίνεται υπολογισμός των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού με την SI (εξ. 4.57) και E-SI (εξ. 6.30) συζυγή διατύπωση, προχειμένου να γίνει εμφανής η επίδραση του όρου Leibniz στην ορθότητα υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας. Κατά τον υπολογισμό των παραγώγων με την SI συζυγή διατύπωση, ο τελευταίος παραλείπεται υπό την σύνηθη παραδοχή ότι τα υπόλοιπα των εξισώσεων ροής είναι μηδέν στα όρια του χωρίου ολοχλήρωσης. Επίσης, οι παράγωγοι ευαισθησίας υπολογίζονται δύο φορές, μια φορά ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_P (εξ. 4.5) και άλλη μία ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_U (εξ. 4.3).

Επιπλέον, στο πλαίσιο αυτής της εργασίας, οι παράγωγοι ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού υπολογίζονται και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Έτσι, η παράγωγος της συνάρτησης-στόχου ως προς την *n*-οστή μεταβλητή σχεδιασμού υπολογίζεται ως εξής

$$\frac{\delta F}{\delta b_n} = \frac{F\left(b_1, \dots, b_n + \epsilon, \dots, b_N\right) - F\left(b_1, \dots, b_n - \epsilon, \dots, b_N\right)}{2\epsilon}$$
(6.36)

όπου ε μια θετική ποσότητα πολύ μικρής τιμής. Αξίζει να σημειωθεί ότι η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών αποτελεί ένα μέτρο σύγκρισης για τις τιμές των παραγώγων που υπολογίζονται με την SI και E-SI συζυγή μέθοδο.

Το υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των παραγώγων αποτελείται από περίπου 209.500 κυψέλες-όγκους ελέγχου και έχει ήδη παρουσιαστεί στο κεφ. 5, όπου γίνεται η πρόλεξη της ροής στο εσωτερικό του αναμίκτη. Τα επιφανειακά ολοκληρώματα που εμφανίζονται στην έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας, εξ. 4.57, 6.30, αντίστοιχα, υπολογίζονται πάνω στην επιφάνεια των εμποδίων. Για την παραμετροποίηση των τελευταίων χρησιμοποιούνται ογκομετρικές καμπύλες B-Splines, τα σημεία ελέγχου των οποίων αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού ως προς τις οποίες υπολογίζονται οι παράγωγοι ευαισθησίας. Στο σχήμα 6.5 παρουσιάζεται η τοποθέτηση σημείων ελέγχου της γεωμετρίας γύρω από την περιοχή ενός εμποδίου. Είναι σημαντικό ότι τα σημεία ελέγχου δεν επιτρέπεται να μετατοπιστούν κατά τη διαμήκη διεύθυνση του αναμίκτη (διεύθυνση x), διότι κάτι τέτοιο ίσως οδηγήσει σε μεταβολή του πάχους, το οποίο δεν είναι επιθυμητό. Έτσι, λοιπόν, οι παράγωγοι υπολογίζονται ως προς τις μεταβολές των συντεταγμένων των σημείων ελέγχου κατά τη διεύθυνση ν αι z, αντίστοιχα. Η παραμετροποίηση του προβλήματος παρουσιάζεται αναλυτικότερα στο κεφ. 7, όπου εφαρμόζεται η συζυγής μέθοδος στην βελτιστοποίηση του αναμίκτη.

Στο σχήμα 6.6 δίνονται, ενδεικτικά, οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου F_P ως προς τα σημεία ελέγχου της γεωμετρίας του πρώτου εμποδίου. Παρατηρείται ότι η τιμή των παραγώγων ως προς τις μεταβολές των σημείων ελέγχου στη διεύθυνση y, υπολογισμένες με την E-SI συζυγή μέθοδο και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, δεν ταυτίζονται μεταξύ τους. Ωστόσο, είναι θετικό ότι και οι δύο μέθοδοι οδηγούν σε παραγώγους ευαισθησίας ίδιας τάξης μεγέθους. Αντίθετα, ο υπολογισμός των παραγώγων με την SI συζυγή μέθοδο ενδέχεται να οδηγήσει σε τιμές παραγώγων χαμηλότερης τάξης μεγέθους. Μεγαλύτερη ομοιότητα παρουσιάζει η μορφή των παραγώγων της συνάρτησης F_P ως προς τη μεταβολή των σημείων ελέγχου κατά τη διεύθυνση z. Σε αυτήν την περίπτωση, παρατηρείται ομοιότητα των παραγώγων που υπολογίζονται με την Ε-SI διατύπωση και με πεπερασμένες διαφορές, αλλά όχι απόλυτη ταύτιση. Επίσης, η αχρίβεια υπολογισμού των παραγώγων με την SI συζυγή μέθοδο είναι και σε αυτή την περίπτωση αμφισβητήσιμη αφού ενδέχεται να οδηγήσει σε παραγώγους με διαφορετικό πρόσημο, όπως φαίνεται στο σχήμα 6.6.β. Στο σχήμα 6.7 παρουσιάζονται οι τιμές των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου F_U για τις μεταβλητές σχεδιασμού του πρώτου εμποδίου του αναμίτκη. Σε αυτήν την περίπτωση οι τιμές των παραγώγων υπολογισμένες με την Ε-SI συζυγή μέθοδο και με πεπερασμένες διαφορές παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές, αλλά διατηρείται, ευτυχώς, η ίδια τάξη μεγέθους. Αχόμα, είναι άξιο αναφοράς ότι οι τιμές των παραγώγων ως προς τη μεταβολή των σημείων ελέγχου κατά τη διεύθυνση y που προκύπτουν με την SI συζυγή μέθοδο είναι αρχετές τάξεις μεγέθους μιχρότερες συγχριτιχά με τα αποτελέσματα που δίνουν οι άλλες δύο μέθοδοι. Εν πάσει περιπτώσει, γίνεται αντιληπτό ότι η αχρίβεια υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με την SI συζυγή διατύπωση είναι αμφισβητήσιμη. Έτσι, λοιπόν, κατά τη βελτιστοποίηση του αναμίκτη, η οποία πραγματοποιείται στο κεφ. 7, ο υπολογισμός των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου γίνεται με την Ε-SI συζυγή μέθοδο.



Σχήμα 6.4: Έμφαση στην πυκνότητα του πλέγματος κοντά στην περιοχή των εμποδίων του στατικού αναμίκτη, πάνω στην επιφάνεια των οποίων υπολογίζονται οι παράγωγοι με τη συζυγή μέθοδο

Σχήμα 6.5: Σημεία ελέγχου ογκομετρικής καμπύλης B-Splines για την παραμετροποίηση της γεωμετρίας των εμποδίων του στατικού αναμίκτη





Σχήμα 6.6: Σύγκριση των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου F_P ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του πρώτου εμποδίου, υπολογισμένων με την SI και E-SI συζυγή διατύπωση και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Αριστερά (a) παρουσιάζονται οι παράγωγοι κατά την y-διεύθυνση, δεξιά (β) οι παράγωγοι κατά την z-διεύθυνση



Σχήμα 6.7: Σύγκριση των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου F_U ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του πρώτου εμποδίου, υπολογισμένων με την SI και E-SI συζυγή διατύπωση και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Αριστερά (a) παρουσιάζονται οι παράγωγοι κατά την y-διεύθυνση, δεξιά (β) οι παράγωγοι κατά την z-διεύθυνση

Κεφάλαιο 7

Βελτιστοποίηση μιας Συσκευής Ανάμιξης Δύο Ρευστών

Στην ενότητα αυτή εφαρμόζεται η συνεχής συζυγής μέθοδος στη βελτιστοποίηση μιας συσκευής ανάμιξης δύο ρευστών. Η γεωμετρία του στατικού αναμίκτη έχει ήδη καθοριστεί στο κεφ. 2. Η συσκευή αποτελείται από δύο εισόδους, από όπου εισέρχονται δύο ρευστά με διαφορετικές ιδιότητες, μία έξοδο, ενώ στο εσωτερικό του αγωγού είναι τοποθετημένα εμπόδια σε σταθερή και ίση απόσταση μεταξύ τους. Στην εργασία, εξετάζεται ο επανασχεδιασμός της γεωμετρίας των εμποδίων ώστε να επιτυγχάνεται ελαχιστοποίηση της συνάρτησης-στόχου F (εξ. 4.6). Οι συντελεστές βαρύτητας w_1, w_2 επιλέγονται με κατάλληλο τρόπο ως εξής

$$w_1 = \frac{\overline{w_1}}{F_U^0}, \qquad w_2 = \frac{\overline{w_2}}{F_P^0} \tag{7.1}$$

όπου F_U^0, F_P^0 είναι οι τιμές των συναρτήσεων F_U, F_P υπολογισμένων στην αρχική γε-ωμετρία του στατικού αναμίκτη, αντίστοιχα.

Στον πίνακα 7.1 παρουσιάζονται οι ιδιότητες των δύο ρευστών εντός του στατικού αναμίκτη κατά τη διαδικασία της βελτιστοποίησης.

| | Ρευστό 1 | Ρευστό 2 |
|-----------------------------------------|---------------------|--------------------|
| Πυχνότητα $({ m kg}/m^3)$ | 1500 | 1300 |
| Κινηματική Συνεκτικότητα $(m^2/{ m s})$ | $1.5 \cdot 10^{-5}$ | $1.3\cdot 10^{-5}$ |
| Παροχή μάζας στην είσοδο $ m (kg/s)$ | 0.295 | 0.255 |

Πίνακας 7.1: Στατικός αναμίκτης: Ιδιότητες των δύο ρευστών

7.1 Παραμετροποίηση της Γεωμετρίας των Εμποδίων με Ογκομετρικές Καμπύλες B-Splines

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η διαδικασία βελτιστοποίησης του αναμίκτη της ροής είναι απαραίτητο να προταθεί μία μέθοδος παραμετροποίησης της γεωμετρίας των εμποδίων, που είναι τοποθετημένα στο εσωτερικό. Στην εργασία, επιλέχθηκε η τεχνική της μορφοποίησης με ογκομετρικές B-Splines, μέσω των οποίων θα προκύψουν τα σημεία ελέγχου της γεωμετρίας, τα οποία θα αποτελέσουν τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος.

Έστω ότι $b_m^{ijk}, m \in [1,3], i \in [0,I], j \in [0,J], k \in [0,K]$ είναι οι καρτεσιανές συντεταγμένες του σημείου ελέγχου υπ αριθμόν ijk σε ένα 3Δ δομημένο πλέγμα σημείων ελέγχου, όπου I, J, K είναι ο αριθμός των σημείων ελέγχου στις τρεις καρτεσιανές διευθύνσεις, αντίστοιχα. Οι καρτεσιανές συντεταγμένες $\mathbf{x} = [x, y, z]^T$ των σημείων του πλέγματος που βρίσκονται εντός των ορίων του πλέγματος που ορίζεται από τα σημεία ελέγχου υπολογίζονται ως εξής

$$x_{m}(u, v, w) = U_{i,pu}(u) V_{j,pv}(v) W_{k,pw}(w) b_{m}^{ijk}$$
(7.2)

όπου $\mathbf{U} = [u, v, w]^T$ είναι οι παραμετρικές συντεταγμένες των σημείων του πλέγματος, U, V, W είναι οι συναρτήσεις βάσης B-Splines βαθμού pu, pv, pw, αντίστοιχα, σύμφωνα με το Παράρτημα Α΄. Να σημειωθεί ότι ο βαθμός των συναρτήσεων βάσης δεν είναι απαραίτητα ίδιος και στις τρεις διευθύνσεις. Εάν οι παραμετρικές συντεταγμένες U ενός σημείου του πλέγματος είναι γνωστές, τότε μπορούν να υπολογιστούν οι καρτεσιανές συντεταγμένες του σημείου με χρήση της εξ. 7.2, και μάλιστα με αμελητέο υπολογιστικό κόστος.

Από εδώ και στο εξής, προκειμένου να γίνεται διάκριση ανάμεσα στο υπολογιστικό πλέγμα, στους όγκους ελέγχου του οποίου υπολογίζονται τα ροϊκά μεγέθη, και στο πλέγμα που ορίζουν τα σημεία ελέγχου μιας ογκομετρικής καμπύλης B-Splines, το πρώτο θα αναφέρεται ως 'υπολογιστικό πλέγμα' ενώ το δεύτερο ως 'πλέγμα μορφοποίησης'.

Στην εργασία αυτή, η οποία ασχολείται με τη βελτιστοποίηση μορφής ενός στατικού αναμίκτη, τοποθετείται ένα $5 \times 11 \times 3$ δομημένο πλέγμα μορφοποίησης γύρω από καθένα από τα έξι εμπόδια στο εσωτερικό του αναμίκτη, όπως φαίνεται στο σχήμα 7.1. Οι συναρτήσεις βάσης επιλέχθηκε να έχουν βαθμό pu = 3, pv = 3, pw = 2, αντίστοιχα. Τα σημεία του πλέγματος που βρίσκονται γύρω από τα εμπόδια και εντός των ορίων του πλέγματος μορφοποίησης παραμετροποιούνται, δηλαδή για κάθε σημείο του πλέγματος με γνωστές καρτεσιανές συντεταγμένες $\mathbf{r} = [x_r, y_r, z_r]^T$ υπολογίζονται οι αντίστοιχες

Σχήμα 7.1: Τοποθέτηση ενός 5×11×3 πλέγματος μορφοποίησης γύρω από την περιοχή ενός εμποδίου. Τα σημεία του πλέγματος που βρίσκονται γύρω από το εμπόδιο και εντός των ορίων του μαύρου "κουτιού", που ορίζεται από τα εξωτερικά σημεία ελέγχου, μετατοπίζονται εξαιτίας της μετατόπισης των πράσινων σημείων ελέγχου.



παραμετρικές συντεταγμένες από την επίλυση του συστήματος

$$\mathbf{R}(u, v, w) = \begin{bmatrix} x(u, v, w) - x_r = 0\\ y(u, v, w) - y_r = 0\\ z(u, v, w) - z_r = 0 \end{bmatrix}$$
(7.3)

όπου η ποσότητα $x_m(u, v, w)$ υπολογίζεται από τη σχέση 7.2, για τις γνωστές τιμές των καρτεσιανών συντεταγμένων των σημείων ελέγχου b. Το 3×3 σύστημα των εξισώσεων που περιγράφεται από την εξ. 7.3 επιλύεται με τη μέθοδο Newton-Raphson, αφού υπολογιστεί το Ιακωβιανό μητρώο $\frac{\partial x_m}{\partial u_j}$ όπου $m, j \in [1, 3]$.

Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι τα σημεία ελέγχου του πλέγματος μορφοποίησης, που παρουσιάζεται στο σχήμα 7.1, τα οποία χρωματίζονται με κόκκινο χρώμα είναι ανενεργά, δηλαδή δεν μετατοπίζονται κατά τη διαδικασία της βελτιστοποίησης. Έτσι, λοιπόν, μόνο τα σημεία που χρωματίζονται με πράσινο χρώμα συμμετέχουν στην παραμετροποίηση του σχήματος των εμποδίων. Αυτά τα σημεία ελέγχου δεν επιτρέπεται να μετακινηθούν κατά τη διαμήκη κατεύθυνση του αγωγού, διότι κάτι τέτοιο μπορεί να οδηγήσει σε μεταβολή του πάχους των εμποδίων, το οποίο δεν είναι επιθυμητό για κατασκευαστικούς λόγους. Τέλος, προκειμένου να διατηρηθεί η επίπεδη επιφάνεια στο πάνω μέρος των εμποδίων, κάθε τριάδα ενεργών σημείων ελέγχου κατά τη διαμήκη κατεύθυνση μετατοπίζεται ενιαία με χρήση της μέσης τιμής των παραγώγων ευαισθησίας.

7.2 Αλγόριθμος Βελτιστοποίησης

Σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν προηγουμένως, ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης συνοψίζεται στα ακόλουθα βήματα:

- i) Γίνεται η γένεση του υπολογιστικού πλέγματος με χρήση του κατάλληλου λογισμικού. Στη διπλωματική εργασία, έγινε χρήση του εργαλείου γένεσης πλέγματος snappyHexMesh σε περιβάλλον OpenFOAM.
- ii) Καθορίζεται το 3Δ πλέγμα μορφοποίησης γύρω από κάθε εμπόδιο.
- iii) Γίνεται εύρεση των σημείων του πλέγματος που βρίσκονται στο εσωτερικό του πλέγματος μορφοποίησης. Για καθένα από αυτά υπολογίζονται οι παραμετρικές τους συντεταγμένες (u, v, w) από την επίλυση του συστήματος 7.3. Γίνεται αντιληπτό ότι το υπολογιστικό κόστος του συγκεκριμένου βήματος αυξάνει με τον αριθμό των σημείων ελέγχου που χρησιμοποιούνται καθώς με τον αριθμό των σημείων του πλέγματος που πρέπει να παραμετροποιηθούν.
- iv) Επιλύονται οι εξισώσεις ροής, οι οποίες παρουσιάζονται στην ενότητα 3.1.
- ν) Επιλύονται οι συζυγείς πεδιαχές εξισώσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στην ενότητα 4.4.
- vi) Υπολογίζεται η παράγωγος της συνάρτησης-στόχου ως προς τα σημεία ελέγχου της γεωμετρίας δF/δb_i στην επιφάνεια των εμποδίων, με την E-SI συζυγή διατύπωση (εξ. 6.30).
- vii) Με την τιμή της παραγώγου της συνάρτησης-στόχου ως προς κάθε μεταβλητή σχεδιασμού b_i ανανεώνεται η τιμή της τελευταίας με τη μέθοδο της απότομης καθόδου (εξ. 4.2).
- viii) Γίνεται η παραμόρφωση του πλέγματος και αλλαγή της γεωμετρίας του αναμίκτη, εξαιτίας της μεταβολής των μεταβλητών σχεδιασμού. Έτσι, λοιπόν, με τις ανανεομένες τιμές των σημείων ελέγχου, οι οποίες προέκυψαν από το προηγούμενο βήμα, υπολογίζονται, με χρήση της εξ. 7.2, οι καρτεσιανές συντεταγμένες των σημείων του πλέγματος τα οποία παραμετροποιούνται. Το υπολογιστικό κόστος μετακίνησης του πλέγματος είναι, πρακτικά, αμελητέο.
 - ix) Υπολογίζεται η τιμή της συνάρτησης-στόχου και εφαρμόζεται κάποιο κριτήριο τερματισμού. Σε περίπτωση που το τελευταίο δεν ικανοποιείται, επαναλαμβάνεται η διαδικασία από το βήμα (iv).

7.3 Αποτελέσματα της Βελτιστοποίησης του Στατικού Αναμίκτη

Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της διαδικασίας βελτιστοποίησης του στατικού αναμίκτη. Υπενθυμίζεται ότι, στόχος είναι ο σχεδιασμός του προφίλ των εμποδίων, διατηρώντας σταθερό το πάχος τους κατά τη διαμήκη κατεύθυνση, για κατασκευαστικούς λόγους. Στο σχήμα 7.2 παρουσιάζεται η αρχική γεωμετρία των εμποδίων, προτού διεξαχθεί η διαδικασία της βελτιστοποίησης. Η συνάρτηση-στόχος F του προβλήματος, που τίθεται προς ελαχιστοποίηση, δίνεται από την εξ. 4.6, σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν στην ενότητα 4.2. Συνολικά, χρησιμοποιήθηκαν έξι διαφορετικοί συνδυασμοί συντελεστών βαρύτητας και, για καθέναν από αυτούς, επιλύεται ένα διαφορετικό πρόβλημα βελτιστοποίησης. Αυτοί παρουσιάζονται στον πίνακα 7.2.

Επιλύοντας τα έξι προβλήματα βελτιστοποίησης προχύπτει το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων, το οποίο παρουσιάζεται στο σχήμα 7.3. Αξίζει να σημειωθεί ότι στους άξονες του σχήματος 7.3 δεν παρουσιάζεται η τιμή των συναρτήσεων F_P και F_U , αντίστοιχα, αλλά η τιμή της πτώσης της ολικής πίεσης στο εσωτερικό του αναμίκτη καθώς και η τιμή της ομοιομορφίας του μείγματος στην έξοδο. Οι ποσότητες αυτές υπολογίζονται ως εξής

$$P_{t,loss} = \frac{1}{|S_I|} \int_{S_I} \left(p + \frac{1}{2} \rho v_j^2 \right) dS - \frac{1}{|S_O|} \int_{S_O} \left(p + \frac{1}{2} \rho v_j^2 \right) dS$$
(7.4)

$$Uniformity = \frac{1}{|S_O|} \int_{S_O} (\alpha - \overline{\alpha})^2 \, dS \tag{7.5}$$

Μικρές τιμές της ποσότητας Uniformity (εξ. 7.5) μεταφράζονται σε καλύτερη ομογενοποίηση του μείγματος των δύο φάσεων στην έξοδο.

| $\overline{w_1}$ | 0 | 0.05 | 0.1 | 0.25 | 0.5 | 1 |
|------------------|---|------|-----|------|-----|---|
| $\overline{w_2}$ | 1 | 0.95 | 0.9 | 0.75 | 0.5 | 0 |

Πίνακας 7.2: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Συνδυασμοί συντελεστών βαρύτητας της συνάρτησης-στόχου F (εξ. 4.7)







Σχήμα 7.3: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων, μαζί με την ιστορία σύγκλισης του αλγορίθμου βελτιστοποίησης για κάθε συνδυασμό των συντελεστών βαρύτητας

Με βάση το σχήμα 7.3, είναι εμφανές ότι δίνοντας υψηλότερες τιμές στο συντελεστή βαρύτητας w_2 δίνεται μεγαλύτερη έμφαση στην ελαχιστοποίηση της συνάρτησης F_P . Λ.χ., στην περίπτωση που ο εν λόγω συντελεστής λάβει την τιμή 1 και ο συντελεστής w_1 λάβει την τιμή 0, παρατηρείται μείωση της πτώσης ολικής πίεσης κατά 49%. Σε απόλυτες μονάδες πίεσης, η πτώση ολικής πίεσης έχει μειωθεί κατά 54Pa. Ωστόσο, παρατηρείται χειρότερη ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο του αναμίκτη σε σχέση με την αρχική γεωμετρία, δηλαδή μεγαλύτερη τιμή της συνάρτησης στόχου F_U . Παρόμοια αποτελέσματα παρατηρούνται σε περίπτωση που οι συντελεστές βαρύτητας λάβουν την τιμή 1 και 0, αντίστοιχα, η διαδικασία της βελτιστοποίησης οδηγεί σε δραστική πτώση της τιμής της συνάρτησης F_U . Αυτό μεταφράζεται σε αύξηση της ομοιομορφίας στην έξοδο κατά 77% ταυτόχρονα, όμως, με αύξηση των απωλειών ολικής πίεσης κατά 4.9%.

Στον πίνακα 7.3 παρουσιάζονται αναλυτικά οι τιμές των απωλειών ολικής πίεσης (εξ. 7.4) και της ομοιομορφίας του μείγματος στην έξοδο του αναμίκτη (εξ. 7.5) για την αρχική γεωμετρία του αναμίκτη καθώς και για τις κυριαρχούσες λύσεις του μετώπου Pareto, οι οποίες φαίνονται με μαύρο 'αστερίσκο' στο σχήμα 7.3. Προκειμένου να γίνει αντιληπτή η επίδραση των εμποδίων στο εσωτερικό του αναμίκτη, γίνεται ένα επιπλέον τρέξιμο στο οποίο τα τελευταία αφαιρούνται. Σε αυτήν την περίπτωση, παρατηρείται εξαιρετικά χαμηλότερη τιμή των απωλειών ολικής πίεσης σε σχέση με τις κυριαρχούσες



Σχήμα 7.4: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Η βέλτιστη μορφή των εμποδίων για κάθε συνδυασμό των συντελεστών βαρύτητας

λύσεις του μετώπου Pareto. Ωστόσο, η ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο είναι αρχετά χαμηλή (σχήμα 7.6) διότι δεν υπάρχει χάποιος μηχανισμός που να ευνοεί την ανάμιξη των δύο φάσεων.

Στο σχήμα 7.4 παρουσιάζεται η βέλτιστη μορφή των εμποδίων για κάθε συνδυασμό συντελεστών βαρύτητας. Στην περίπτωση που οι συντελεστές βαρύτητας λάβουν την τιμή 0 και 1, αντίστοιχα, δηλαδή στόχος του προβλήματος είναι η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης F_P , μόνο, παρατηρείται ότι η βελτιστοποίηση τείνει να μειώσει την επιφάνεια των εμποδίων, προκειμένου να επιτευχθεί μείωση της αναχυκλοφορίας κατάντι αυτών και, επομένως, μείωση της πτώσης ολικής πίεσης. Στην περίπτωση που στόχος είναι αποκλειστικά η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης F_U παρατηρείται ότι η βελτιστοποίηση της αναχυκλοφορίας κατάντι αυτών και, επομένως, μείωση της πτώσης ολικής πίεσης. Στην περίπτωση που στόχος είναι αποκλειστικά η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης F_U παρατηρείται ότι η βελτιστοποίηση οδηγεί σε πιο 'χυματιστά' σχήματα εμποδίων, προκαλώντας τον στροβιλισμό της ροής και αυξάνοντας την ομογενοποίηση του μείγματος. Αυτό φαίνεται χαρακτηριστικά στο



Σχήμα 7.5: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Η ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο του στατικού αναμίκτη για κάθε συνδυασμό των συντελεστών βαρύτητας





σχήμα 7.7, όπου παρουσιάζεται η εφαπτομενική συνιστώσα του πεδίου ταχύτητας σε μια τομή του αναμίκτη ανάντι του τελευταίου εμποδίου. Επίσης, στο σχήμα 7.5 παρουσιάζεται η ομοιομορφία του μείγματος στην έξοδο του αναμίκτη για τις κατά Pareto βέλτιστες λύσεις του προβλήματος. Σχήμα 7.7: $B\epsilon \lambda \tau$ ιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Το εφαπτομενικό διάνυσμα της ταχύτητας σε μια τομή του αναμίκτη ανάντι του έκτου εμποδίου, πάνω φαίνεται η κατανομή ταχύτητας στην αρχική γεωμετρία του αναμίκτη, κάτω φαίνεται η κατανομή ταχύτητας μετά τη διαδικασία της βελτιστοποίησης ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_U



Τέλος, και για λόγους πληρότητας, αναφέρεται ότι σε όλα τα προβλήματα βελτιστοποίησης, ως κριτήριο σύγκλισης των εξισώσεων του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος τέθηκε τα υπόλοιπα των εξισώσεων να λάβουν ταυτόχρονα τιμή μικρότερη ή ίση του $1 \cdot 10^{-7}$. Στο σχήμα 7.8 παρουσιάζεται ενδεικτικά η σύγκλιση των εξισώσεων για τον πρώτο κύκλο του αλγορίθμου βελτιστοποίησης στην περίπτωση που οι συντελεστές βαρύτητας w_1 , w_2 είναι 0.25 και 0.75, αντίστοιχα.



Σχήμα 7.8: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Η σύγκλιση των ισχυουσών εξισώσεων για το συνδυασμό συντελεστών βαρύτητας $w_1 = 0.25, w_2 = 0.75$



Σχήμα 7.9: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Η κατανομή του κλάσματος όγκου ανάντι των εμποδίων στη βέλτιστη γεωμετρία του αναμίκτη ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_U



```
(β)
```

Σχήμα 7.10: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Γραμμές ροής χρωματισμένες με την τιμή του κλάσματος όγκου, (a) στην αρχική γεωμετρία, (β) μετά τη διαδικασία βελτιστοποίησης ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_U

| | Απώλειες Ολιχής Πίεσης [Pa] | Ομοιομορφία μείγματος [-] |
|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Αρχική Γεωμετρία Αναμίκτη | 110.76 | $4.20 \cdot 10^{-3}$ |
| $w_1 = 1, w_2 = 0$ | 116.50 | $9.78 \cdot 10^{-4}$ |
| $w_1 = 0.5, w_2 = 0.5$ | 103.28 | $1.19 \cdot 10^{-3}$ |
| $w_1 = 0.25, w_2 = 0.75$ | 83.44 | $1.90 \cdot 10^{-3}$ |
| $w_1 = 0.1, w_2 = 0.9$ | 65.29 | $3.87 \cdot 10^{-3}$ |
| $w_1 = 0.05, w_2 = 0.95$ | 59.18 | $5.52 \cdot 10^{-3}$ |
| $w_1 = 0, w_2 = 1$ | 56.53 | $6.34 \cdot 10^{-3}$ |
| Αναμίκτης χωρίς εμπόδια | 22.35 | $9.65 \cdot 10^{-3}$ |

Πίνακας 7.3: Οι τιμές των απωλειών ολικής πίεσης (εξ. 7.4) και της ομοιομορφίας του μείγματος (εξ. 7.5) που προέκυψαν από τη διαδικασία της βελτιστοποίησης για την αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη, τις βέλτιστες κατά Pareto λύσεις και για τον αναμίκτη χωρίς εμπόδια στο εσωτερικό



Σχήμα 7.11: Βελτιστοποίηση στατικού αναμίκτη: Γραμμές ροής χρωματισμένες με την τιμή της ολικής πίεσης, (a) στην αρχική γεωμετρία, (β) μετά τη διαδικασία βελτιστοποίησης ως προς τη συνάρτηση-στόχο F_P

Κεφάλαιο 8

Ανακεφαλαίωση - Συμπεράσματα

Αντιχείμενο της διπλωματιχής αυτής εργασίας αποτέλεσε η βελτιστοποίηση μιας συσκευής ανάμιξης δύο ρευστών με χρήση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου. Έτσι, λοιπόν, καθορίστηκαν οι διαστάσεις και σχεδιάστηκε το 3Δ μοντέλο της εν λόγω συσκευής, ώστε να ανταποκρίνεται σε ένα μοντέλο αναμίκτη κοντά στην πραγματικότητα. Η γεωμετρία αυτή είναι ένας αγωγός σταθερού μήχους και διαμέτρου, με δύο εισόδους και μία έξοδο, και έξι εμπόδια ημικυκλικού σχήματος ομοιόμορφα τοποθετημένα στο εσωτερικό. Στη συνέχεια παρουσιάστηκαν οι εξισώσεις Navier-Stokes για την περίπτωση μόνιμης, στρωτής και διφασικής ροής, όπου οι δύο φάσεις θεωρούνται ασυμπίεστες και πλήρως αναμίξιμες. Επίσης, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο του κλάσματος όγκου (VoF), σύμφωνα με το οποίο εισάγεται το βαθμωτό μέγεθος α , το οποίο εκφράζει το κλάσμα όγκου της φάσης με δείκτη 1 στο μείγμα προς τον όγκο της στοιχειώδους κυψέλης Ω_i. Ακόμα, δόθηκαν οι οριακές συνθήκες του προβλήματος. Ακολούθησε η μαθηματική διατύπωση της συζυγούς μεθόδου προκειμένου να υπολογιστεί η τιμή των παραγώγων της συνάρτησης-στόχου F ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος b. Συγκεκριμένα, ορίστηκαν δύο συναρτήσεις-στόχοι: η πρώτη περιγράφει τις απώλειες ολικής πίεσης (F_P) και η δεύτερη περιγράφει την ομοιομορφία του μείγματος των δύο φάσεων στις περιοχές εξόδου του χωρίου ολοκλήρωσης (F_U) . Από την παραπάνω διαδικασία, επιβάλλοντας τον μηδενισμό των όρων στο εσωτερικό της παραγώγου της συνάρτησης-στόχου, που περιέχουν τις μεταβολές των ροϊχών μεγεθών ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, προέχυψαν οι συζυγείς πεδιαχές εξισώσεις χαι οι οριακές συνθήκες του συζυγούς προβλήματος. Με βάση τα παραπάνω, πραγματοποιήθηκε η γένεση του υπολογιστικού πλέγματος του αναμίκτη, για την οποία χρησιμοποιήθηκε το εργαλείο snappyHexMesh του ανοικτού λογισμικού OpenFOAM. Για αυτό το πλέγμα έγινε η επίλυση των εξισώσεων του πρωτεύοντος προβλήματος, καθώς και των συζυγών πεδιαχών εξισώσεων, μία φορά ως προς τη συνάρτηση στόχο F_P χαι μία ως προς τη συνάρτηση στόχο F_U . Σε όλες τις περιπτώσεις παρατηρήθηκε σύγκλιση των εξισώσεων. Οι αντίστοιχοι επιλύτες των εξισώσεων του πρωτεύοντος και του συζυγούς προβλήματος προγραμματίστηχαν, στο πλαίσιο της εργασίας, εξαρχής στο περιβάλλον του λογισμικού OpenFOAM.

Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε στην ακρίβεια υπολογισμού των παραγώγων με τη συζυγή μέθοδο. Συγκεκριμένα, αναπτύχθηκαν και οι τρεις συζυγείς διατυπώσεις (SI, FI, E-SI), για τον υπολογισμό της κλίσης της συνάρτησης-στόχου σε προβλήματα μόνιμων, στρωτών, διφασιχών ροών. Για τον υπολογισμό των παραγώγων ευαισθησίας με τις συζυγείς μεθόδους αναπτύχθηκε κατάλληλο λογισμικό σε γλώσσα προγραμματισμού C++ και σε περιβάλλον OpenFOAM. Η πιστοποίηση της ορθότητας υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας με χρήση του ανωτέρω λογισμιχού πραγματοποιήθηχε σε μια 2Δ γεωμετρία ενός αγωγού με δύο εισόδους και ενιαία έξοδο, όπου χρησιμοποιήθηκαν δύο συναρτήσεις-στόχοι. Και στις δύο περιπτώσεις οι συζυγείς μέθοδοι οδήγησαν σε τιμές παραγώγων πολύ χοντά στις πεπερασμένες διαφορές, οι οποίες αποτέλεσαν ένα μέτρο σύγκρισης. Ακόμα, προκειμένου να γίνει αντιληπτή η επίδραση του όρου Leibniz στην ορθότητα υπολογισμού των παραγώγων ευαισθησίας, οι τελευταίες υπολογίζονται στην αρχική γεωμετρία του στατικού αναμίκτη με την SI και Ε-SI συζυγή μέθοδο. Επίσης, ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας έγινε και με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, η οποία αποτέλεσε ένα μέτρο σύγκρισης για τις συζυγείς μεθόδους. Παρατηρήθηκε ότι η Ε-SI συζυγής διατύπωση οδήγησε σε μικρές διαφορές σε σχέση με τις πεπερασμένες διαφορές. Ωστόσο, ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας με την SI συζυγή μέθοδο οδήγησε σε αμφισβητήσιμα αποτελέσματα τόσο ως προς την τάξη μεγέθους όσο και ως προς το πρόσημο.

Τέλος, εφαρμόστηκε η συνεχής συζυγής μέθοδος στη βελτιστοποίηση της μορφής των εμποδίων στο εσωτερικό του στατικού αναμίκτη, διατηρώντας σταθερό το πάχος τους κατά τη διαμήκη κατεύθυνση. Για την παραμετροποίηση των εμποδίων χρησιμοποιήθηκαν ογκομετρικές καμπύλες B-Splines, τα σημεία ελέγχου των οποίων αποτέλεσαν τις μεταβλητές σχεδιασμού του προβλήματος. Ο υπολογισμός των παραγώγων ευαισθησίας έγινε με την Ε-SI συζυγή διατύπωση, και οι τελευταίες χρησιμοποιήθηκαν για την ανανέωση της τιμής των μεταβλητών σχεδιασμού με τη μέθοδο της απότομης καθόδου. Η συνάρτηση στόχος του προβλήματος προέχυψε ως γραμμικός συνδυασμός των επιμέρους συναρτήσεων-στόχων F_U και F_P , εισάγοντας κατάλληλους συντελεστές βαρύτητας. Συνολικά, χρησιμοποιήθηκαν έξι διαφορετικοί συνδυασμοί συντελεστών βαρύτητας. Για καθέναν από αυτούς επιλύθηκε ένα διαφορετικό πρόβλημα βελτιστοποίησης και προέκυψε το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων. Αξίζει να γίνει μια αναφορά στις δύο ακραίες περιπτώσεις, όπου τέθηκε ως στόχος η ελαχιστοποίηση των συναρτήσεων F_U, F_P, αντίστοιχα. Στην πρώτη περίπτωση, παρατηρήθηκε αύξηση της ομοιομορφίας του μείγματος στην έξοδο του αναμίκτη της ροής κατά 77%. Ωστόσο, παρατηρήθηκε ταυτόχρονα αύξηση των απωλειών ολικής πίεσης κατά 4.9% (5.74 Pa). Στη δεύτερη περίπτωση, επιτεύχ
θηκε μείωση της πτώσης ολικής πίεσης κατά49%~(54Pa), αλλά με χειροτέρευση της ομοιομορφίας στην έξοδο σε σχέση με την αρχική γεωμετρία του αναμίχτη. Στην περίπτωση που συνάρτηση-στόχος του προβλήματος ήταν η F_P, η διαδικασία της βελτιστοποίησης οδήγησε, ορθά, στη μείωση της επιφάνειας των εμποδίων. Όταν τέθηκε ως στόχος του προβλήματος η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης F_U, η διαδικασία της βελτιστοποίησης οδήγησε σε 'κυματιστά' προφίλ εμποδίων, τα οποία ενισχύουν το στροβιλισμό της ροής.

Παράρτημα Α΄

Συναρτήσεις βάσης B-Splines

Έστω $b_i, i \in [0, n]$ τα σημεία ελέγχου μιας παραμετρικής καμπύλης x(u). Η εξίσωση παρεμβολής των n + 1 δεδομένων σημείων b_0, \ldots, b_n μέσω κυβικών B-Splines είναι η

$$x(u) = \sum_{i=0}^{n} N_{i,p}(u) b_{i}$$
 (A'.1)

όπου $N_{i,p}(u)$ η i-oσtή συνάρτηση βάσης βαθμού p. Για τον προσδιορισμό των συναρτήσεων βάσης ορίζεται συνήθως ένα διάνυσμα πραγματικών αριθμών $\mathbf{U} = (u_0, \ldots, u_{m-1})$, όπου m = n + p + 1, οι οποίοι ονομάζονται κόμβοι. Για κάθε κόμβο u_i που ανήκει στο διάνυσμα U πρέπει να ισχύει ότι $u_i \in [0, 1], \forall i \in [0, m - 1]$. Επίσης, οι κόμβοι u_i πρέπει να είναι τοποθετημένοι σε αύξουσα σειρά, δηλαδή $u_i \leq u_{i+1}, \forall i \in [0, m - 1]$. Ορισμένοι κόμβοι μπορεί να έχουν πολυπλοκότητα μεγαλύτερη από ένα, δηλαδή ο ίδιος κόμβος δύναται να υπάρχει στο διάνυσμα U περισσότερες από μία φορές. Το διάνυσμα U το οποίο αποτελείται από ομοιόμορφα κατανεμημένους κόμβους ορίζεται ως εξής

$$\mathbf{U} = [\underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \frac{1}{N}, \dots, \frac{N-1}{N}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1}]$$
(A'.2)

όπου η ποσότητα N παίρνει την τιμή N = n - p - 1. Αξίζει, αχόμα, να τονιστεί ότι το διάνυσμα χόμβων οδηγεί στο σχηματισμό χλειστών χαμπύλων, οι οποίες διέρχονται από το πρώτο χαι τελευταίο σημείο ελέγχου. Τέλος, ο αριθμός των σημείων ελέγχου πρέπει να υπερβαίνει τον βαθμό των συναρτήσεων βάσης τουλάχιστον χατά ένα, δηλαδή $n \ge p + 1$, δεδομένου ότι η ποσότητα N που εμφανίζεται στην εξ. Α΄.2 πρέπει να λαμβάνει θετιχές τιμές. Εάν η ποσότητα N λάβει την τιμή μηδέν, το διάνυσμα των χόμβων στην εξ. Α΄.2 παίρνει τη μορφή

$$\mathbf{U} = [\underbrace{0, \dots, 0}_{p+1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{p+1}] \tag{A'.3}$$



Σχήμα Α'.1: Αναδρομικός τύπος υπολογισμού του $N_{i,p}$ για p=3

και οδηγεί σε συναρτήσεις βάσης οι οποίες ονομάζονται πολυώνυμα Bezier-Bernstein και η προκύπτουσα καμπύλη ονομάζεται καμπύλη Bezier.

Με βάση τα παραπάνω ορίζονται οι m συναρτήσεις βάσης ως εξής

$$N_{i,0}(u) = \begin{cases} 1, & u \in [u_i, u_{i+1}) \\ 0, & \alpha \lambda \lambda o \psi \end{cases}$$
(A'.4)

$$N_{i,p}(u) = \frac{u - u_i}{u_{i+p} - u_i} N_{i,p-1}(u) + \frac{u_{i+p+1} - u}{u_{i+p+1} - u_{i+1}} N_{i+1,p-1}(u)$$
(A'.5)

Σε περίπτωση που ο παρανομαστής των κλασμάτων στην εξ. Α΄.5 μηδενιστεί, τότε εξ ορισμού μηδενίζεται και ο αριθμητής και η τιμή του κλάσματος λαμβάνεται κατ΄ εξαίρεση ίση με το μηδέν. Από την εξ. Α΄.4 γίνεται αντιληπτό ότι οι συναρτήσεις βάσης μηδενικού βαθμού είναι βηματικές, ενώ οι συναρτήσεις βάσης βαθμού p είναι γραμμικός συνδυασμός δύο συναρτήσεων βάσης βαθμού p - 1, όπως φαίνεται από την εξ. Α΄.5. Στο σχήμα Α΄.1 παρουσιάζεται παραστατικά ο αναδρομικός τύπος υπολογισμού του $N_{i,p}$, για βαθμό p = 3. Από το σχήμα Α΄.1 είναι προφανές ότι η συνάρτηση βάσης $N_{i,3}$ εξαρτάται των συναρτήσεων βάσης μηδενικού βαθμού $N_{i,0}, N_{i+1,0}, N_{i+2,0}, N_{i+3,0}$. Έτσι, λοιπόν, και σύμφωνα με την εξ. Α΄.4, η συνάρτηση βάσης $N_{i,3}$ επηρεάζει τα σημεία της καμπύλης στο διάστημα κόμβων $[u_i, u_{i+4})$. Στη γενικότητα, ισχύει ότι η συνάρτηση βάσης βαθμού p επηρεάζει όλα τα σημεία των οποίων η παραμετρική συντεταγμένη βρίσκεται εντός του διαστήματος των κόμβων $[u_i, u_{i+p+1})$. Η παραπάνω ιδιότητα ονομάζεται 'ιδιότητα τοπικής υποστήριξης' (local support property), διότι η μετατόπιση ενός σημείου ελέγχου οδηγεί στη μεταβολή ενός τμήματος μόνο της παραμετρικής καμπύλης. Ακόμα, είναι προφανές ότι το εύρος της 'τοπικότητας' μιας καμπύλης B-Spline καθορίζεται από το βαθμό p.

Μία σημαντική ιδιότητα των καμπυλών B-Splines είναι εκείνη της διαφορισιμότητας, διότι σε μεθόδους αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης απαιτείται η εύρεση των παραγώγων ευαισθησίας ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Η παράγωγος μιας συνάρτησης βάσης ως προς την παραμετρική συντεταγμένη *u* δίνεται από τη σχέση

$$N'_{i,p}(u) = \frac{p}{u_{i+p} - u_i} N_{i,p-1}(u) - \frac{p}{u_{i+p+1} - u_{i+1}} N_{i+1,p-1}(u)$$
(A'.6)
Βιβλιογραφία

- Alexias, P. and Giannakoglou, K.C.: Optimization of a static mixing device using the continuous adjoint to a two-phase mixing model. Optimization and Engineering, 21:631-650, 2020.
- [2] Alexias, P. and de Villers, E.: Gradient projection, constraints and surface regularization methods in adjoint shape optimization. Springer, Cham, 2019, pp 3-17.
- [3] Sutherland, W.S.: Improvement in apparatus for preparing gaseous fuel. UK 1784–1874.
- [4] Bor, T.P.: The static mixer as a chemical reactor. Br Chem Eng, 16:610–2, 1971.
- [5] Grace, H.P.: Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems. Chem Eng Commun, 14:225–77, 1982.
- [6] Nauman, E.B.: Enhancement of heat transfer and thermal homogeneity with motionless mixers. AIChE J, 25:246–58, 1979.
- [7] Thakur, R.K., Vial, C.H., Nigam K.D.P., Nauman, E.B. and Djelveh, G.: Static mixers in the process industries: a review. Chem Eng Res Des, 81:787–826, 2003.
- [8] Meijer, H., Singh, M.K. and Anderson, P.D.: On the the performance of static mixers: A quantitative comparison. Progress in Polymer Science, 37:1333-1349, 2012.
- [9] Regner, M., Östergren, K. and Trägårdh, C.: Effects of geometry and flow rate on secondary flow and the mixing process in static mixers—a numerical study. Chem Eng Sci, 61(18):6133–6141, 2006.
- [10] Byrde, O. and Sawley, M.L.: Optimization of a kenics static mixer for noncreeping flow conditions. Chem Eng J, 72(2):163–169, 1999.
- [11] Hanada, T., Kuroda, K. and Takahashi, K.: CFD geometrical optimization to improve mixing performance axial mixer. Chem Eng Sci, 144:144–152, 2016.

- [12] Hirschberg, S., Koubek, R., Moser, F. and Schöck, J.: An improvement of the sulzer smx TM static mixer significantly reducing the pressure drop. Chem Eng Res Des, 87(4):524–532, 2009.
- [13] Song, H. and Han, S.P.: A general correlation for pressure drop in a kenics static mixer. Chem Eng Sci, 60(21):5696–5704, 2005.
- [14] Γιαννάχογλου, Κ.Χ.: Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική. Αθήνα 2006.
- [15] Nocedal, J. and Wright, S.J.: Numerical Optimization. 2nd edn., Springer, 2006.
- [16] Anderson, W.K. and Venkatakrishnan, V.: Aerodynamic design optimization on unstructured grids with a continuous adjoint formulation. Computers & Fluids, 28:443-480, 1999.
- [17] Lozano, C., Andres, E., Martin, M. and Bitrian, P.: Domain versus boundary computation of flow sensitivities with the continuous adjoint method for aerodynamic shape optimization problems. Numerical Methods in Fluids, 70(10):1305:1323, 2012.
- [18] Anderson, W.K., Newman, J.C., Whitfield, D.L. and Nielsen, E.J.: Sensitivity analysis for navier-stokes equations on unstructured meshes using complex variables. AIAA Journal, 39(1):56–63, 2001.
- [19] Newman, J.C., Anderson, W.K. and Whitfield, D.L.: Multidisciplinary sensitivity derivatives using complex variables. MSSU-COE-ERC-98-08, 1998.
- [20] Tungeon, E., Pelletier, D., Borggard, J. and Etienne, S.: Application of a sensitivity equation method to the $k \varepsilon$ model of turbulence. Optimization and Engineering, 8:341-372, 2007.
- [21] Giotis, A.P.: Application of evolutionary algorithms, computational intelligence and advanced computational fluid dynamic techniques to the optimizationinverse design of turbomachinery cascades, using parallel processing. PhD thesis, National Technical University of Athens, 2003.
- [22] Kampolis, I.C. and Giannakoglou, K.C.: Distributed evolutionary algorithms with hierarchical evaluation. Engineering Optimization, 41(11):1037-1049, 2009.
- [23] Karakasis, M.K.: Hierarchical, distributed evolutionary algorithms and computational intelligence in aerodynamic shape optimization, on multiprocessor environment. PhD thesis, National Technical University of Athens, 2006.
- [24] Karakasis, M.K. and Giannakoglou, K.C.: On the use of metamodel assisted, multiobjective evolutionary algorithms. Optimization Engineering, 38(8):941-957, 2006.

- [25] Παπουτσής-Κιαχαγιάς, Ε.: Συζυγείς μέθοδοι χαμηλού υπολογιστικού κόστους για τυρβώδεις ροές στην αεροδυναμική βελτιστοποίηση. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2013.
- [26] Kavvadias, I.S.: Continuous adjoint methods for steady and unsteady turbulent flows with emphasis on the accuracy of sensitivity derivatives. PhD thesis, National Technical University of Athens, 2013.
- [27] Ζυμάρης, Α.: Συζυγείς μέθοδοι για το σχεδιασμό μορφών με βέλτιστη αεροδυναμική συμπεριφορά σε στρωτές και τυρβώδεις ροές. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2010.
- [28] Παπαδημητρίου, Δ.: Συζυγείς (adjoint) διατυπώσεις για την ανάλυση-σχεδίαση πτερυγώσεων στροβιλομηχανών και βέλτιστη προσαρμογή πλέγματος με aposteriori εκτίμηση σφάλματος. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2007.
- [29] Τρομπούχης, Ξ.: Αριθμητική επίλυση προβλημάτων αεροδυναμικήςαεροελαστικότητας σε επεξεργαστές καρτών γραφικών. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2012.
- [30] Ζερβογιάννης, Θ.: Μέθοδοι βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική και στις στροβιλομηχανές με χρήση συζυγών τεχνικών, υβριδικών πλεγμάτων και του ακριβούς εσσιανού μητρώου. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2011.
- [31] Καμπόλης, Ι.: Πολυεπίπεδοι, πολυεπεξεργαστικοί αλγόριθμοι αεροδυναμικής βελτιστοποίησης στις στροβιλομηχανές. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, Ε.Μ.Π., Αθήνα 2009.
- [32] Brennen, C.: Fundamentals of multiphase flow. Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [33] Ishii, M. and Hibiki, T.: Thermo-fluid dynamics of two-phase flow. Springer, New York, 2011.
- [34] Manninen, M.: On the mixture model for multiphase flow. Technical Research Center of Finland, Espoo, 1996.
- [35] Francois, M.M., Cummins, S.J., Dendy, E.D., Kothe, D.B., Sicilian, J.M., Williams, M.W.: A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. J Comput. Physics 213, 2006, pp 141-173.
- [36] Popinet, S.: An accurate addaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. J Comput. Physics 228, 2009, pp 5838-5866.
- [37] Deshpande, S.S., Anumolu, L. and Trujillo, M.F.: Evaluating the performance of the two-phase flow solver interFoam. Computational Science & Discovery 5, 2012, 36pp.

- [38] Cussler, EL: Values of diffusion coefficients. Cambridge series in chemical engineering, 3rd edn. Cambridge University Press, Cambridge, 2009, pp 117–160.
- [39] Kavvadias, I.S., Papoutsis-Kiachagias, E.M. and Giannakoglou, K.C.: On the proper treatment of grid sensitivities in continuous adjoint methods for shape optimization. J Comput. Physics 301, 2015, pp 1-18.
- [40] Anderson, W.K. and Venkatakrishnan, V.: Aerodynamic design optimization on structured grids with a continuous adjoint formulation. Computers & Fluids 28, 1999, pp. 443-480.
- [41] Jameson, A. and Sim, J.: Reduction of the adjoint gradient formula in the continuous limit. In AIAA paper 2003-0040, 41th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, January 2003.
- [42] Papadimitriou, D.I. and Giannakoglou, K.C.: A continuous adjoint method with objective function derivatives based on boundary integrals for inviscid and viscous flows. Journal of Computers & Fluids, 36(2):325-341, 2007.
- [43] Michalewicz, Z.: Genetic Algoritms + Data Structures = Evolution Programs. 3rd edn, Springer, 1995.
- [44] OpenFOAM, Programmer's guide, Version 3.0.1, 13th December 2015.
- [45] OpenFOAM, User Guide, Version 1.6, July 2009.
- [46] Γιαννάχογλου, Κ.Χ., Αναγνωστόπουλος, Ι. και Μπεργελές, Γ.: Αριθμητική Ανάλυση για Μηχανικούς. 3η έκδοση, Αθήνα 2003.
- [47] Piegl, L. and Tiller, W.: The NURBS Book. 2nd edn., Springer, 1997.