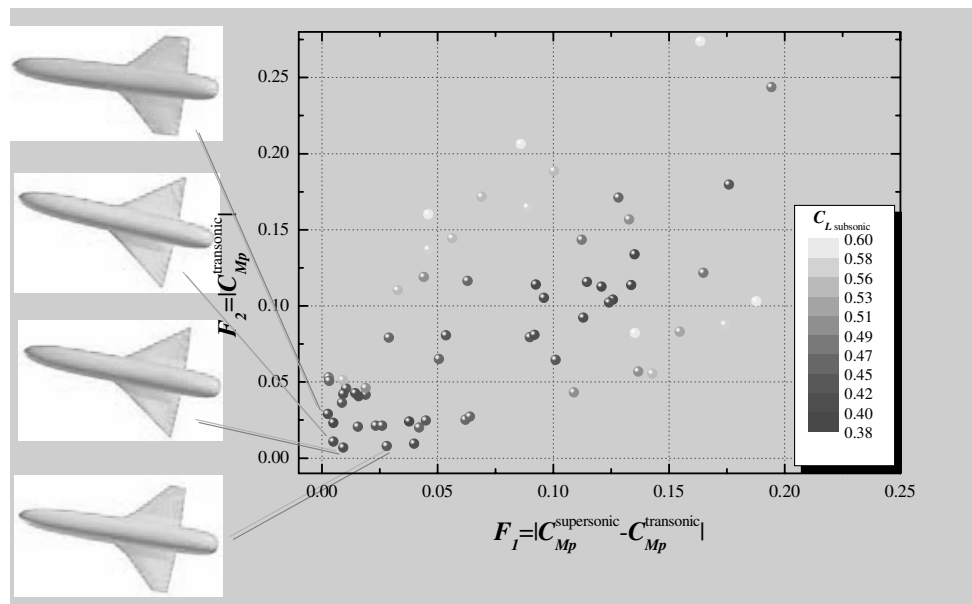




ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική

Κ.Χ. Γιαννάκογλου, *Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.*



Αθήνα, 2006
4η Έκδοση (Με Ασκήσεις)

Περιεχόμενα

1	Η Βελτιστοποίηση στην Αεροδυναμική	7
1.1	Προβλήματα Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική	8
1.1.1	Πρώτο Παράδειγμα	8
1.1.2	Δεύτερο Παράδειγμα	10
1.1.3	Τρίτο Παράδειγμα	10
1.1.4	Τέταρτο Παράδειγμα	15
1.1.5	Πέμπτο Παράδειγμα	18
1.2	Προβλήματα Βελτιστοποίησης στις Στροβιλομηχανές	25
1.3	Ταξινόμηση Προβλημάτων και Μεθόδων	30
1.3.1	Συνεχή και Διακριτά Προβλήματα Βελτιστοποίησης	30
1.3.2	Καθολική και Τοπική Βελτιστοποίηση	31
1.3.3	Αιτιοκρατικά και Στοχαστικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης	31
1.3.4	Αιτιοκρατικές και Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης	32
1.3.5	Βελτιστοποίηση και Κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής	32
1.4	Ανακεφαλαίωση	33
2	Βασικό Μαθηματικό Υπόβαθρο και Ορισμοί	35
2.1	Προβλήματα Ενός Στόχου	35
2.2	Προβλήματα Πολλών Στόχων	39
3	Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή	45
3.1	Βασική Αρχή κάθε Μεθόδου Ανίχνευσης κατά Γραμμή	47
3.2	Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου	48
3.2.1	Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου σε Γραμμικά Προβλήματα	49
3.2.2	Εύρεση Μήκους Βήματος σε Μη-Γραμμικά Προβλήματα	54
3.3	Η Μέθοδος της Καθόδου	55
3.4	Η Μέθοδος Newton	56
3.5	Η Προσεγγιστική Μέθοδος Newton	57
3.6	Η Μέθοδος των Συζυγών Κατευθύνσεων	59
3.6.1	Η Έννοια της Συζυγίας	59
3.6.2	Σύγκλιση σε N το πολύ Βήματα. Γιατί ;	61
3.6.3	Η συζυγής διαδικασία των Gram-Schmidt	63
3.6.4	Χρήσιμες Σχέσεις	64
3.7	Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων	66

3.7.1	Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων - Βασικός Αλγόριθμος . . .	67
3.8	Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων για Μη-Γραμμικά Προβλήματα . . .	68
3.8.1	Η Μέθοδος των Fletcher-Reeves	68
3.8.2	Η Μέθοδος των Polak-Ribiere	70
4	Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης	71
4.1	Μαθηματική Διατύπωση της Μεθόδου	71
4.1.1	Απλό Μοντέλο Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης	72
4.1.2	Γενικό Μοντέλο Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης	73
4.2	Υλοποίηση της Μεθόδου	73
4.2.1	Καθορισμός Ακτίνας Περιοχής Εμπιστοσύνης	73
4.2.2	Αλγόριθμος Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης	74
5	Βελτιστοποίηση με Περιορισμούς	77
5.1	Βασικοί Ορισμοί - Θεμελίωση	78
5.1.1	Μετασχηματισμοί και Τεχνάσματα	80
5.2	Διατύπωση με Χρήση Συνάρτησης Lagrange	82
5.2.1	Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ισότητας	82
5.2.2	Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ανισότητας	86
5.2.3	Συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker	87
5.3	Σειριακή Ελαχιστοποίηση για Προβλήματα με Περιορισμούς	89
5.3.1	Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής	90
5.3.2	Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής	93
5.3.3	Η Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής	96
5.4	Η Επαυξημένη Μέθοδος με Πολλαπλασιαστές Lagrange	97
5.4.1	Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ισότητας	98
5.4.2	Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ανισότητας	104
5.4.3	Γενίκευση της Μεθόδου ALM	105
6	Άλλες Μέθοδοι Βελτιστοποίησης	109
6.1	Σύνδεση με τα Προηγούμενα-Νέες Διατυπώσεις	110
6.2	Προσομοιούμενη Ανόπτηση(Simulated Annealing)	115
6.3	Ανίχνευση με Απαγορεύσεις(Tabu Search)	117
6.4	Μέθοδος του Πολυτόπου (Simplex)	120
7	Εξελικτικοί Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης	123
7.1	Περιγραφή ενός Εξελικτικού Αλγορίθμου	125
7.1.1	Κωδικοποίηση Ελεύθερων Μεταβλητών	128
7.1.2	Τελεστές Επιλογής Γονέων	129
7.1.3	Τελεστές Διασταύρωσης	130
7.1.4	Τελεστές Μετάλλαξης	131
7.1.5	Το θεώρημα των Σχημάτων	131
7.2	Εξελικτικοί Αλγόριθμοι σε Προβλήματα Πολλών Στόχων	134

8 Υπολογισμός Παραγώγων Αντικειμενικής Συνάρτησης - Η Συζυγής Μέθοδος	139
8.1 Εισαγωγή-Σχόλια	140
8.1.1 Περί Υπολογιστικού Κόστους	142
8.1.2 Υπολογισμός Κλίσης με Θεωρία Μιγαδικών Συναρτήσεων . . .	144
8.2 Γενική Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων	148
8.3 Διακριτή Συζυγής Μέθοδος και Υπολογιστικό Κόστος	152
8.3.1 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N = 1$	155
8.3.2 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N > 1$	157
8.4 Συνεχής Συζυγής Μέθοδος	158
8.5 Ψευδο-1Δ Αντίστροφος Σχεδιασμός Αγωγού-Συζυγής Διατύπωση . .	160
8.5.1 Εξισώσεις Ροής και Αριθμητική Επίλυση	162
8.5.2 Διατύπωση του Συζυγούς Προβλήματος	164
8.5.3 Ο Αλγόριθμος Αντίστροφου Σχεδιασμού	172
8.5.4 Εφαρμογή-Υπολογιστικό Παράδειγμα	173
8.6 Συζυγής Διατύπωση για 2Δ Προβλήματα	173
8.6.1 Αντίστροφος Σχεδιασμός Αεροτομής - Θεμελίωση	174
8.6.2 Σχετικό Μαθηματικό Υπόβαθρο - Μαθηματικό Παράδειγμα . .	179
8.6.3 Φυσική Σημασία της 8.96	182
8.6.4 Περί Διακυμάνσεων Παραγώγων Δεύτερης Τάξης	183
8.6.5 Μαθηματικό Παράδειγμα - Κατανοώντας τα Βήματα προς μια Συζυγή Διατύπωση	185
8.6.6 Σχεδιασμός Αεροτομής - Συζυγείς Εξισώσεις	189
8.6.7 Παραμετροποίηση και Μεταβολές Γεωμετρικών Ποσοτήτων . . .	193
9 Παραμετροποίηση Αεροδυναμικών Μορφών	199
9.1 Κυβικές B-Splines	199
9.2 Πολυώνυμα Bézier	201
9.2.1 Η Μητρική Γραφή μιας Καμπύλης Bezier	207
9.3 Παραμετροποίηση PARSEC	210
10 Ασκήσεις	213
11 Προτεινόμενη Βιβλιογραφία	225

Πρόλογος

Το μάθημα *Μέθοδοι Αεροδυναμικής Βελτιστοποίησης* εντάχθηκε και ξεκίνησε να διδάσκεται στο Πρόγραμμα Σπουδών της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε. Μ. Πολυτεχνείου, από το ακαδημαϊκό έτος 2003 – 2004, ως μάθημα επιλογής του 7^{ου} εξαμήνου. Το ίδιο έτος τέθηκε στη διάθεση των σπουδαστών η πρώτη έκδοση του παρόντος συγγράμματος.

Η δεύτερη έκδοση γίνεται το επόμενο έτος, διορθώνοντας λάθη και εμπλουτίζοντας σε παραδείγματα και ύλη την πρώτη έκδοση. Το κυριώτερο είναι ότι η νέα έκδοση προσπάθησε να εκμεταλλευθεί την εμπειρία από το πρώτο έτος διδασκαλίας του μαθήματος. Πλέον βρισκόμαστε στην τέταρτη έκδοση του συγγράμματος, με αρκετές διορθώσεις ή επαναδιατυπώσεις σε σχέση με τις προηγούμενες εκδόσεις.

Επιπλέον υλικό για το μάθημα, συμπεριλαμβανομένων παραδειγμάτων εφαρμογής με έγχρωμα σχήματα (κάτι που δυστυχώς λείπει από την παρούσα έκδοση) βρίσκονται στους διαδικτυακούς τόπους:

<http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/kgianna/>

<http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research/>

Το μεγαλύτερο τμήμα της ύλης και σχεδόν η ολότητα των παραδειγμάτων που παρατίθενται είναι από την ερευνητική εργασία σε θέματα βελτιστοποίησης που πραγματοποιείται στο Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ. Ανάλογα με το κεφάλαιο, η συμμετοχή μελών του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ (υποψηφίων διδακτόρων και, πλέον διδακτόρων), είναι σημαντική. Σε θέματα Εξελικτικών Αλγορίθμων αναφέρεται η συμβολή των Δρ. Αλέξη Γιώτη και Δρ. Μάριου Καρακάση αλλά και των υποψηφίων διδακτόρων Γιάννη Καμπόλη και Χαρίκλειας Γεωργοπούλου. Σε θέματα συζυγών μεθόδων, αναφέρεται η συμβολή των υποψηφίων διδακτόρων Δημήτρη Παπαδημητρίου, Αλέξανδρου Ζυμάρη, Βαρβάρας Ασούτη και Θωμά Ζερβογιάννη.

Αύγουστος 2006,

Κυριάκος Γιαννάκογλου

Κεφάλαιο 1

Η Βελτιστοποίηση στην Αεροδυναμική

Στο πρώτο κεφάλαιο των σημειώσεων αυτών, πριν καν ασχοληθούμε με τις μεθόδους βελτιστοποίησης αυτές καθαυτές, θα παρουσιάσουμε εποπτικά και θα σχολιάσουμε μια σειρά από πρακτικά προβλήματα τα οποία ο γνώστης της ύλης του μαθήματος αυτού μπορεί καταρχή να αντιμετωπίσει. Τα προβλήματα αυτά είναι αντιπροσωπευτικά και έχουν επιλεγεί από διάφορες ειδικότερες επιστημονικές περιοχές, οι οποίες άπτονται της αεροδυναμικής. Σε μια πρώτη κατηγοριοποίηση, στην παρουσίαση που ακολουθεί συναντώνται προβλήματα βελτιστοποίησης από το χώρο της εξωτερικής αεροδυναμικής και το χώρο των στροβιλομηχανών. Στη συνέχεια, οι δόκιμοι όροι ‘εξωτερική’ και ‘εσωτερική’ αεροδυναμική θα χρησιμοποιούνται συχνά, με τις εφαρμογές στροβιλομηχανών να κατατάσσονται προφανώς στην εσωτερική αεροδυναμική.

Σε κανένα από τα προβλήματα με τα οποία προσπαθούμε να εισάγουμε ‘πρακτικά’ τον αναγνώστη στο αντικείμενο του μαθήματος, οι μέθοδοι βελτιστοποίησης που θα διδαχθούμε δεν επαρκούν ώστε, από μόνες τους να εντοπίσουν τη βέλτιστη λύση του προβλήματος. Η μέθοδος βελτιστοποίησης είναι το εργαλείο που ανιχνεύει το χώρο των υποψηφίων λύσεων και οδηγεί (έξυπνα και γρήγορα αν είναι μια πραγματικά καλή μέθοδος βελτιστοποίησης) στον εντοπισμό της βέλτιστης από όλες τις υποψήφιες λύσεις. Οι τελευταίες έχουν συνήθως πολλαπλά άπειρο πλήθος και, για το λόγο αυτό, η ταχύτητα της μεθόδου βελτιστοποίησης είναι σημαντικός παράγων. Όμως, κατά την ανίχνευση του χώρου των υποψηφίων λύσεων απαιτείται υποστήριξη από ένα δεύτερο υπολογιστικό εργαλείο, αυτό που θα αξιολογεί και θα βαθμολογεί ως προς τους στόχους που τέθηκαν κάθε υποψήφια λύση. Είναι γνωστό ότι, στα προβλήματα της αεροδυναμικής, η ανάλυση μιας διάταξης ή συνιστώσας ως προς τα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά της μπορεί να γίνει είτε με το πείραμα είτε με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή και των σχετικών μοντέλων. Σε ότι ακολουθεί, ας θεωρηθεί ότι οι υποψήφιες λύσεις (αρχικές, ενδιάμεσες, τελικές) θα αξιολογούνται με τη βοήθεια υπολογιστικών μοντέλων, κωδίκων–εργαλείων δηλαδή της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics, CFD). Τέτοιοι κώδικες-εργαλεία θα ονομάζονται, στη συνέχεια, *επιλύτες της ροής*. Σε δύο διαφορετικά προβλήματα, ο επιλύτης της ροής μπορεί να είναι αρκετά διαφορετικός αφού, ανάλογα με την περίπτωση θα εμπλέκει διαφορετικές

παραδοχές (λ.χ. θα αφορά διδιάστατες ή τριδιάστατες ροές, θα λαμβάνει ή όχι υπόψη τη συνεκτικότητα της ροής, θα υποθέτει ασυμπιέστη ή συμπιεστή ροή, κλπ.).

Ας γίνει εξαρχής κατανοητό ότι το μάθημα αυτό, με κανέναν τρόπο, δεν πρόκειται να υπεισέλθει σε θέματα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Αυτά αποτελούν αντικείμενο ξεχωριστού μαθήματος σε ορισμένους κύκλους του προγράμματος σπουδών του Μηχανολόγου Μηχανικού στο ΕΜΠ. Ούτε, μάλιστα, είναι προαπαιτούμενη η παρακολούθηση του αντίστοιχου μαθήματος (όμως, αναμφισβήτητα, είναι σημαντικό πλεονέκτημα για τη συνέχεια). Γενικά, όπου χρειάζεται η χρήση κωδίκων Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, (λ.χ. ανάγκη αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων ροής γύρω από μια αεροτομή ή μια πτέρυγα για να υπολογισθεί, στη συνέχεια, η άνωση ή η οπισθέλκουσά της, αυτό θα θεωρείται με τη γνωστή λογική του ‘μαύρου κουτιού’.

Έγινε προσπάθεια η παρουσίαση των παραδειγμάτων να γίνει με απλό τρόπο, δίνοντας όπου χρειάζεται αρκετές εξηγήσεις. Είναι πολύ σημαντικό να καταλάβει ο αναγνώστης τα προβλήματα αυτά, ώστε να διαμορφώσει μια πρώτη άποψη για τα προβλήματα τα οποία μπορούν να αντιμετωπίσουν οι μέθοδοι που θα διδαχθεί στη συνέχεια. Δηλαδή, στο κεφάλαιο αυτό, πρέπει να δοθεί έμφαση στο τι είδους προβλήματα καλούμαστε να αντιμετωπίσουμε, ποιοί είναι οι πιθανοί-συνηθισμένοι στόχοι και στο τι αναμένεται ως βέλτιστη λύση σε αυτά. Στα επόμενα κεφάλαια θα ασχοληθούμε με τις ίδιες τις μεθόδους βελτιστοποίησης, δίνοντας και το αναγκαίο μαθηματικό υπόβαθρο, όπου κρίνεται σκόπιμο.

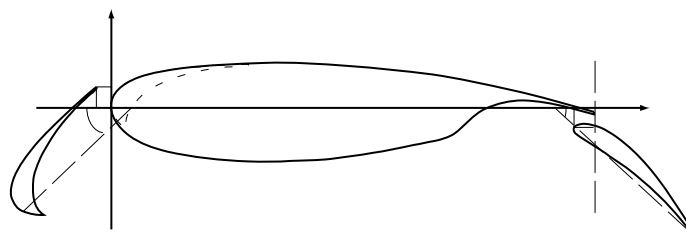
1.1 Προβλήματα Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική

1.1.1 Πρώτο Παράδειγμα

Ένα ενδεικτικό παράδειγμα από το χώρο της εξωτερικής αεροδυναμικής είναι το πρόβλημα μεγιστοποίησης του συνολικού συντελεστή άνωσης c_L που εμφανίζει μια αεροτομή τριών στοιχείων, για δεδομένες συνθήκες επ’ άπειρο ροής (στο παράδειγμά μας, ο αριθμός Mach της επ’ άπειρο ροής ίσος με 0.12 και η γωνία της επ’ άπειρο ροής ίση με 17.2°). Αφετηρία για την εύρεση της βέλτιστης λύσης αποτελεί μια υπάρχουσα αεροτομή τριών στοιχείων, με δεδομένη γεωμετρία του κυρίως σώματος και του μπροστά και πίσω ακροπτερυγίου. Τέτοιες διατάξεις χαρακτηρίζονται συχνά και ως ‘υπεραντωτικές διατάξεις’, ονομασία που αποσαφηνίζει πλήρως το λόγο χρήσης τους. Το όλο πρόβλημα μελετάται στις δύο διαστάσεις. Το ζητούμενο είναι να υπολογισθεί η σχετική θέση του μπροστά και πίσω ακροπτερυγίου ως προς το ακίνητο σώμα της αεροτομής ώστε να μεγιστοποιηθεί η άνωση του συστήματος, συνολικά. Η γεωμετρία και των τριών συνιστωσών της διάταξης (δηλαδή, τα περιγράμματά τους) παραμένει αναλλοίωτη, βλ. σχήμα 1.1. Αναφερόμενοι στο εμπρός ακροπτερύγιο, η θέση του μετράται ως προς την ακμή προσβολής του κυρίως σώματος που, όπως αναφέραμε, παραμένει ακίνητο. Όμοια, όπως είναι λογικό, η θέση του πίσω ακροπτερυγίου μετράται σχετικά με την ακμή εκφυγής του κυρίως σώματος. Επειδή, στο διδιάστατο χώρο, η σχετική θέση ενός σώματος ως προς κάποιο σημείο αναφοράς μετράται με δύο μετατοπίσεις (κατά x

και κατά y) και μια γωνία περιστροφής, ο συνολικός αριθμός ελεύθερων παραμέτρων του προβλήματος είναι 6 (3 για το εμπρός και 3 για το πίσω ακροπτερύγιο).

Όπως προαναφέρθηκε, δεν θα εστιάσουμε, προς το παρόν, στη μέθοδο βελτιστοποίησης που χρησιμοποιήθηκε και απλά θα αναφέρουμε ότι το υπολογιστικό μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για την ανάλυση της ροής (δηλαδή, το εργαλείο με το οποίο αξιολογήθηκαν οι υποψήφιες λύσεις) ήταν οι εξισώσεις Euler στις δύο διαστάσεις. Δηλαδή η ροή θεωρήθηκε ατριβής.



Σχήμα 1.1: Το πρόβλημα βελτιστοποίησης (μεγιστοποίησης της άνωσης) της υπεραντωτικής διάταξης αεροτομής τριών στοιχείων: Η διάταξη με το κυρίως σώμα, το εμπρός και το πίσω ακροπτερύγιο. Τα περιγράμματά τους δεν επιτρέπεται να μεταβάλλονται. Επιτρέπεται να μεταβάλλεται μόνο η σχετική τους θέση.



Σχήμα 1.2: Το πρόβλημα βελτιστοποίησης της διάταξης μιας αεροτομής τριών στοιχείων: Αρχική (υπάρχουσα, με διακεκομμένη γραμμή) και τελική (βέλτιστη, σύμφωνα με τον υπολογισμό που έγινε, συνεχής γραμμή) διάταξη του εμπρός και πίσω ακροπτερύγιου.

Η αρχική διάταξη έδινε συντελεστή άνωσης ίσο με περίπου 5.05. Είναι σημαντικό να τονισθεί ότι η τιμή αυτή υπολογίσθηκε με τη βοήθεια του επιλύτη ροής που προαναφέραμε, ώστε να υπάρχει συνέπεια με τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης όπου η αξιολόγηση γίνεται με τον ίδιο κώδικα. Θεωρείστε δεδομένο ότι ο επιλύτης αυτός (πρέπει να) θεωρείται αξιόπιστος, δηλαδή πρέπει να έχει προηγηθεί πιστοποίησή του με πειραματικές μετρήσεις σε πλήθος άλλων προβλημάτων (ή και στο ίδιο, αν το αντίστοιχο πείραμα είναι εφικτό). η βελτιστοποίηση υπέδειξε διάταξη με τη μέγιστη τιμή του συντελεστή άνωσης του συστήματος, ίση με περίπου 5.25, ως αποτέλεσμα της μετακίνησης και στροφής των δύο ακροπτερυγίων με τον τρόπο που απεικονίζεται στο σχήμα 1.2. Παρατηρείστε, έστω και χωρίς την παράθεση αριθμητικών τιμών, ότι οι μετακινήσεις του σχήματος 1.2 είναι πολύ μικρές αλλά παρόλα αυτά το κέρδος στην άνωση είναι εμφανές. Παρατηρείστε ακόμη ότι το πρόβλημα που παρουσιάσαμε ήταν

πρόβλημα ενός στόχου (όπως θα δούμε στη συνέχεια, τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης έχουν περισσότερους, και μάλιστα αντικρουόμενους στόχους) και δεν είχε περιορισμούς. Για πληρότητα, ας αναφερθεί ότι και για τις έξι ελεύθερες παραμέτρους του προβλήματος είχαν προκαθορισθεί τα (κάτω και άνω) όρια της επιτρεπόμενης μεταβολής τους. Ουσιαστικά, δηλαδή, υπήρχαν περιορισμοί ως προς τις δυνατές τιμές των ελεύθερων μεταβλητών, που υπαγορεύονταν από τους μηχανισμούς μετακίνησης των δύο ακροπτερυγίων.

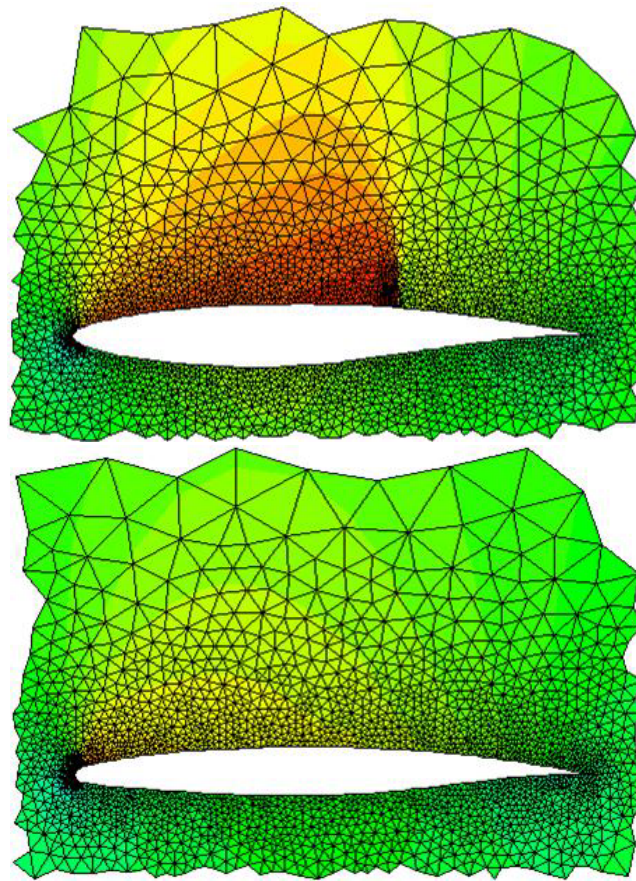
1.1.2 Δεύτερο Παράδειγμα

Το επόμενο παράδειγμα είναι και αυτό πρόβλημα ενός στόχου, μόνο που το ενδιαφέρον εστιάζεται στον επανασχεδιασμό της μορφής μιας αεροτομής, σύμφωνα με κριτήρια που εξηγούνται στη συνέχεια. Τέτοιου είδους προβλήματα συνήθως ονομάζονται ‘προβλήματα βελτιστοποίησης (αεροδυναμικής) μορφής’ (shape optimization problems). Υπάρχουσα αεροτομή, γνωστή ως *RAE 2822*, σε συνθήκες διηχητικής ροής (αριθμός Mach της επ’ άπειρο ροής ίσος με 0.73 και γωνία της επ’ άπειρο ροής ίση με 3°) εμφανίζει κρουστικό κύμα στην πλευρά υποπίεσής της. Αν και η αριθμητική προσομοίωση της ροής αυτής γίνεται με χρήση μοντέλου ατριβούς ροής (επιλύτης των εξισώσεων Euler στις δύο διαστάσεις), η παρουσία κρουστικού κύματος επαληθεύεται και με πειράματα με πραγματικό (συνεκτικό) ρευστό. Για ατριβές ρευστό, το κύμα είναι η αιτία εμφάνισης ισχυρής οπισθέλκουσας στην αεροτομή. Ο επανασχεδιασμός γίνεται με στόχο τη μείωση της τιμής του συντελεστή οπισθέλκουσας (c_D), διατηρώντας τον ίδιο συντελεστή άνωσης (c_L). Η τελευταία διατύπωση δείχνει ότι, στην πραγματικότητα, πρόκειται για πρόβλημα δύο στόχων: ελάχιστη τιμή c_D με αμετάβλητη-γνωστή τιμή c_L . Παρόλα αυτά, όπως διατυπώθηκε και στην αρχή της παραγράφου η διαχείριση και επίλυση του προβλήματος έγινε ως πρόβλημα ενός στόχου. Συγκεκριμένα, αναζητήθηκε το ελάχιστο της συνάρτησης $(c_L - c_{L,desired})^2 + bc_D$, όπου $c_{L,desired}$ είναι η γνωστή τιμή του συντελεστή άνωσης της αεροτομής αναφοράς την οποία επιθυμούμε να διατηρήσουμε. Προσέξτε την παρουσία του συντελεστή b (με τιμή $b = 10$) ο οποίος υπεισέρχεται στον ορισμό της παραπάνω συνάρτησης. Ο ρόλος του δεν είναι αμελητέος και η τιμή που του έδωσε ο μηχανικός στη συγκεκριμένη επίλυση καθορίζει τη σχετική βαρύτητα των δύο επιμέρους στόχων (ελάχιστοποίηση c_D , διατήρηση c_L). Έτσι, είναι προφανές, ότι επιλέγοντας άλλη τιμή του b , η τελική λύση θα ήταν διαφορετική.

Ο νέος σχεδιασμός έδωσε μια λεπτότερη αεροτομή, η οποία διατηρεί την ίδια τιμή άνωσης, αλλά με την εξαφάνιση του κρουστικού κύματος οδηγεί το συντελεστή οπισθέλκουσας σε πολύ χαμηλή τιμή. Η περίπτωση αναλύεται στο σχήμα 1.3. Οι δύο αεροτομές σχεδιάζονται στο ίδιο σχήμα, σχήμα 1.4, ώστε να φανεί η σχετική αλλαγή στη γεωμετρία.

1.1.3 Τρίτο Παράδειγμα

Το επόμενο πρόβλημα ασχολείται με την ίδια αεροτομή αναφοράς (την αεροτομή *RAE 2822*) αλλά η μελέτη γίνεται θεωρώντας πραγματικό, δηλαδή συνεκτικό ρευστό. Οι συνθήκες ροής στις οποίες γίνεται η βελτιστοποίηση (ο αριθμός Reynolds βασισμένος στο μήκος

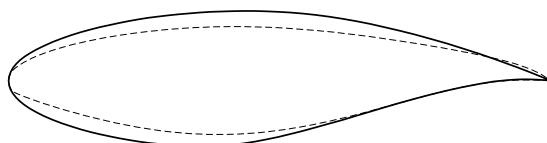


Σχήμα 1.3: Το πρόβλημα βέλτιστου επανασχεδιασμού της αεροτομής *RAE 2822*, με στόχο την ελαχιστοποίηση του c_D και τη διατήρηση του c_L , σε διηχητικές συνθήκες ροής: Πάνω φαίνεται η αρχική αεροτομή και κάτω η βέλτιστη, σύμφωνα με τον υπολογισμό που έγινε. Και στις δύο σχεδιάζονται οι ισοϋψείς του αριθμού Mach, ώστε να φανεί η εξάλειψη του κρουστικού κύματος. Το κρουστικό κύμα φαίνεται στην πλευρά υποπίεσης (πάνω πλευρά) της αρχικής αεροτομής, λίγο μετά το μέσο της χορδής, ως συγκέντρωση πολλών ισοϋψών αριθμού Mach, που δείχνουν την απότομη πτώση του αριθμού Mach ή, ισοδύναμα, την απότομη ανάκτηση στατικής πίεσης. Τα τρίγωνα που φαίνονται σχηματίζουν το υπολογιστικό πλέγμα που χρειάζεται ο επιλύτης των εξισώσεων ροής και δεν είναι αναγκαίο να εξηγηθούν περισσότερο.

χορδής της αεροτομής, ο αριθμός Mach και η γωνία ροής του αδιατάρακτου ρεύματος αέρα) είναι αντίστοιχα οι

$$Re = 6.2 \times 10^6 \quad , \quad M_\infty = 0.75 \quad , \quad \alpha_\infty = 2.734^\circ$$

ενώ, επιπλέον, επιβάλλεται σταθερό σημείο μετάβασης από τη στρωτή στην τυρβώδη περιοχή της ροής σε κάθε πλευρά της αεροτομής. Γίνεται έμμεσα αντιληπτό ότι το μοντέλο ροής (επιλύτης της ροής) που χρησιμοποιείται σε αυτή την περίπτωση είναι αυτό των εξισώσεων Navier–Stokes, αντί των εξισώσεων Euler που χρησιμοποιήθηκαν προηγουμένως. Στις συνθήκες ροής που προαναφέραμε, η υπάρχουσα αεροτομή *RAE 2822*



Σχήμα 1.4: Το πρόβλημα βέλτιστου επανασχεδιασμού της αεροτομής *RAE 2822*, με στόχο την ελαχιστοποίηση του c_D και τη διατήρηση του c_L , σε διηχητικές συνθήκες ροής: Τα περιγράμματα της αρχικής (συνεχής γραμμή) και της βέλτιστης (σύμφωνα με τον υπολογισμό που έγινε, διακεκομμένη γραμμή).

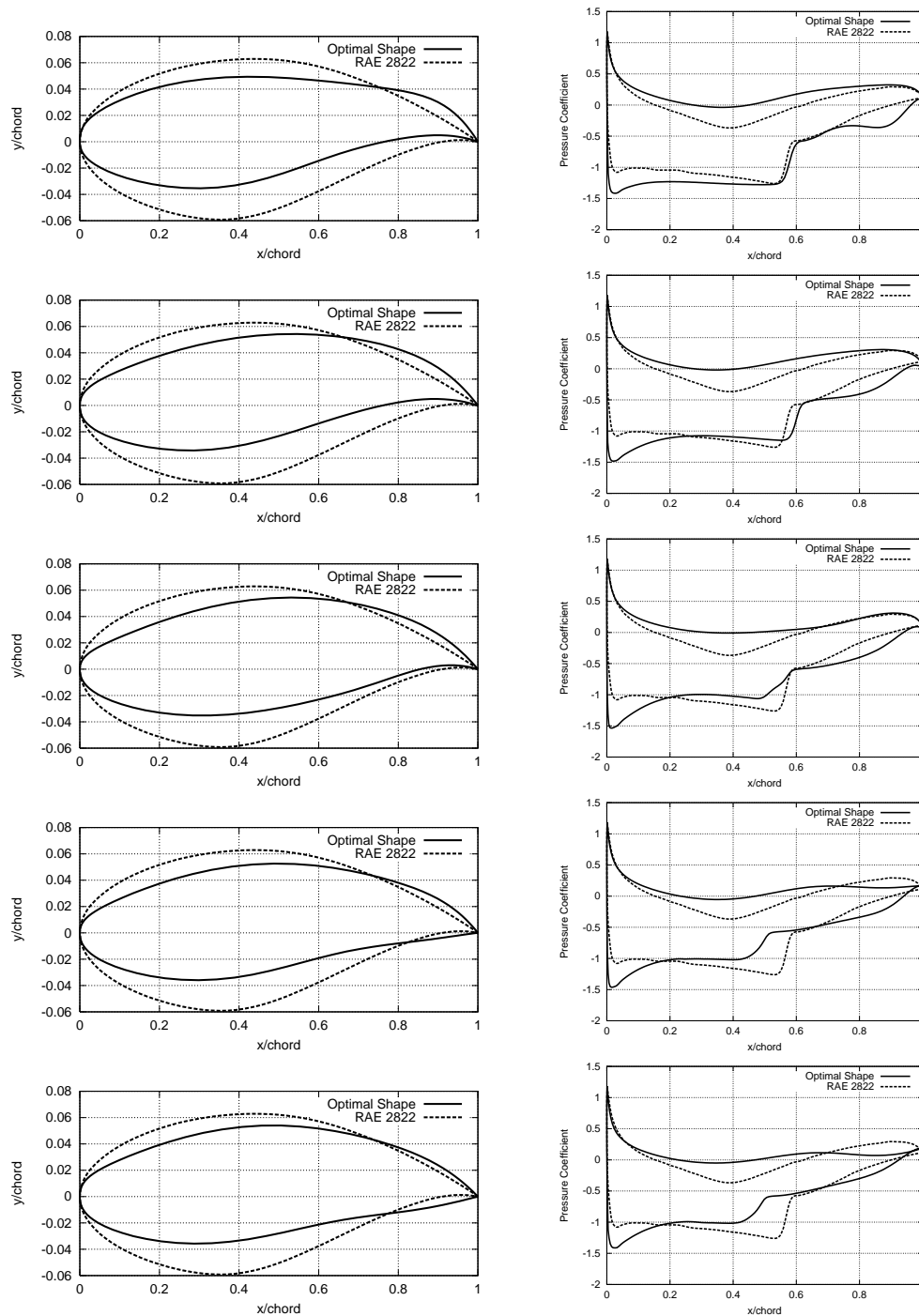
έδινε συντελεστή άνωσης $c_L = 0.748$ και $c_D = 0.0235$.

Στόχος ήταν η βελτιστοποίηση της μορφής της αεροτομής έτσι ώστε να μεγιστοποιηθεί η άνωση και να ελαχιστοποιηθεί η οπισθέλκουσα. Συγχρόνως τέθηκαν και ‘λογικοί’ γεωμετρικοί περιορισμοί ως προς το πάχος της αεροτομής. Επιθυμώντας το πρόβλημα να διατυπωθεί ως πρόβλημα ενός στόχου, ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης που χρησιμοποιήθηκε αναζήτησε αεροτομές που ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση $c_D + \frac{\beta}{c_L}$. Ο ρόλος της παραμέτρου β είναι αντίστοιχος αυτού της παραμέτρου b του προηγούμενου παραδείγματος. Χάριν εποπτείας, η βελτιστοποίηση πραγματοποιήθηκε πέντε φορές, κάθε φορά με διαφορετική τιμή του συντελεστή β . Οι τιμές που δοκιμάστηκαν ήταν οι

$$\beta = 2, \quad 10, \quad 50, \quad 200, \quad 500$$

δίνοντας κάθε φορά διαφορετική βαρύτητα στους δύο στόχους. Στο σχήμα 1.5 σχεδιάζονται οι βέλτιστες αεροτομές για κάθε τιμή της β . Για λόγους σύγκρισης, στα ίδια σχήματα παρουσιάζεται πάντα και η αεροτομή αναφοράς. Οι τιμές των συντελεστών άνωσης και οπισθέλκουσας αυτών των βέλτιστων αεροτομών δίνονται στον πίνακα 1.1.

Ούτε εδώ θα ασχοληθούμε με τη μέθοδο βελτιστοποίησης που χρησιμοποιήθηκε, σύμφωνα με την πάγια τακτική του εισαγωγικού κεφαλαίου (όπου στόχος είναι να παρουσιασθούν προβλήματα και λύσεις, ενώ οι μέθοδοι βελτιστοποίησης θα δοθούν στα επόμενα κεφάλαια). Όμως, είναι ενδιαφέρον και εύκολο να κατανοήσουμε τα αποτελέσματα του πίνακα 1.1. Αυξάνοντας την τιμή του συντελεστή β , υπολογίζονται νέες αεροτομές που δίνουν μικρότερη τιμή οπισθέλκουσας αλλά συγχρόνως και μικρότερη τιμή άνωσης. Με άλλα λόγια, ενώ βελτιώνεται η απόδοση ως προς τον ένα στόχο (c_D) συγχρόνως χειροτερεύει η απόδοση ως προς τον άλλο (c_L). Η συμπεριφορά αυτή εξηγείται από τον τρόπο που χρησιμοποιείται ο β στη συνάρτηση που επιλέχθηκε να ελαχιστοποιηθεί. Αν επιπλέον παρουσιασθούν γραφικά τα αποτελέσματα του πίνακα 1.1, τότε προκύπτει το σχήμα 1.6. Παρατηρώντας τα πέντε σημεία του σχήματος και με βάση όσα ήδη συζητήθηκαν, φαίνεται ένα σχηματισμός από πιθανές λύσεις στο αρχικό πρόβλημα των δύο στόχων. Ανεξάρτητα του πως προήλθαν (με ποιά, δηλαδή, τιμή του β κατά το μετασχηματισμό του προβλήματος των δύο στόχων σε ένα πρόβλημα ενός στόχου), παρατηρούμε ότι τα πέντε σημεία του σχήματος 1.6 έχουν όλα την ίδια ιδιότητα: κανένα από αυτά δεν υπερτερεί οποιουδήποτε άλλου ως προς όλους (και τους δύο) στόχους. Ο μηχανικός που, ενδεχομένως, θα κληθεί να διαλέξει μια από τις



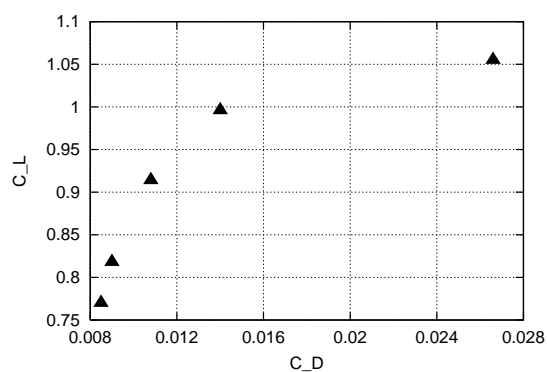
Σχήμα 1.5: Το πρόβλημα βέλτιστου επανασχεδιασμού της αεροτομής *RAE 2822*, σε συνθήκες συνεκτικής ροής: Οι βέλτιστες αεροτομές που υπολογίσθηκαν σχεδιάζονται ταυτόχρονα με την αεροτομή αναφοράς (αριστερά) ενώ δίνονται και οι κατανομές πίεσης γύρω από αυτές (δεξιά), όπως προέκυψαν από τους υπολογισμούς ενός στόχου. Συγκεκριμένα, από πάνω προς κάτω, κάθε σειρά σχήματος αντιστοιχεί κατά σειρά σε $\beta = 2$, $\beta = 10$, $\beta = 50$, $\beta = 200$ και $\beta = 500$.

πέντε βέλτιστες λύσεις, πρέπει να αποφασίσει πρώτα ποιός από τους δύο στόχους (το μικρότερο c_D ή το μεγαλύτερο c_L) είναι αυτός που τον ενδιαφέρει περισσότερο. Δηλαδή χρειάζεται μια επιπλέον απόφαση (decision), αυτή της ιεράρχησης των στόχων, η οποία δεν αναφέρθηκε στον ορισμό του προβλήματος.

Μια διάταξη βέλτιστων λύσεων, όπως αυτή του σχήματος 1.6 και με την ιδιότητα που προηγουμένως αναφέρθηκε, αποκαλείται συνήθως 'μέτωπο βέλτιστων λύσεων κατά Pareto' (optimal Pareto front).

β	c_D	c_L
2	0.0266	1.055
10	0.0140	0.996
50	0.0108	0.914
200	0.0090	0.818
500	0.0085	0.770

Πίνακας 1.1: Το πρόβλημα βέλτιστου επανασχεδιασμού της αεροτομής *RAE 2822*, σε συνθήκες συνεκτικής ροής: Τιμές των συντελεστών άνωσης και οπισθέλκουσας των βέλτιστων αεροτομών που υπολογίστηκαν, για διαφορετικές τιμές του β .



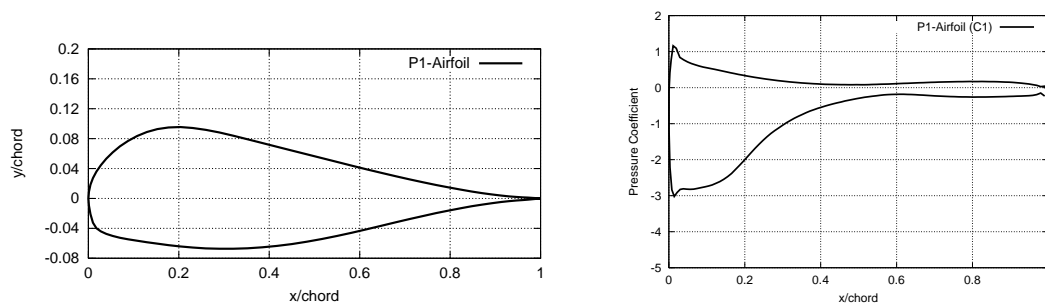
Σχήμα 1.6: Το πρόβλημα βέλτιστου επανασχεδιασμού της αεροτομής *RAE 2822*, σε συνθήκες συνεκτικής ροής: Συνολική παρουσίαση αποτελεσμάτων από πέντε υπολογισμούς βελτιστοποίησης με έναν στόχο. Εισαγωγή στην έννοια του μέτωπου λύσεων Pareto.

Είναι γνωστό ότι όλα τα πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης στην επιστήμη του μηχανικού, άρα και στην περιοχή της αεροδυναμικής, εμπλέκουν περισσότερους από έναν στόχους και, μάλιστα, αντικρουόμενους. Το παράδειγμα που μόλις συζητήθηκε υποδεικνύει τους δύο τρόπους να αντιμετωπισθούν τέτοια προβλήματα. Ο απλός τρόπος είναι συνδυάζοντας όλους τους στόχους σε έναν, εισάγοντας πολλαπλασιαστές κατά την κρίση του μηχανικού, και επιλύοντας τελικά πρόβλημα ενός στόχου. Πλεονέκτημα αυτού του τρόπου αντιμετώπισης είναι ότι καταλήγουμε να χρησιμοποιήσουμε οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης ενός στόχου, από τις πολλές που θα γνωρίσουμε στη συνέχεια. Αντίθετα, μειονέκτημα είναι ότι η λύση που θα υπολογισθεί και θα χαρακτηριστεί ως βέλτιστη αντιστοιχεί στους συντελεστές που χρησιμοποιήθηκαν και άρα

στερείται γενικότητας. Στον αντίποδα αυτού του τρόπου αντιμετώπισης βρίσκονται μέθοδοι που υπολογίζουν όχι μια λύση αλλά το μέτωπο των βέλτιστων κατά Pareto λύσεων. Πρόκειται για μεθόδους οι οποίες χειρίζονται το πρόβλημα πραγματικά ως πρόβλημα βελτιστοποίησης πολλών στόχων.

1.1.4 Τέταρτο Παράδειγμα

Ακολουθεί ένα παράδειγμα σχεδιασμού αεροτομής πτέρυγας αεροσκάφους με βέλτιστη συμπεριφορά σε δύο διαφορετικά σημεία λειτουργίας: ενός σε συνθήκες απογείωσης, με στόχο τη μεγιστοποίηση του συντελεστή άνωσης (ο 'λογικός' στόχος για συνθήκες απογείωσης) και ενός δεύτερου σε συνθήκες ευθείας πτήσης με στόχο την ελαχιστοποίηση του συντελεστή οπισθέλκουσας (επίσης 'λογικός' στόχος σε συνθήκες ευθείας πτήσης). Και εδώ το πρόβλημα ορίζεται και αντιμετωπίζεται στις δύο διαστάσεις.



Σχήμα 1.7: Το πρόβλημα σχεδιασμού αεροτομής πτέρυγας αεροσκάφους με βέλτιστη συμπεριφορά σε δύο διαφορετικά σημεία λειτουργίας: Σχεδιάζεται η αεροτομή αναφοράς (συντομογραφικά *P1*) που θεωρείται ότι έχει την επιθυμητή αεροδυναμική συμπεριφορά στις συνθήκες ροής *C1* (συνθήκες απογείωσης).

Για λόγους πληρότητας, παραθέτουμε τις συνθήκες ροής και εισάγουμε τις συντομογραφίες *C1* και *C2*. Προσέξτε τον πολύ χαμηλό αριθμό Mach αλλά και τη μεγάλη γωνία ροής κατά την απογείωση αλλά και τον αρκετά υψηλό αριθμό Mach και τη σχεδόν μηδενική γωνία ροής κατά την ευθεία πτήση.

1. Συνθήκες ροής κατά την απογείωση (Συνθήκες *C1*):

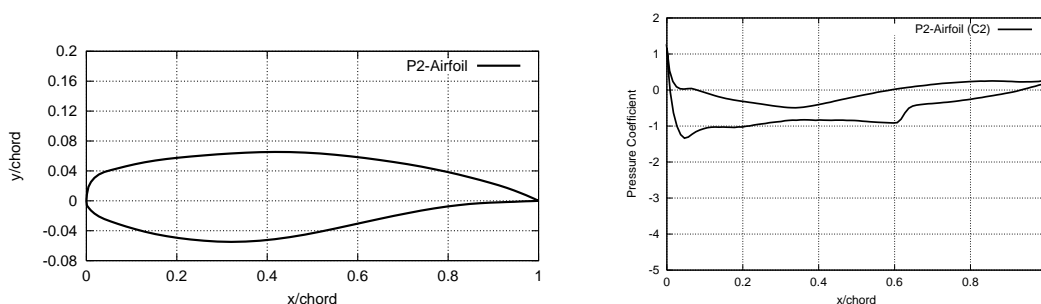
$$Re = 5.0 \times 10^6 \quad , \quad M_\infty = 0.20 \quad , \quad \alpha_\infty = 10.8^\circ$$

2. Συνθήκες ροής κατά την ευθεία πτήση (Συνθήκες *C2*):

$$Re = 10.0 \times 10^6 \quad , \quad M_\infty = 0.77 \quad , \quad \alpha_\infty = 1.0^\circ$$

Η υπολογιστική ρευστοδυναμική καλείται να διαδραματίσει πρωτεύοντα ρόλο και σε αυτό το πρόβλημα σχεδιασμού βέλτιστης αεροδυναμικής μορφής.

Στο παράδειγμα αυτό, ο σχεδιασμός ξεκινά έχοντας ως αναφορά δύο αεροτομές-πρότυπα, μια με καλή συμπεριφορά κατά την απογείωση και μια άλλη με αντίστοιχα καλή συμπεριφορά κατά την ευθεία πτήση. Εύκολα γίνεται αντιληπτό ότι κάθε μια από τις δύο, ενώ είναι βέλτιστη στο ένα σημείο λειτουργίας, υστερεί δραματικά στο άλλο. Ιδεατός σχεδιασμός θα ήταν να βρεθεί μια αεροτομή που να συμπεριφέρεται βέλτιστα και στα δύο σημεία λειτουργίας. Κάτι τέτοιο είναι μη-υλοποιήσιμο αφού η βέλτιστη λειτουργία σε κάθε στόχο απαιτεί αντικρουόμενα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της αεροτομής. Έτσι, αναζητείται αεροτομή που θα 'συμβιβάζει' με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τους δύο στόχους.

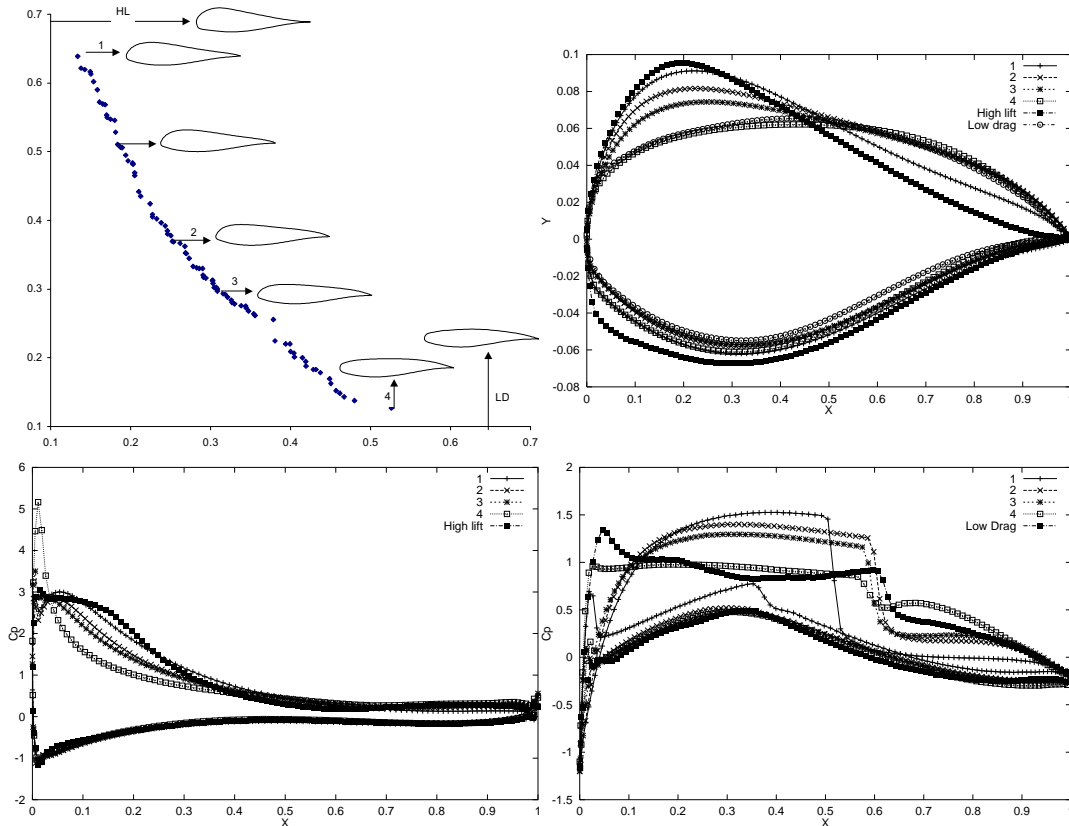


Σχήμα 1.8: Το πρόβλημα σχεδιασμού αεροτομής πτέρυγας αεροσκάφους με βέλτιστη συμπεριφορά σε δύο διαφορετικά σημεία λειτουργίας: Σχεδιάζεται η αεροτομή αναφοράς (συντομογραφικά $P2$) που θεωρείται ότι έχει την επιθυμητή αεροδυναμική συμπεριφορά στις συνθήκες ροής $C2$ (συνθήκες ευθείας πτήσης).

Με το παράδειγμα αυτό, θα γνωρίσουμε έναν διαφορετικό τρόπο να θέτουμε στόχους κατά το σχεδιασμό μιας αεροτομής. Βεβαίως, ως στόχο θα μπορούσαμε να θέσουμε είτε επιθυμητές τιμές χαρακτηριστικών ποσοτήτων (c_D , c_L) ή να αναζητήσουμε την ακραία τιμή (μέγιστο ή ελάχιστο) κάποιων από αυτούς. Αντί αυτού, εδώ προκαθορίζεται από το μηχανικό-σχεδιαστή μια επιθυμητή κατανομή πίεσης (ή συντελεστή πίεσης) στο περίγραμμα της αεροτομής για τις συνθήκες ροής που μας ενδιαφέρουν και αναζητάται η αεροτομή εκείνη που, στις ίδιες συνθήκες ροής, δημιουργεί την ίδια κατανομή πίεσης. Τέτοια προβλήματα ονομάζονται **προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού** (inverse design problems). Το κατά πόσο μια αεροτομή προσεγγίζει το στόχο που τέθηκε αποτιμάται από την απόκλιση ανάμεσα στην κατανομή πίεσης γύρω από αυτήν.

Είναι χρήσιμο ένα πρώτο σχόλιο ώστε να γίνει κατανοητή η ιδέα του αντίστροφου σχεδιασμού. Γνωρίζουμε όλοι ότι (λ.χ. για συνθήκες ατριβούς ροής, όπου όλες οι ασκούμενες στην αεροτομή δυνάμεις οφείλονται στην κατανομή πίεσης) αν γνωρίζουμε το σχήμα της αεροτομής και την κατανομή πίεσης γύρω από αυτή, είναι θέμα ολοκλήρωσης ώστε να υπολογισθεί η τιμή του συντελεστή άνωσης. Προφανώς, μπορούν να υπάρξουν πολλές (άπειρες, θεωρητικά) κατανομές πίεσης που να δίνουν την ίδια τιμή c_L . Άρα, το να ορίζεται ως στόχος μια επιθυμητή κατανομή πίεσης στο περίγραμμα της αεροτομής είναι πολύ περισσότερο περιοριστικό από οτιδήποτε άλλο. Επίσης, σε συνθήκες συνεκτικής ροής, το να επιβάλλεται επιθυμητή κατανομή πίεσης γύρω από

την αεροτομή (ουσιαστικά, δηλαδή, η κατανομή ταχύτητας γύρω από αυτή – η αντιστοιχισή είναι ευθεία, τουλάχιστον στην ασυμπίεστη ροή) σημαίνει πολλά περισσότερα: ο σχεδιαστής ελέγχει λ.χ. τις τοπικές επιβραδύνσεις της ροής και, συνεπώς, ελέγχει ενδεχόμενες αποκολλήσεις τις ροής και τις συνεπαγόμενες απώλειες.



Σχήμα 1.9: Το πρόβλημα σχεδιασμού αεροτομής πτέρυγας αεροσκάφους με βέλτιστη συμπεριφορά σε δύο διαφορετικά σημεία λειτουργίας: Το πάνω-αριστερά σχήμα δείχνει το μέτωπο των βέλτιστων κατά Pareto λύσεων που υπολογίστηκε με μια μέθοδο βελτιστοποίησης. Κάθε κουκίδα αντιπροσωπεύει μια βέλτιστη λύση του μετώπου. Οι δύο άξονες δείχνουν ποσοτικά την ικανοποίηση των στόχων μας. Το πρόβλημα αντιμετωπίζεται ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης κάθε συνάρτησης – στόχου. Ο οριζόντιος άξονας δείχνει την απόκλιση από την επιθυμητή συμπεριφορά στις συνθήκες $P1$. Ο κατακόρυφος άξονας δείχνει την απόκλιση από την επιθυμητή συμπεριφορά στις συνθήκες $P2$. Άρα, θεωρητικά, βέλτιστη θα ήταν η λύση-αεροτομή που αντιστοιχεί στο $(0,0)$ του διαγράμματος. Προφανώς, τέτοια λύση δεν υπάρχει. Σχεδιάζονται επιλεκτικά ορισμένες αεροτομές από αυτές που αποτελούν το μέτωπο και ο αναγνώστης μπορεί να παρακολουθήσει την αλλαγή σχήματος μεταξύ των δύο ακραίων καταστάσεων. Ορισμένες αεροτομές (σημειούμενες με δείκτες 1, 2, 3, 4 σχεδιάζονται ευκρινώς στο πάνω-δεξιά σχήμα ενώ στην κάτω σειρά του σχήματος δίνονται οι κατανομές του συντελεστή πίεσης που υπολογίζονται σε αυτές στις συνθήκες $P1$ (αριστερά) και $P2$ (δεξιά).

Τα σχήματα 1.7 και 1.8 απεικονίζουν τις δύο αεροτομές αναφοράς. Στα ίδια σχήματα φαίνεται και η κατανομή πίεσης που η αναπαραγωγή της τίθεται ως στόχος της

βελτιστοποίησης σε κάθε σετ συνθηκών ροής.

Επιλύοντας το πρόβλημα ως πραγματικό πρόβλημα δύο στόχων, αυτό που προκύπτει είναι ένα μέτωπο βέλτιστων κατά Pareto λύσεων. Το μέτωπο σχεδιάζεται και σχολιάζεται στο σχήμα 1.9. Ένας απλός τρόπος να αλληλοσυσχετίσουμε τις προκύπτουσες λύσεις του μετώπου είναι ως ‘κλιμακωτούς συμβιβασμούς’ ως προς τους δύο στόχους. Δηλαδή, κινούμενοι από κάποια σε μια άλλη λύση του μετώπου, θυσιάζουμε απόδοση ως προς τον ένα στόχο για να αυξήσουμε την απόδοση ως προς τον άλλο.

1.1.5 Πέμπτο Παράδειγμα

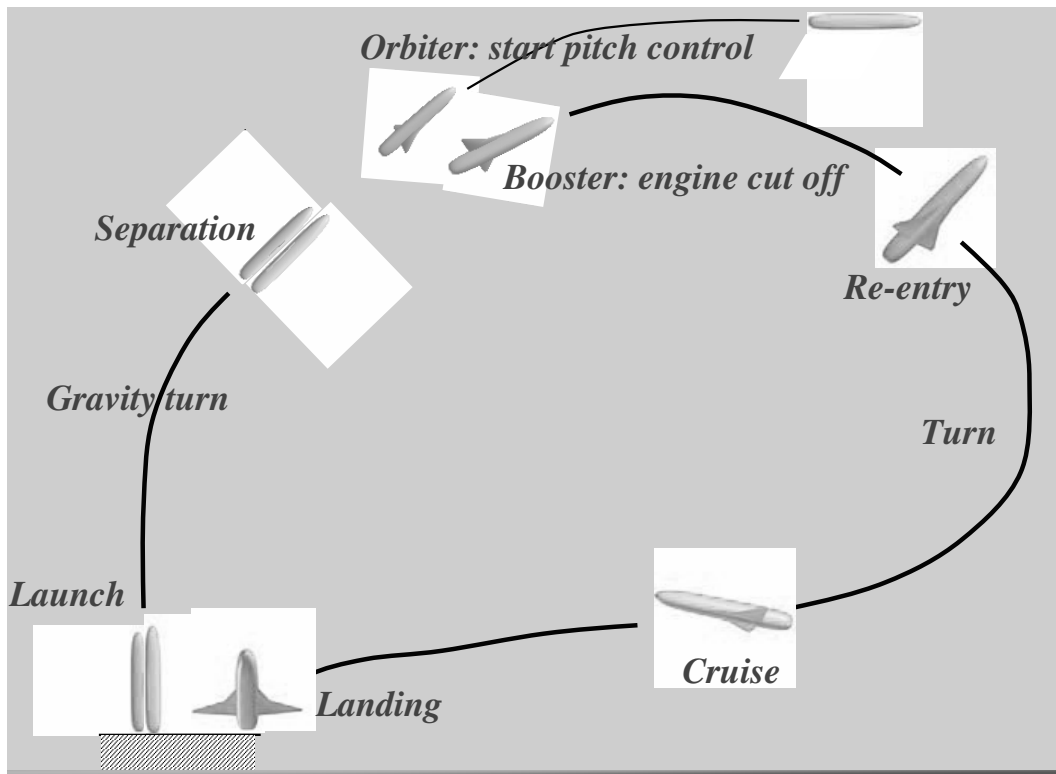
Το επόμενο παράδειγμα αναφέρεται στο βέλτιστο σχεδιασμό της πτέρυγας ενός επαναχρησιμοποιήσιμου διαστημικού οχήματος εκτόξευσης (Reusable Launch Vehicle, θα αναφερόμαστε σε αυτό με τη συντομογραφία RLV). Η δυσκολία και το υπολογιστικό φορτίο που απαιτείται για την εφαρμογή αυτή είναι κατά πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερα αυτών των προηγούμενων εφαρμογών.

Η εφαρμογή σχετίζεται με τους τρόπους (άρα και το κόστος) εκτόξευσης τηλεπικοινωνιακών δορυφόρων που τίθενται σε τροχιά γύρω από τη γή. Η συνήθης διαδικασία προβλέπει τη χρήση ενός πυραύλου εκτόξευσης (rocket system, booster) που φέρει και θέτει σε τροχιά γύρω από τη γή το δορυφόρο (orbiter). Η κλασική διαδικασία προβλέπει την καταστροφή ή τη θέση σε τροχιά γύρω από τη γή (διαστημικό σκουπίδι) του πυραύλου εκτόξευσης, μετά την αποπεράτωση της αποστολής του. Η διαδικασία αυτή είναι πολυέξοδη, γιατί το κόστος του μίας-χρήσης πυραύλου εκτόξευσης είναι υψηλό. Αντί αυτού, τα τελευταία χρόνια, χώρες όπως κυρίως οι ΗΠΑ και η Ιαπωνία ασχολούνται ερευνητικά με την ιδέα ενός επαναχρησιμοποιήσιμου διαστημικού οχήματος εκτόξευσης, του RLV. Η δυνατότητα ασφαλούς επαναπροσγείωσης του οχήματος εκτόξευσης και επαναχρησιμοποίησής του πολλές φορές είναι ένας καλός τρόπος να μειωθεί δραματικά το κόστος τέτοιων αποστολών.

Στην εφαρμογή που θα μελετήσουμε και θα σχολιάσουμε στη συνέχεια (η οποία έγινε από το Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ σε συνεργασία με το Ιαπωνικό Πανεπιστήμιο του Tohoku, χρησιμοποιώντας συμπληρωματικό λογισμικό αλλά και πανίσχυρα πολυεπεξεργαστικά υπολογιστικά συστήματα του Ιαπωνικού Πανεπιστημίου) ασχολείται με το σχεδιασμό της βέλτιστης μορφής της πτέρυγας ενός τέτοιου RLV. Έχει τεθεί ως στόχος η μεταφορά τηλεπικοινωνιακού δορυφόρου βάρους 10 τόνων και η θέση του σε περιστροφή γύρω από τη γή. Έχει προαποφασισθεί ο τρόπος πρόωσης του RLV (liquid propellant rocket engine), ότι θα πραγματοποιεί κατακόρυφη απογείωση και οριζόντια προσγείωση. Η μορφή της ατράκτου του παραμένει σταθερή, με ένα απλό κυλινδρόμορφο σχήμα, αφού ο ρόλος της (περιέχει το σύστημα πρόωσης μαζί με το σχετικό καύσιμο) είναι πραγματικά δευτερεύων. Είναι γνωστό και αποδεδειγμένο πειραματικά ότι μικρές αλλαγές στο σχήμα της έχουν ασήμαντη επίπτωση στα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά του RLV, όπου όλο το ενδιαφέρον δίνεται στο σωστό (βέλτιστο) σχεδιασμό της πτέρυγας.

Το σχήμα 1.10 δείχνει εποπτικά τη συνολικά διαδικασία πτήσης του RLV, από την απογείωσή του μέχρι την προσγείωσή του, με σημαντικότερους ενδιάμεσους σταθμούς την αποκόλληση του τηλεπικοινωνιακού δορυφόρου και την επανείσοδό του στη γήϊνη

ατμόσφαιρα.



Σχήμα 1.10: Σχεδιασμός RLV με βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά: Εποπτική απεικόνιση της συνολικής πορείας πτήσης του RLV, από την απογείωσή του μέχρι την προσγείωσή του.

Σε ένα πολυσύνθετο πρόβλημα βελτιστοποίησης, όπως αυτό, είναι πολύ βασικό να κατανοήσουμε τι ακριβώς πρέπει να βρισκείται στη διάθεση των μηχανικών που θα προσπαθήσουν να το επιλύσουν. Έτσι, απαιτούνται:

1. Η γεωμετρική μοντελοποίηση, η **παραμετροποίηση** δηλαδή της πτέρυγας του RLV, το βέλτιστο σχήμα της οποίας αναζητάται. Η παραμετροποίηση θα αποσαφηνίσει τις ελεύθερες παραμέτρους του προβλήματος στις οποίες πρέπει να αποδοθούν τελικά τιμές που να εξασφαλίζουν βέλτιστη αεροδυναμική συμπεριφορά (βλ. επόμενο σημείο).
2. Οι **στόχοι του προβλήματος**, οι οποίοι θα λάβουν τη μορφή μιας ή περισσότερων **αντικειμενικών συναρτήσεων** των οποίων αναζητούμε το ακρότατο (τη μέγιστη ή ελάχιστη τιμή κατά περίπτωση, που αντιστοιχούν στην αεροδυναμικά βέλτιστη λύση (υπενθυμίζεται ότι ο σχεδιασμός γίνεται μόνο με αεροδυναμικά κριτήρια και οτιδήποτε άλλο –λ.χ. κριτήρια αντοχής– δεν μας απασχολούν).
3. Το **λογισμικό αξιολόγησης** κάθε υποψήφιας λύσης, ώστε αποδίδεται μια **τιμή καταλληλότητας** ανάλογα με το βαθμό που ικανοποιεί τους στόχους που προηγούμενα τέθηκαν.

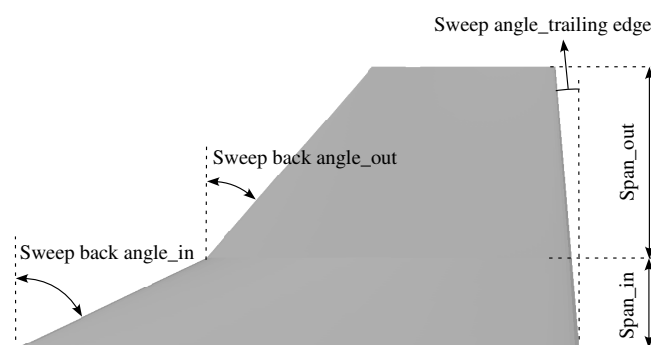
4. Το **λογισμικό βελτιστοποίησης**, το δηλαδή εργαλείο–αλγόριθμο–πρόγραμμα με το οποίο θα σαρωθεί ο χώρος λύσεων ώστε να βρεθεί η βέλτιστη μορφή πτέρυγας.

Τα προηγούμενα τέσσερα θέματα θα απαντηθούν στη συνέχεια, σύντομα και με βάση το αναμενόμενο επίπεδο γνώσεων από τα προπτυχιακά μαθήματα του σπουδαστή:

1. Η παραμετροποίηση μιας τριδιάστατης πτέρυγας είναι, από τη φύση της, μια πολύπλοκη διαδικασία. Συνήθης, αλλά όχι αποκλειστικός τρόπος, να αντιμετωπισθεί είναι να μοντελοποιηθούν ξεχωριστά οι τρεις επιμέρους ‘συνιστώσες’ του τριδιάστατου σώματος (α) η μορφή της προβολής της πτέρυγας στο οριζόντιο επίπεδο (planform), (β) η διαμήκης στρέβλωση ή απόκλιση της από το οριζόντιο επίπεδο και (γ) η κατανομή πάχους στην επιφάνεια που όρισαν οι δύο προηγούμενες ‘συνιστώσες’. Ο σχεδιαστής μιας τέτοιας πτέρυγας αποφασίζει εκ των προτέρων ποιές από τις τρεις ‘συνιστώσες’ θα αποτελέσουν αντικείμενο–εξαγόμενο του σχεδιασμού του ενώ για τις υπόλοιπες μπορεί να προκαθορίσει συγκεκριμένο γεωμετρικό μοντέλο.

Στη μελέτη που σχολιάζεται εδώ όλες οι ‘συνιστώσες’ αφέθηκαν ελεύθερες να προκύψουν από τη βελτιστοποίηση. Γίνεται εύκολα κατανοητό ότι, η απόφαση αυτή, αφενός μεν δίνει πλήρη ελευθερία στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης να εντοπίσει την πραγματικά βέλτιστη λύση (σύμφωνα, πάντα, με τους περιορισμούς και τα γεωμετρικά μοντέλα που υιοθετήθηκαν), αφετέρου δε αυξάνει σημαντικά τον αριθμό των ελεύθερων παραμέτρων του προβλήματος βελτιστοποίησης (στις περισσότερες μεθόδους βελτιστοποίησης, αυτή η αύξηση συνεπάγεται πολύ μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος). Η κάτοψη που επιλέχθηκε είναι γεωμετρικά απλή και φαίνεται στο σχήμα 1.11. Αποτελείται από τη σύνθεση δύο τραπεζίων και είναι η συνήθης κάτοψη πτερύγων για οχήματα υπερηχητικής πτήσης. Το περίγραμμα κάτοψης της πτέρυγας αποτελείται από ευθύγραμμα τμήματα. Η ακμή προσβολής παρουσιάζει ενδιάμεση αλλαγή στην κλίση της, στοιχείο που είναι πλεονεκτικό για την αύξηση της άνωσης, ενώ η ακμή εκφυγής είναι ενιαίο ευθύγραμμο τμήμα. Στο ίδιο σχήμα φαίνονται και οι πέντε (μόνο!) ελεύθερες μεταβλητές (μεταβλητές σχεδιασμού, design variables) που καθορίζουν την κάτοψη της πτέρυγας. Το πραγματικό σχήμα της μέσης επιφάνειας της πτέρυγας (στην οποία θα υπερτεθεί κατανομή πάχους ώστε να σχηματισθεί η πτέρυγα) καθορίζουν τρεις καμπύλες Bezier τοποθετημένες στη βάση (τομή με την άτρακτο), στο σημείο του εκπετάσματος όπου αλλάζει η κλίση της ακμής προσβολής και στο ακροπτερύγιο. Κάθε καμπύλη Bezier ορίζεται με 4 σημεία ελέγχου. Η μέση επιφάνεια της πτέρυγας σχηματίζεται συνδέοντας εγκάρσια τις τρεις καμπύλες Bezier με πολυώνυμα splines, τα οποία εισάγουν επιπλέον βαθμούς ελευθερίας. Τέλος, η κατανομή πάχους της πτέρυγας σχηματίζεται με πολυώνυμα splines, οριζόμενα στις τρεις τομές όπου προηγουμένως ορίστηκαν και οι τρεις καμπύλες Bezier.

Συνοψίζοντας, η πτέρυγα ουσιαστικά σχηματίστηκε από μια γεωμετρικά απλή κάτοψη, την υπέρθεση αεροτομών σε τρεις τομές της και τη σύνδεση των παραπάνω, κατά το εκπέτασμα της πτέρυγας, με κατάλληλα πολυώνυμα. Ο συνολικός



Σχήμα 1.11: Σχεδιασμός RLV με βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά: Γεωμετρικό μοντέλο για την κάτοψη της πτέρυγας, όπου φαίνονται οι πέντε σχετικές μεταβλητές σχεδιασμού.

αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού που, με τον τρόπο αυτό, ορίζονται είναι 71. Πρακτικά, ο αριθμός αυτός είναι μεγάλος, αν και σε προβλήματα σχεδιασμού τριδιάστατων σωμάτων στην αεροδυναμική μπορούμε να συναντήσουμε και αρκετά μεγαλύτερο πλήθος αγνώστων.

2. Οι στόχοι του προβλήματος βελτιστοποίησης εμπλέκουν τις τρεις διακριτές φάσεις της πτήσης του, όπως χαρακτηριστικά σημειώνονται στο σχήμα 1.10. Είναι επιθυμητό το RLV να έχει βέλτιστη συμπεριφορά στο υπερηχητικό τμήμα της πτήσης του, στο διηχητικό τμήμα που ακολουθεί την είσοδο στη γήινη ατμόσφαιρα αλλά και στο υποηχητικό τμήμα πτήσης που χαρακτηρίζει την προσγείωση. Ανάμεσα σε πολλούς δυνατούς τρόπους να ποσοτικοποιηθούν αυτοί οι στόχοι (όπου, ανάλογα με τον τρόπο, θα προέκυπτε διαφορετικός αριθμός μεταβλητών σχεδιασμού) επιλέχθηκε ένας που καθόρισε και τους παρακάτω τέσσερις στόχους του προβλήματος:

- Πρώτος στόχος είναι η ελαχιστοποίηση της μετατόπισης του αεροδυναμικού κέντρου της πτέρυγας κατά τη μετάβαση από υπερηχητικές σε διηχητικές συνθήκες πτήσης. Με μικρή αυτή τη μετατόπιση, οι μηχανισμοί ελέγχου (που ούτως ή άλλως θα απαιτηθούν) είναι μικρότερης κλίμακας και, κυρίως, μικρότερου βάρους.
- Δεύτερος στόχος είναι η ελαχιστοποίηση της τιμής του συντελεστή ροπής πρόνευσης (c_M , pitching moment) στις διηχητικές συνθήκες πτήσης. Και αυτό γιατί είναι γνωστό ότι πτέρυγες όπως αυτή που σχεδιάζεται (στη βιβλιογραφία αναφέρονται ως πτέρυγες σχήματος βέλους, arrow wings) έχουν μεν καλή αεροδυναμική απόδοση αλλά εμφανίζουν υψηλές τιμές του συντελεστή c_M .
- Τρίτος στόχος είναι η ελαχιστοποίηση της τιμής του συντελεστή οπισθέλκουσας (c_D) στις διηχητικές συνθήκες πτήσης. Με ανάλυση της πτήσης του RLV, προκύπτει ότι η πτήση σε διηχητικές συνθήκες αποτελεί μείζον τμήμα

αυτής, άρα αν ελαχιστοποιηθεί το c_D στις συνθήκες αυτές θα αυξηθεί και το βεληνεκές της πτήσης.

- Τέταρτος και τελευταίος στόχος είναι να μεγιστοποιηθεί η άνωση c_L στις συνθήκες προσγείωσης (συνθήκες υποηχητικής πτήσης). Η πρακτική σημασία του στόχου αυτού είναι ουσιώδης αφού έτσι γίνεται εφικτή η προσγείωση σε διαδρόμους μικρού μήκους (λ.χ. σε μικρά νησιά).

Με βάση την εμπειρία από τα προηγούμενα προβλήματα πολλών στόχων, το αποτέλεσμα της βελτιστοποίησης μπορεί να παρουσιασθεί ως ένα μέτωπο Pareto στον τετραδιάστατο χώρο. Είναι δε, εξ αρχής, εμφανής η δυσκολία παρουσίασης των αποτελεσμάτων σε κάθε περίπτωση όπου οι στόχοι είναι περισσότεροι από τρεις.

3. Σε ένα τέτοιο πρόβλημα, το λογισμικό αξιολόγησης υποψηφίων λύσεων είναι όντως πολύπλοκο και υπολογιστικά χρονοβόρο. Μπορούμε να κατατάξουμε το λογισμικό που θα χρειασθεί σε δύο κατηγορίες: (α) λογισμικό που θα υπολογίζει την τροχιά του RLV και (β) λογισμικό που, σε κάθε θέση, θα αναλύει τη ροή γύρω από το RLV, για τις τοπικές συνθήκες πτήσης. Το λογισμικό (β) είναι αυτό της αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων Navier–Stokes γύρω από το RLV, όπως θα σχηματίζεται με αμετάβλητο σχήμα ατράκτου και την εκάστοτε δοκιμαζόμενη μορφή πτέρυγας. Στο λογισμικό (β) συμπεριλαμβάνεται οτιδήποτε χρειάζεται η επίλυση αυτή, όπως λ.χ. λογισμικό για τη γένεση υπολογιστικού πλέγματος, αλλά με αυτά δεν θα ασχοληθούμε στο μάθημα αυτό.

Γίνεται εύκολα κατανοητό ότι το (α) και το (β) είναι αλληλοεξαρτώμενα, με την έννοια ότι δεδομένα για την εκτέλεση του (α) προέρχονται από τη χρήση του λογισμικού (β) και αντιστρόφως. Έτσι, για να υπολογισθεί η τροχιά πτήσης, χρειάζονται τα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά του οχήματος (c_L , c_D , c_M) σε κάθε θέση και αυτά υπολογίζονται με χρήση του επιλύτη των εξισώσεων Navier–Stokes γύρω από το RLV. Από την άλλη πλευρά, για να λυθούν αριθμητικά οι εξισώσεις Navier–Stokes γύρω από το RLV χρειάζονται οι συνθήκες της επ' άπειρο ροής αλλά αυτές είναι εξαγόμενο του λογισμικού (α), κοκ. Με την παραπάνω εμπλοκή των δύο επιλυτών φαίνεται ότι ο υπολογιστικός χρόνος ανά υποψήφια λύση αγγίζει απαγορευτικά όρια, ακόμη και με παράλληλους υπερυπολογιστές.

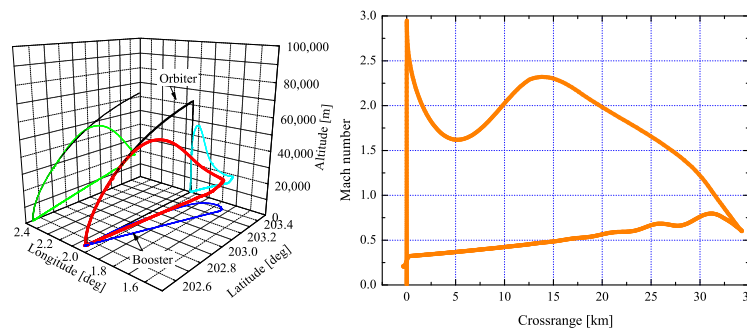
Γι' αυτό είναι απαραίτητο να γίνουν αρκετές απλοποιητικές παραδοχές αλλά, συγχρόνως, ο μηχανικός να έχει αίσθηση και έλεγχο του σφάλματος που αυτές προκαλούν. Η παραδοχή που εδώ έγινε είναι ότι ο αριθμός των επιλύσεων των τριδιάστατων εξισώσεων ροής γύρω από ολόκληρο το RLV θα περιορισθεί σε τρεις (τρεις, δηλαδή, χρήσεις του λογισμικού (β), με χαλαρή σύνδεση μόνο με το λογισμικό (α). Χαλαρή σύνδεση σημαίνει ότι οι συνθήκες ροής για τους τρεις υπολογισμούς της ροής γύρω από το RLV θα παραμένουν σταθερές, έστω και αν αποκλίνουν λίγο από αυτές που θα υποδεικνύει η ταυτόχρονη χρήση του λογισμικού (α).

Έτσι, ο πρώτος υπολογισμός Navier–Stokes αφορά την υπερηχητική πτήση (σε σταθερές συνθήκες $Re = 6.0 \times 10^6$, $M_\infty = 1.20$, $\alpha_\infty = 0.0^\circ$), ο δεύτερος τη

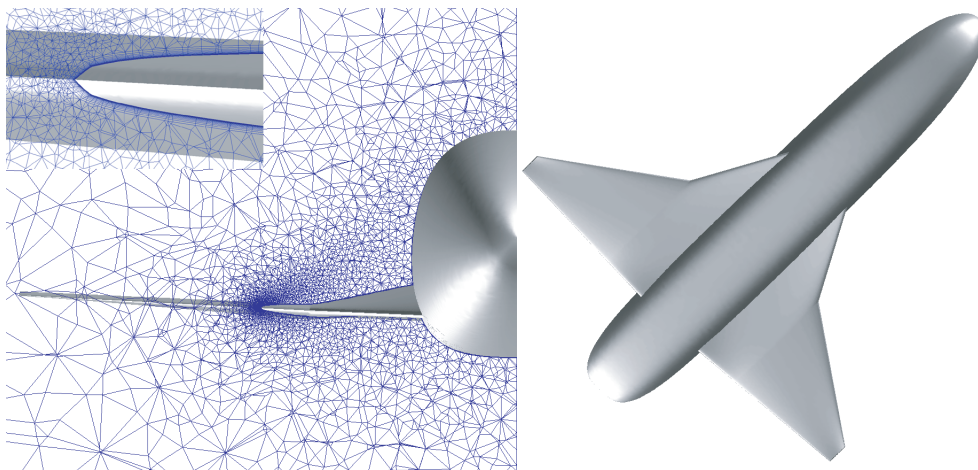
διηχητική πτήση (σε σταθερές συνθήκες $Re = 6.0 \times 10^6$, $M_\infty = 0.80$, $\alpha_\infty = 8.0^\circ$) και ο τρίτος την υποηχητική πτήση (σε σταθερές συνθήκες $Re = 6.0 \times 10^7$, $M_\infty = 0.30$, $\alpha_\infty = 13.0^\circ$).

Παραδοχές γίνονται και στο μοντέλο υπολογισμού της τροχιάς του RLV, όπου προκαθορίζεται η αποκόλληση του δορυφόρου από το RLV σε ύψος 30km και αριθμό Mach της ροής ίσο με 3.

Τα σχήματα 1.12, 1.13 δείχνουν εποπτικά τα βασικά εξαγόμενα του λογισμικού (α) και (β) στα πλαίσια της ανάλυσης μιας οποιασδήποτε υποψήφιας λύσης.



Σχήμα 1.12: Σχεδιασμός RLV με βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά: Απεικονίσεις της τροχιάς (αριστερά στον τριδιάστατο χώρο και δεξιά ως διδιάστατη προβολή) του RLV, όπως ενδεικτικά υπολογίζονται από λογισμικό ανάλυσης της τροχιάς.

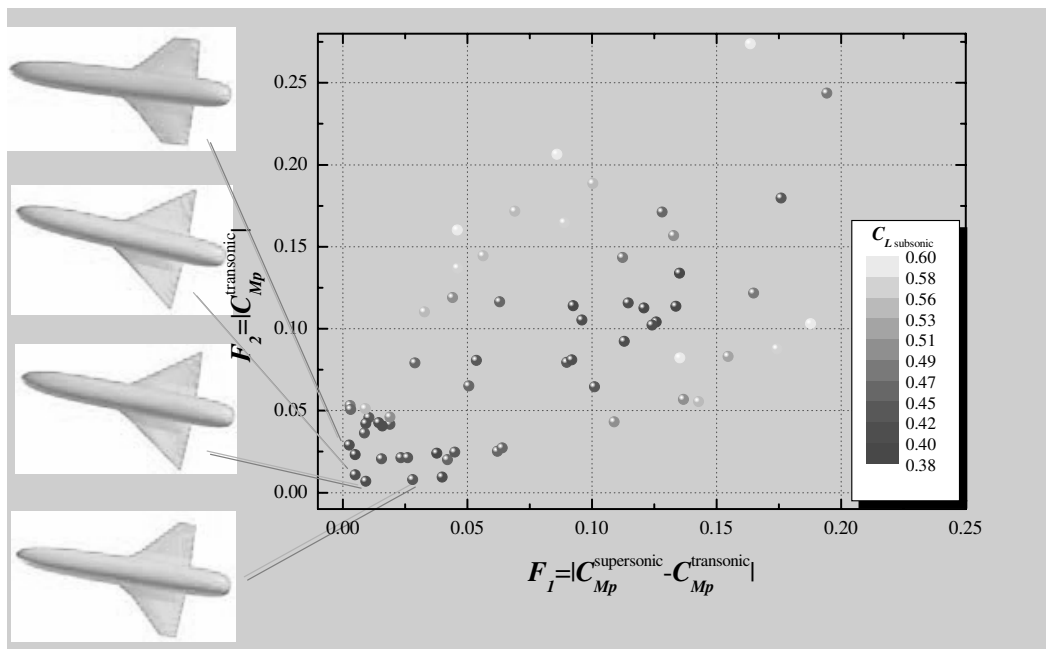


Σχήμα 1.13: Σχεδιασμός RLV με βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά: Ενδεικτικά πλέγματα και γεωμετρία του RLV που σχετίζονται με τη χρήση του επιλύτη των εξισώσεων Navier–Stokes για τον υπολογισμό πεδίων ροής γύρω από αυτό.

4. Είναι πραγματικά δευτερεύον να αναφερθούμε στο λογισμικό βελτιστοποίησης που χρησιμοποιήθηκε. Απλά, για λόγους πληρότητας, αναφέρεται ότι έγινε

χρήση Εξελικτικών Αλγορίθμων, μιας δηλαδή από τις μεθόδους που θα γνωρίσουμε στη συνέχεια. Η επιλογή βασίστηκε στο ότι ήταν επιθυμητό η μέθοδος βελτιστοποίησης να χρησιμοποιεί αυτούσιο το (πολύπλοκο, εδώ) λογισμικό αξιολόγησης υποψηφίων λύσεων και το να εκμεταλλεύεται εύκολα δυνατότητες πολυεπεξεργασίας. Και τα δύο κριτήρια ικανοποιούν οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι, με κόστος τον αυξημένο αριθμό αξιολογήσεων υποψηφίων λύσεων που χρειάζεται μέχρι να εντοπισθεί η βέλτιστη.

Είναι εντελώς έξω από το στόχο του συγγράμματος αυτού να αναλύσει τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης. Η παρουσίαση στόχευε στο να υποδείξει στο σπουδαστή όλα όσα χρειάζονται για να λυθεί το πρόβλημα, την ανάγκη για (ελεγχόμενες, ασφαλώς) παραδοχές ώστε να κρατηθεί σε αποδεκτά πλαίσια ο χρόνος υπολογισμού, την αναγκαστική χρήση ισχυρών-παράλληλων υπολογιστών, τη σημαντική και σοβαρή επένδυση που πρέπει να γίνει στις λεγόμενες 'παράπλευρες' της βελτιστοποίησης εργασίες (όπως είναι η παραμετροποίηση των προς βελτιστοποίηση μορφών).



Σχήμα 1.14: Σχεδιασμός RLV με βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά: Προβολή του μέτωπου λύσεων Pareto στο επίπεδο δύο από τους τέσσερις στόχους. Ενδεικτική μορφή πτερύγων, επιλεγμένων από τις λύσεις του μέτωπου Pareto.

Ενδεικτικά, παρουσιάζεται μόνο το σχήμα 1.14, με αποτελέσματα στο διδιάστατο επίπεδο που ορίζουν δύο (από τους τέσσερις) στόχους. Παρουσιάζονται εποπτικά οι κατόψεις ορισμένων πτερύγων, επιλεγμένων από τις λύσεις του μέτωπου Pareto που υπολογίστηκε. Με τον εποπτικό αυτό τρόπο παρουσίασης γίνεται κατανοητό ότι η βέλτιστη λύση με κριτήριο τον ένα στόχο διαφέρει σημαντικά από τη βέλτιστη λύση με κριτήριο έναν άλλο στόχο και αυτό ακριβώς είναι που απεικονίζει ένα μέτωπο Pareto.

1.2 Προβλήματα Βελτιστοποίησης στις Στροβιλομηχανές

Ένα ενδεικτικό παράδειγμα που θα παρουσιασθεί προέρχεται από το χώρο των θερμικών στροβιλομηχανών. Συγκεκριμένα, αφορά στο σχεδιασμό αεροτομών πτερυγίων συμπίεστων, με βέλτιστη συμπεριφορά σε από ή περισσότερα σημεία λειτουργίας. Με το παράδειγμα αυτό δίνουμε έμφαση στο ότι ο σχεδιασμός αεροδυναμικών σωμάτων (πτερυγίων, πτερύγων, αεροτομών, κλπ) γίνεται πρακτικά αποβλέποντας στη βέλτιστη λειτουργία τους όχι μόνο στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας (design point) αλλά και σε συνθήκες λειτουργίας εκτός του σημείου αυτού (off-design conditions).

Τα πέντε σημεία λειτουργίας που θα μας απασχολήσουν παρουσιάζονται στον πίνακα 1.2. Η μοναδική ποσότητα που απαιτεί επιπλέον διευκρίνηση είναι αυτή που συμβολίζεται με $AVDR$ και η οποία παρατηρούμε ότι λαμβάνει τιμές κοντά στη μονάδα. Η ποσότητα αυτή ονομάζεται ‘λόγος γινομένου αξονικής ταχύτητας–πυκνότητας’ (Axial Velocity Density Ratio) και ισούται με το λόγο της διατομής εξόδου προς τη διατομή εισόδου της διδιάστατης πτερύγωσης. Εφαρμόζοντας ολοκληρωματικά την εξίσωση διατήρησης της παροχής μάζας στην πτερύγωση, ο λόγος αυτός ισούται με το λόγο του γινομένου αξονικής ταχύτητας–πυκνότητας της εισόδου προς το ίδιο γινόμενο στην έξοδο της πτερύγωσης. Πρόκειται, δηλαδή, για μια ψευδο–τριδιάστατη μελέτη, όπου η διδιάστατη πτερύγωση συνοδεύεται με μεταβλητό (κατά την αξονική κατεύθυνση) πάχος σωλήνα ροής στην τρίτη κατεύθυνση.

Σημείο Λειτουργίας	Γωνία εισόδου της ροής (α_1)	Αριθμός Mach εισόδου (M_1)	Αριθμός Reynolds	$1/AVDR$
$OP1$	43°	0.6184	$8.61 \cdot 10^5$	1.0909
$OP2$	45°	0.6182	$8.50 \cdot 10^5$	1.0965
$OP3$ (Ονομ.)	47°	0.6180	$8.41 \cdot 10^5$	1.1021
$OP4$	49°	0.6195	$8.20 \cdot 10^5$	1.1027
$OP5$	52°	0.6214	$7.63 \cdot 10^5$	1.1032

Πίνακας 1.2: Σχεδιασμός αεροτομών πτερυγίων συμπίεστων, με βέλτιστη συμπεριφορά σε από ένα ως πέντε σημεία λειτουργίας: Πινακοποιούνται τα σημεία λειτουργίας (operating points, συντομογραφικά OP) με τα βασικά χαρακτηριστικά τους.

Ο σχεδιασμός ξεκινά έχοντας ως αναφορά την αεροτομή ενός πτερυγίου βιομηχανικού συμπίεστη και δεδομένη τη συμπεριφορά του και τις αποδόσεις του σε συγκεκριμένες συνθήκες λειτουργίας. Την αεροτομή του πτερυγίου αυτού θα συναντήσουμε σε πολλά από τα επόμενα σχήματα (για λόγους σύγκρισης), άρα δεν χρειάζεται να την παρουσιάσουμε ξεχωριστά. Κώδικες υπολογιστικής ρευστοδυναμικής καλύπτουν το σύνολο της ανάλυσης. Η αξιοπιστία τους ελέγχεται αρχικά, όπως φαίνεται στον πίνακα 1.3, όπου συγκρίνονται μετρήσεις και υπολογισμοί. Οι συγκρίσεις αφορούν το συντελεστή απωλειών ολικής πίεσης ω (ορίζεται κατά τα γνωστά) ως

$$\omega = \frac{P_{t2,is} - P_{t2}}{P_{t1} - P_1}$$

	OP1	OP2	OP3	OP4	OP5
ω (μετρήσεις)	0.0232		0.0186		0.0417
ω (υπολογισμός)	0.0234	0.0208	0.0189	0.0237	0.0374
α_2 (μετρήσεις, °)	20.79	20.80	20.92	21.69	22.74
α_2 (υπολογισμός, °)	20.80	20.80	20.90	21.70	22.70

Πίνακας 1.3: Σχεδιασμός αεροτομών πτερυγίων συμπίεστων, με βέλτιστη συμπεριφορά σε από ένα ως πέντε σημεία λειτουργίας: Ο συντελεστής απωλειών ολικής πίεσης ω και η γωνία εξόδου α_2 συγκρίνονται μεταξύ πειραματικών μετρήσεων και υπολογισμών. Αυτό, συνήθως, προηγείται του βέλτιστου σχεδιασμού και έχει την έννοια της πιστοποίησης του λογισμικού της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής που χρησιμοποιείται.

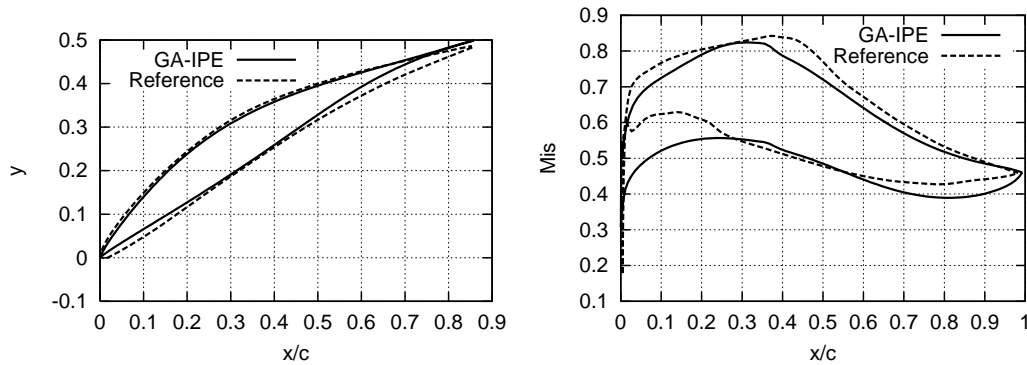
όπου $p_{t2, is}$ είναι η ισεντροπική ολική πίεση στην έξοδο, p_{t2} η ολική πίεση στην έξοδο, p_{t1} η ολική πίεση στην είσοδο και p_1 η στατική πίεση στην είσοδο) και τη γωνία εξόδου α_2 της ροής από την πτερύγωση. Τυπικός στόχος είναι η ελαχιστοποίηση του ω . Όμως, σε κάθε προσπάθεια ελαχιστοποίησης της τιμής του ω , είναι απαραίτητο να τίθεται ως περιορισμός η διατήρηση της γωνίας α_2 σε επιθυμητά όρια, αλλιώς η μέθοδος βελτιστοποίησης μπορεί να οδηγήσει σε αεροτομές μικρών απωλειών αλλά που δεν θα αποφέρουν την επιθυμητή στροφή της ροής (συναλλαγή έργου, αν πρόκειται για κινητή πτερύγωση).

Στο πρόβλημα αυτό, η γωνία κλίσης της πτερύγωσης είναι δεδομένη και σταθερή στις 30° , όπως δεδομένα και σταθερά ήταν το μήκος χορδής και το βήμα της πτερύγωσης ($C = 0.07\ m$ και $s = 0.68\ C$, αντίστοιχα).

Η βελτιστοποίηση με στόχο την ελαχιστοποίηση ω συνοδεύθηκε, εκτός από περιορισμό για την επιθυμητή γωνία εξόδου α_2 , και από επιπλέον περιορισμούς για το πάχος της αεροτομής. Συγκεκριμένα, επιβλήθηκε ο περιορισμός ότι το μέγιστο πάχος της αεροτομής δεν πρέπει να μειωθεί κάτω του 90% του μέγιστου πάχους της αεροτομής αναφοράς. Γίνεται, δηλαδή, κατανοητή η διάθεση του σχεδιαστή να μην επιτρέψει το σχηματισμό πολύ λεπτών πτερυγίων, που ενδεχομένως θα έχουν πολύ καλή αεροδυναμική συμπεριφορά αλλά θα συνοδεύονται από προβλήματα αντοχής.

Μια πρώτη αντιμετώπιση του προβλήματος έγινε αρχικά με το βέλτιστο σχεδιασμό σε ένα σημείο λειτουργίας, το ονομαστικό (συνθήκες OP3). Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο σχήμα 1.15 και στον πίνακα 1.4. Από το σχήμα φαίνεται ότι η αεροτομή που υπολογίστηκε είναι αρκετά ('αφύσικα') αιχμηρή στην ακμή προσβολής. Ο λόγος είναι ότι η αεροτομή σχεδιάστηκε ώστε να συμπεριφέρεται βέλτιστα σε ένα μόνο σημείο λειτουργίας, συγκεκριμένα σε γωνία $\alpha_1 = 47^\circ$. Ακριβώς για το λόγο αυτό, από τον πίνακα 1.4 φαίνεται ότι το πτερύγιο δίνει καλύτερη τιμή του ω (κοντά) στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας αλλά υστερεί στα σημεία λειτουργίας εκτός του σημείου σχεδιασμού.

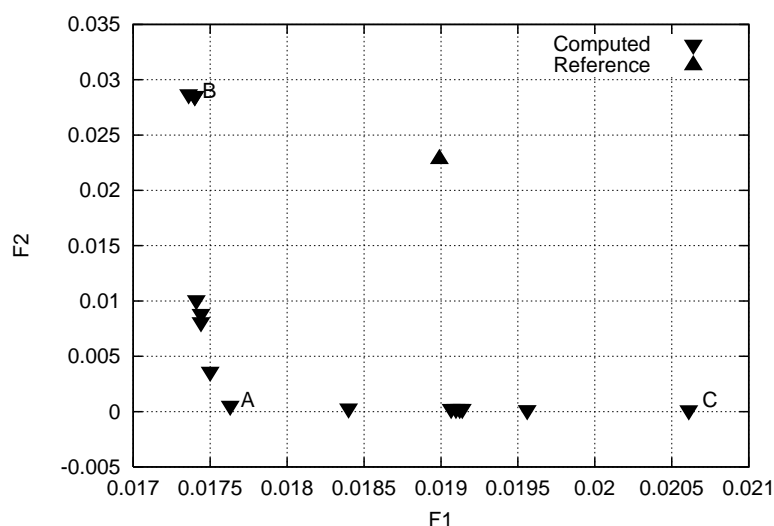
Η επόμενη σχετική προσπάθεια βελτιστοποίησης έγινε για τρία σημεία λειτουργίας, τα OP1, OP3 και OP5. Παρόλα αυτά, οι στόχοι που τέθηκαν ήταν δύο: ελαχιστοποίηση της τιμής του ω_3 και ελαχιστοποίηση της ποσότητας ($\omega_1 + \omega_5 - 2\omega_3$), όπου ο δείκτης στην ποσότητα ω δείχνει το σημείο λειτουργίας στο οποίο αντιστοιχεί. Για ισαπέχοντα (ως προς την τιμή της α_1) σημεία λειτουργίας η δεύτερη ποσότητα εκφράζει τη γωνία



Σχήμα 1.15: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας στις συνθήκες $OP3$: Η αεροτομή αναφοράς και η βέλτιστη αεροτομή που υπολογίσθηκε (αριστερά). Οι αντίστοιχες κατανομές του ισεντροπικού αριθμού Mach στα στερεά τοιχώματα του πτερυγίου.

ω	$OP1$	$OP2$	$OP3$	$OP4$	$OP5$
Αεροτομή αναφοράς	0.0234	0.0208	0.0189	0.0237	0.0374
Βέλτιστη αεροτομή	0.0244	0.0182	0.0155	0.0275	0.05101

Πίνακας 1.4: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας στις συνθήκες $OP3$: Σύγκριση των τιμών του συντελεστή ω και για τα πέντε σημεία λειτουργίας που δίνει το βέλτιστο πτερόγιο που υπολογίσθηκε για τις συνθήκες $OP3$.



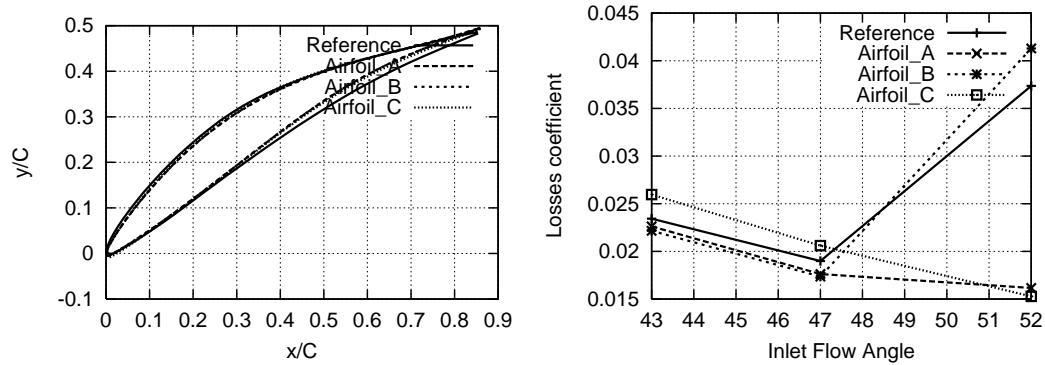
Σχήμα 1.16: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση σε τρία σημεία λειτουργίας, ($OP1$, $OP3$ και $OP5$), διατυπωμένο ως πρόβλημα δύο στόχων: Στον οριζόντιο άξονα, ο στόχος $F1$ ταυτίζεται με τις απώλειες ω_3 . Στην κατακόρυφο άξονα, ο στόχος $F2$ συμβολίζει τη ‘γωνία’ ($\omega_1 + \omega_5 - 2\omega_3$). Απεικονίζεται το μέτωπο των βέλτιστων κατά Pareto λύσεων που υπολογίσθηκαν. Για λόγους σύγκρισης, απεικονίζεται και η απόδοση του πτερυγίου αναφοράς.

που σχηματίζουν οι απώλειες στα τρία σημεία. Επιθυμούμε η γωνία αυτή να είναι όσο το δυνατόν πιά αμβλεία (αν είναι δυνατό, μέχρι και ευθεία) γιατί αυτό δείχνει ότι, αν οι απώλειες είναι μικρές στο $OP3$, θα παραμένουν εξίσου χαμηλές και στα εκτός σχεδιασμού σημεία λειτουργίας. Πέραν από οτιδήποτε άλλο, αναγνωρίζουμε τη δυνατότητα να απεμπλέκουμε τον αριθμό των πραγματικών στόχων από τον αριθμό των στόχων που επιβάλλουμε στη μέθοδο βελτιστοποίησης: εδώ έχουμε πραγματικά τρεις στόχους αλλά διατυπώνουμε και λύνουμε ένα πρόβλημα δύο στόχων.

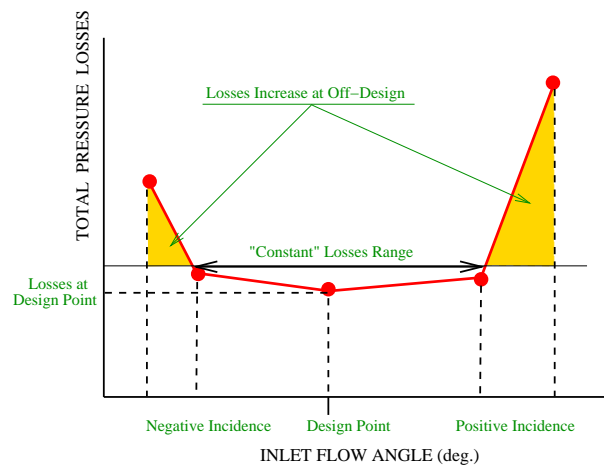
Στο σχήμα 1.16 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που υπολογίσθηκαν για την προαναφερθείσα διατύπωση του προβλήματος. Όπως εξηγείται και στη λεζάντα του σχήματος, στο σχήμα παρουσιάζεται το μέτωπο των βέλτιστων κατά Pareto λύσεων που υπολογίσθηκαν. Παρατηρήστε ότι οι περισσότερες από αυτές υπερτερούν σε απόδοση του πτερυγίου αναφοράς και, μάλιστα, ως προς και τους δύο στόχους: δίνουν μικρότερες απώλειες ολικής πίεσης στο ονομαστικό σημείο και έχουν περισσότερο αμβλεία (ανοικτή) την καμπύλη των απωλειών.

Από το σχήμα 1.16, επιλέχθηκαν τρεις βέλτιστες λύσεις (σημειώνονται με A , B , C) και αναλύθηκαν διεξοδικά. Τα αποτελέσματα αυτά παρουσιάζονται στο σχήμα 1.17. Δίνουμε έμφαση κυρίως στη λύση A , που βρίσκεται στην καρδιά του μετώπου, και η οποία υπερτερεί πλήρως (δηλαδή, ως προς και τους δύο στόχους) και αισθητά του πτερυγίου αναφοράς.

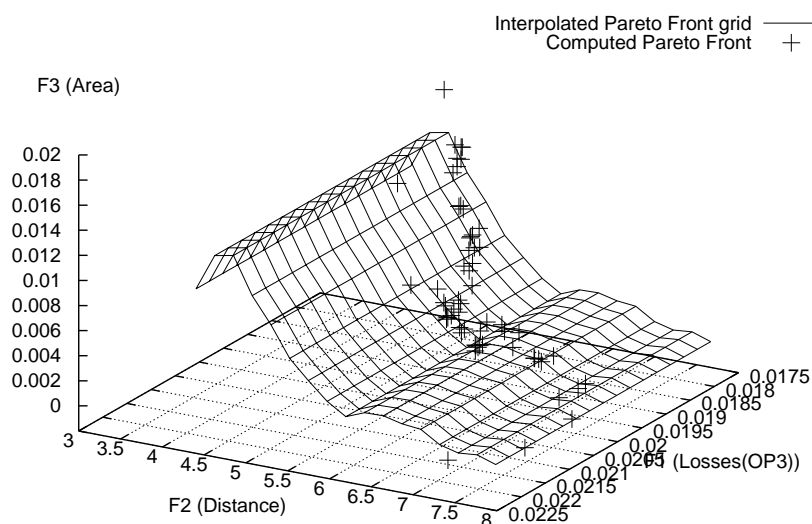
Η τελευταία σχετική μελέτη λαμβάνει υπόψη και τους πέντε στόχους. Στόχος είναι η ελαχιστοποίηση των ω_i , $i = 1, 5$ αλλά η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε το αντιμετώπισε ως πρόβλημα τριών συναρτήσεων οι τιμές των οποίων έπρεπε να ελαχιστοποιηθούν.



Σχήμα 1.17: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση σε τρία σημεία λειτουργίας, ($OP1$, $OP3$ και $OP5$), διατυπωμένο ως πρόβλημα δύο στόχων: Παρουσίαση και ανάλυση της απόδοσης τριών λύσεων από το μέτωπο Pareto του σχήματος 1.16.



Σχήμα 1.18: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση σε πέντε σημεία λειτουργίας, διατυπωμένο ως πρόβλημα τριών στόχων: Γραφικός ορισμός των τριών συναρτήσεων των οποίων επιδιώκεται η ελαχιστοποίηση. Πρώτος στόχος, ο προφανής, είναι η ελαχιστοποίηση της ποσότητας ω_3 , των απωλειών δηλαδή στο ονομαστικό σημείο λειτουργίας. Δεύτερος στόχος η μεγιστοποίηση του ανοίγματος της καμπύλης των απωλειών, δηλαδή του μήκους του ευθύγραμμου τμήματος που συμβολίζεται με "Constant" Losses Range. Τρίτος στόχος είναι η ελαχιστοποίηση της σκούρας περιοχής, ώστε να έχουμε χαμηλές απώλειες σε μεγάλες και μικρές γωνίες πρόσπτωσης.



Σχήμα 1.19: Σχεδιασμός βέλτιστης αεροτομής πτερυγίου συμπιεστή, με κριτήριο την απόδοση σε πέντε σημεία λειτουργίας, διατυπωμένο ως πρόβλημα τριών στόχων: Το τριδιάστατο μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων.

Πλήρης ορισμός αυτών δίνεται στο σχήμα 1.18.

Τα αποτελέσματα του υπολογισμού, στη μορφή τριδιάστατου μετώπου Pareto απεικονίζονται στο σχήμα 1.19.

1.3 Ταξινόμηση Προβλημάτων και Μεθόδων

1.3.1 Συνεχή και Διακριτά Προβλήματα Βελτιστοποίησης

Βασική διάκριση των προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι στα **συνεχή** και στα **διακριτά** προβλήματα (continuous, discrete optimization). Τα συνεχή προβλήματα, με τα οποία αποκλειστικά θα ασχοληθούμε, εμπλέκουν πραγματικές μεταβλητές ως ελεύθερες μεταβλητές ή ελεύθερες παραμέτρους ή μεταβλητές σχεδιασμού ή μεταβλητές βελτιστοποίησης, ενδεχομένως με άνω και κάτω όρια που οριοθετούν και το χώρο ανίχνευσης κάθε μεταβλητής. Είναι προφανές ότι στη συνεχή βελτιστοποίηση αναζητούμε τη βέλτιστη λύση από ένα άπειρο πλήθος υποψήφιων λύσεων. Στα διακριτά προβλήματα βελτιστοποίησης αναζητούμε ακέραιες λύσεις από ένα πεπερασμένο πλήθος (συνήθως τεράστιο, με την έννοια ότι είναι πρακτικά αδύνατο να δοκιμασθούν όλες, μία προς μία) επιθυμητών λύσεων. Ουσιαστικά, αναζητούμε λύσεις που αντιστοιχούν σε αριθμό 'αντικειμένων'. Τα συνεχή προβλήματα έχουν συνήθως συνεχείς και παραγωγίσιμες αντικειμενικές συναρτήσεις (συναρτήσεις-στόχοι) και συναρτήσεις περιορισμών. Έτσι, επιτρέπουν να υπολογίσουμε ή να προσεγγίσουμε σε κάθε υποψή-

φια λύση την κλίση της αντικειμενικής ή της συνάρτησης περιορισμού και γενικότερα είναι επιδεκτικά 'ευκολότερων' τρόπων επίλυσης.

Ας έχουμε υπόψη ότι το να λύνουμε διακριτά προβλήματα με 'συνεχείς' μεθόδους βελτιστοποίησης (επειδή αυτές συνήθως διαθέτουμε) είναι επισφαλές. Το να ορίσουμε προσωρινά τη διακριτή μεταβλητή βελτιστοποίησης ως συνεχή, να λύσουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης και στη συνέχεια να στρογγυλεύσουμε τις λύσεις μπορεί να δώσει τελικά λύση που να απέχει αρκετά από την πραγματική βέλτιστη.

1.3.2 Καθολική και Τοπική Βελτιστοποίηση

Οι όροι **καθολική και τοπική βελτιστοποίηση** (global and local optimization) χρησιμοποιούνται για να καθορίσουν αν η αναζήτηση αφορά το ολικό ή καθολικό ακρότατο ή, αντίθετα, αρκείται σε ένα τοπικό ακρότατο, μια λύση δηλαδή που απλά υπερτερεί όλων των 'γειτονικών' της. Η αναζήτηση του καθολικά βέλτιστου είναι πάντα η επιθυμητή και, ανάλογα με τη μέθοδο βελτιστοποίησης που θα επιλέξουμε, αυτή μπορεί να ή να μην εξασφαλίζεται.

Γενικά, η αποφασιστική διάκριση μεθόδων σε αυτές που εντοπίζουν καθολικά βέλτιστες λύσεις και σε αυτές που μπορούν να εγκλωβιστούν και άρα να υποδείξουν τοπικά βέλτιστες λύσεις είναι ριφοκίνδυνη. Ένας απλός τρόπος (όχι αναγκαστικά ο καλύτερος και συντομότερος) ώστε να εντοπίσουμε την καθολικά βέλτιστη λύση χρησιμοποιώντας διαθέσιμο αλγόριθμο τοπικής βελτιστοποίησης είναι να το χρησιμοποιήσουμε αρκετές φορές, από διαφορετικά σημεία εκκίνησης.

1.3.3 Αιτιοκρατικά και Στοχαστικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης

Μια διάκριση των προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι σε αιτιοκρατικά (deterministic) και στοχαστικά (stochastic). Προσοχή, εδώ αναφερόμαστε στο πρόβλημα και όχι στη μέθοδο βελτιστοποίησης. Τα περισσότερα οικονομικά και εμπορικά προβλήματα βελτιστοποίησης είναι στοχαστικά, με την έννοια ότι θέματα ζήτησης και προσφοράς προϊόντων και υπηρεσιών υπόκεινται στην τυχαιότητα της αγοράς και δεν μπορούν να προκαθορισθούν με σαφήνεια. Η συντριπτική πλειοψηφία των προβλημάτων βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική είναι αιτιοκρατικά. Εδώ θα ασχοληθούμε μόνο με αιτιοκρατικά προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς να επανέλθουμε στην παραπάνω διάκριση.

Παρόλα αυτά, προβλήματα στοχαστικής βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική υπάρχουν, αν και είναι λίγα. Ενδεικτικά λ.χ. ας αναφερθεί το πρόβλημα του σχεδιασμού βέλτιστων διαστημικών οχημάτων για χρήση στην ατμόσφαιρα νέων πλανητών. Για τον πλανήτη Άρη, για παράδειγμα, οι στόχοι σχεδιασμού είναι ίδιοι με αυτούς που επιβάλλονται και κατά το σχεδιασμό βέλτιστων αεροδιαστημικών οχημάτων για τη γήινη ατμόσφαιρα, μόνο που κατά τη βελτιστοποίηση εισέρχεται επιπλέον ο αστάθμιστος παράγοντας που σχετίζεται με την άγνοια των ακριβών συνθηκών ροής. Στην περίπτωση αυτή πρόκειται για πρόβλημα στοχαστικής βελτιστοποίησης, με τη στοχαστικότητα να υπεισέρχεται από τις 'ασαφείς' συνθήκες πτήσης των οχημάτων που

σχεδιάζονται. Τέτοια προβλήματα δεν θα μας απασχολήσουν στο σύγγραμμα αυτό.

1.3.4 Αιτιοκρατικές και Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης

Από την πλευρά των μεθόδων και όχι των προβλημάτων βελτιστοποίησης, βασική είναι η διάκριση σε αιτιοκρατικές και στοχαστικές μεθόδους. Μια αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης χρησιμοποιεί τη γενικευμένη έννοια της παραγώγου της αντικειμενικής συνάρτησης, τιμές της οποίας καλείται να υπολογίσει ή να προσεγγίσει. Χαρακτηριστικό των στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης είναι ότι χρησιμοποιούν στοιχεία τυχαίας ή οργανωμένα τυχαίας αναζήτησης της βέλτιστης λύσης. Πολλές σύγχρονες μέθοδοι βελτιστοποίησης χρησιμοποιούν συγχρόνως στοιχεία και από τις δύο κατηγορίες μεθόδων.

Η παρακάτω πρόταση κλείνει μέσα της σε αδρές γραμμές τη σύγκριση των αιτιοκρατικών και των στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης, τουλάχιστον όσο αφορά τη χρήση τους σε (πολύπλοκα) προβλήματα αεροδυναμικής: Το να δημιουργηθεί μια αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης απαιτεί μεγαλύτερο χρόνο επένδυσης από την πλευρά του μηχανικού-προγραμματιστή, είναι δυσκολότερα επεκτάσιμη σε άλλα παρεμφερή προβλήματα (λ.χ. όταν αλλάζει η αντικειμενική συνάρτηση), συγκλίνουν γενικά γρήγορα στη βέλτιστη λύση, με τον κίνδυνο όμως η λύση αυτή να είναι τοπικό και όχι το καθολικό βέλτιστο, ανάλογα με το σημείο εκκίνησης. Από την άλλη πλευρά, οι στοχαστικοί αλγόριθμοι είναι περισσότεροι γενικοί, με την έννοια ότι εύκολα προσαρμόζονται για να λυθεί ένα διαφορετικό πρόβλημα, είναι συνήθως περισσότερο αργοί από τις αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης, με κέρδος όμως το να μπορούν να εντοπίσουν το καθολικό ακρότατο ανεξάρτητα από τη λύση ή τις λύσεις με τις οποίες αρχικοποιούνται.

1.3.5 Βελτιστοποίηση και Κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής

Όπως ήδη αναφέρθηκε, μέθοδοι και άρα κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (ΥΡΔ) χρησιμοποιούνται σε όλες τις μεθόδους βελτιστοποίησης για εφαρμογές αεροδυναμικής. Ανάλογα με τη μέθοδο βελτιστοποίησης, ρόλος του λογισμικού ΥΡΔ μπορεί να είναι διττός: να αναλύσει-αξιολογήσει μια υποψήφια λύση (λ.χ. μια αεροτομή, μια πτέρυγα, ένα πτερύγιο στροβιλομηχανής, λύνοντας αριθμητικά το σχετικό πρόβλημα ροής) και να υπολογίσει τελικά την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης για αυτή, ή/και να υπολογίσει αριθμητικά (με ακρίβεια ή προσεγγιστικά) την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης που θα καθοδηγήσει την ανίχνευση της βέλτιστης λύσης (στις αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης).

Το να έχει ο αναγνώστης βασικές γνώσεις ΥΡΔ είναι χρήσιμο αλλά όχι απαραίτητο. Ούτως ή άλλως, στα επόμενα, κώδικες που επιλύουν αριθμητικά τη ροή θα αντιμετωπίζονται ως 'μαύρα κουτιά', χωρίς να χρειάζεται ο αναγνώστης να γνωρίζει κάτι περισσότερο για αυτούς, πέραν ίσως των φυσικών παραδοχών που υπεισέρχονται.

1.4 Ανακεφαλαίωση

Γνωρίσαμε, περιγραφικά, μια σειρά από προβλήματα βελτιστοποίησης επιλεγμένα από τις περιοχές τις εξωτερικής αεροδυναμικής και των στροβιλομηχανών, με σκοπό να προηγηθεί καλή κατανόηση του τι ακριβώς μπορεί να επιτύχει η χρήση μεθόδων βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική. Στόχος της παρουσίασης ήταν να κατανοηθεί το αντικείμενο του μαθήματος πριν ανατρέξουμε τις βασικές, κλασικές και σύγχρονες, μεθόδους βελτιστοποίησης.

Είναι γεγονός ότι τα παραδείγματα αφορούσαν κυρίως σχεδιασμό αεροτομών. Όλα αυτά προέρχονται από τις ερευνητικές δραστηριότητες και τις συνεργασίες μιας ερευνητικής ομάδας του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ. Όλοι, δηλαδή, οι υπολογισμοί έγιναν με εργαλεία-κώδικες που έχουν αναπτυχθεί στο Εργαστήριο και μπορούν (σε πηγαία ή σε εκτελέσιμη μορφή, κατά περίπτωση) να τεθούν στη διάθεση του σπουδαστή που επιθυμεί να μάθει κάτι πέραν του πλαισίου ενός προπτυχιακού μαθήματος. Το πεδίο, όμως, εφαρμογής τέτοιων μεθόδων βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική είναι ευρύ: θα μπορούσαν λ.χ. να χρησιμοποιηθούν ώστε να αναζητηθεί η βέλτιστη μορφή ενός οχήματος, λ.χ. αυτοκινήτου, με βάση κριτήρια και στόχους που σχετίζονται με την αεροδυναμική συμπεριφορά του.

Παρακάτω συνοψίζονται κεντρικά σημεία που απορρέουν από τα παραδείγματα που προηγήθηκαν:

- Τα πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική (και όχι μόνο) έχουν, συνήθως, περισσότερους από έναν (αντικρουόμενους) στόχους. Το πως όμως ο μηχανικός θα διαχειρισθεί τους πολλούς στόχους είναι δική του επιλογή. Ένα πρόβλημα πολλών στόχων μπορεί να επιλυθεί διατυπώνοντάς το ως πρόβλημα ενός στόχου (με την κατάλληλη ενσωμάτωση όλων των στόχων σε μια μοναδική αντικειμενική συνάρτηση) είτε ως πρόβλημα πολλών στόχων. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, η μείωση του αριθμού των στόχων κατά τη μαθηματική διατύπωση γίνεται με σκοπό να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος (το 'γιατί' θα γίνει κατανοητό όταν γνωρίσουμε τις σχετικές μεθόδους, όπου όμως θα φανεί καλύτερο και ο 'κίνδυνος' μιας τέτοιας διατύπωσης).
- Σε όλα τα παραδείγματα, αναζητήθηκε η βέλτιστη μορφή μιας γεωμετρίας. Αυτόματα, τίθεται το πρόβλημα της **παραμετροποίησης** (parameterization) γεωμετρικών μορφών. Με την παραμετροποίηση μια συνεχής γεωμετρία συναρτάται ενός (μικρού) πλήθους μεταβλητών ελέγχου και, άρα, η βελτιστοποίηση ταυτίζεται με την αναζήτηση του βέλτιστου συνόλου τιμών για αυτές τις μεταβλητές σε σχέση με τον προκαθορισθέντα στόχο ή στόχους. Θέματα παραμετροποίησης (μέσω πολυωνύμων, splines, πολυωνύμων Bezier κλπ), αν και γνωστά από την Αριθμητική Ανάλυση, αναφέρονται σε ειδικό κεφάλαιο, στο τέλος του συγγράμματος.
- Από τα παραδείγματα απορρέει καθαρά ότι η βελτιστοποίηση με αεροδυναμικά κριτήρια, από μόνη της, δεν είναι επαρκής σε πρακτικό επίπεδο. Για παράδειγμα, δεν έχει έννοια το να σχεδιασθεί η αεροδυναμικά βέλτιστη αεροτομή αν αυτή

προκύπτει ιδιαίτερα λεπτή και άρα απορριπτέα με βάση κατασκευαστικά κριτήρια. Εν μέρει, σε κάποια παραδείγματα, αυτό αντιμετωπίστηκε θέτοντας περιορισμούς σε κάποιες γεωμετρικές ποσότητες αλλά σε πρακτικό επίπεδο αυτό δεν είναι ποτέ επαρκές. Γενικά (αλλά όχι ισοπεδωτικά), ας έχουμε υπόψη ότι τα κριτήρια της αεροδυναμικής και της κατασκευαστικής βελτιστοποίησης είναι, συνήθως, αντικρουόμενα.

- Στην πράξη, πολλές φορές, υπάρχει σύγχυση ανάμεσα στους όρους 'βελτιστοποίηση' και 'βελτίωση'. Προφανώς, και οι δύο ενέργειες είναι επιθυμητές στο σχεδιαστή αεροδυναμικών συνιστωσών (αφού ακόμα και η 'βελτίωση' βελτιώνει την αεροδυναμική ποιότητα μιας υπάρχουσας διάταξης ή συνιστώσας). Είναι, όμως, σαφές ότι η ποιοτική τους διαφορά είναι μεγάλη.
- Παρακάτω θα μας απασχολήσουν αιτιοκρατικά προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, τα οποία θα αντιμετωπίσουμε με αιτιοκρατικές και στοχαστικές μεθόδους.

Κεφάλαιο 2

Βασικό Μαθηματικό Υπόβαθρο και Ορισμοί

Για να ασχοληθεί κανείς με μεθόδους βελτιστοποίησης σε εφαρμογές της αεροδυναμικής απαιτείται συγκεκριμένο υπόβαθρο μαθηματικών γνώσεων. Στο σπουδαστή στον οποίον απευθύνεται το σύγγραμμα αυτό, σχεδόν οτιδήποτε ακολουθεί πρέπει να είναι γνωστό από τα σχετικά προπτυχιακά μαθήματα του προγράμματος σπουδών. Στη συνέχεια, θα επαναλάβουμε συγκεντρωμένα τα πιο βασικά σχετικά θεωρήματα αλλά και τους ορισμούς που θα χρησιμοποιηθούν κατά κόρο στα επόμενα κεφάλαια.

2.1 Προβλήματα Ενός Στόχου

Ακολουθούν μαθηματικές διατυπώσεις και θεωρήματα για προβλήματα βελτιστοποίησης που τίθενται στη μορφή της ελαχιστοποίησης της τιμής της **αντικειμενικής συνάρτησης** $F(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, δηλαδή για προβλήματα ενός μόνο στόχου.

Αποσαφηνίζεται ότι τα επόμενα διέπουν και προβλήματα πολλών στόχων, αρκεί αυτά να έχουν διατυπωθεί με συσσωμάτωση όλων των στόχων σε μια και μοναδική αντικειμενική συνάρτηση.

Θεώρημα 2.1 (Θεώρημα του Taylor:) Αν η $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση και $\vec{p} \in \mathbb{R}^N$, τότε υπάρχει μια ποσότητα $t \in (0, 1)$ για την οποία να ισχύει ότι

$$F(\vec{x} + \vec{p}) = F(\vec{x}) + \nabla F(\vec{x} + t\vec{p})^T \vec{p} \quad (2.1)$$

Αν επιπλέον η F είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη, τότε

$$\nabla F(\vec{x} + \vec{p}) = \nabla F(\vec{x}) + \int_0^1 \nabla^2 F(\vec{x} + t\vec{p}) \vec{p} dt \quad (2.2)$$

και για κάποιο $t \in (0, 1)$ ισχύει

$$F(\vec{x} + \vec{p}) = F(\vec{x}) + \nabla F(\vec{x})^T \vec{p} + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x} + t\vec{p}) \vec{p} \quad (2.3)$$

Στο σημείο αυτό και πριν συνεχισθεί η παράθεση θεωρημάτων, ας αποσαφηνίσουμε, διατυπώνοντάς τους μαθηματικά, τρεις ορισμούς που χρησιμοποιούνται σε όλο το κεφάλαιο:

Ορισμός 2.1 Το \vec{x}^* αποτελεί καθολικό ελάχιστο (*global minimizer*) της $F(\vec{x})$ αν $F(\vec{x}^*) \leq F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} .

Ορισμός 2.2 Το \vec{x}^* αποτελεί τοπικό ελάχιστο (*local minimizer*) της $F(\vec{x})$ όταν $F(\vec{x}^*) \leq F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} στη γειτονιά του \vec{x}^* .

Ορισμός 2.3 Το \vec{x}^* αποτελεί αυστηρό τοπικό ελάχιστο (*strict local minimizer*) της $F(\vec{x})$ όταν $F(\vec{x}^*) < F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} στη γειτονιά του \vec{x}^* .

Θεώρημα 2.2 (Αναγκαία συνθήκη πρώτης τάξης για το ελάχιστο) Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^N$ να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης F στη γειτονιά του \vec{x}^* είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$.

Απόδειξη: Αν $\nabla F(\vec{x}^*) \neq 0$, ορίζουμε το \vec{p} ως $\vec{p} = -\nabla F(\vec{x}^*)$ οπότε προφανώς $\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) < 0$. Όμως, επειδή η F είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , θα υπάρχει μια θετική τιμή $T > 0$ τέτοια ώστε

$$\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) < 0 \quad , \quad \forall \hat{t} \in [0, T]$$

Τότε όμως από το θεώρημα 2.1 και για κάποιο $t \in (0, \hat{t})$, θα ισχύει ότι

$$F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) = F(\vec{x}^*) + \hat{t}\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^* + t\vec{p})$$

Με δεδομένο το αρνητικό πρόσημο της τελευταίας ποσότητας, για κάθε $\hat{t} \in (0, T]$ θα ισχύει ότι $F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) < F(\vec{x}^*)$. Άρα, υπάρχει κατεύθυνση κατά την οποία, απομακρυνόμενοι από το \vec{x}^* , η τιμή της F ελαττώνεται, οπότε το \vec{x}^* αποκλείεται να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F . \diamond

Ορισμός 2.4 Σημεία στο χώρο των λύσεων στα οποία $\nabla F(\vec{x}) = 0$ ονομάζονται **στάσιμα σημεία** (*stationary points*).

Μόλις δείξαμε ότι για να είναι το \vec{x}^* τοπικό ελάχιστο πρέπει να είναι στάσιμο σημείο της F . Το αντίστροφο δεν ισχύει κατ' ανάγκη.

Υπενθυμίζονται και οι επόμενοι δύο ορισμοί:

Ορισμός 2.5 Ένα μητρώο B ονομάζεται **θετικά ορισμένο** (positive definite) αν $\vec{p}^T B \vec{p} > 0$ για κάθε \vec{p} .

Ορισμός 2.6 Ένα μητρώο B ονομάζεται **θετικά ημι-ορισμένο** (positive semidefinite) αν $\vec{p}^T B \vec{p} \geq 0$ για κάθε \vec{p} .

Θεώρημα 2.3 (Αναγκαίες συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο) Αναγκαίες συνθήκες ώστε το διάνυσμα $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^N$ να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F , για την οποία η $\nabla^2 F$ είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$ και συγχρόνως το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ να είναι θετικά ημι-ορισμένο μητρώο.

Απόδειξη: Γνωρίζουμε από το θεώρημα 2.2 ότι $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$. Υποθέτοντας όμως ότι το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ δεν είναι θετικά ημι-ορισμένο, μπορούμε να επιλέξουμε ένα διάνυσμα \vec{p} τέτοιο ώστε $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^*) \vec{p} < 0$. Επειδή η $\nabla^2 F$ είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , θα υπάρχει μια θετική τιμή $T > 0$ τέτοια ώστε $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^* + t\vec{p}) \vec{p} < 0$, για κάθε τιμή $t \in [0, T]$.

Με ανάπτυγμα κατά Taylor, έχουμε ότι για όλα τα $\hat{t} \in (0, T)$ υπάρχει $t \in (0, \hat{t})$ ώστε

$$F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) = F(\vec{x}^*) + \hat{t}\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2}\hat{t}^2 \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^* + t\vec{p}) \vec{p} < F(\vec{x}^*)$$

Άρα, βρέθηκε κατεύθυνση κατά την οποία, απομακρυνόμενοι από το \vec{x}^* , η τιμή της F ελαττώνεται, οπότε το \vec{x}^* αποκλείεται να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F . \diamond

Θεώρημα 2.4 (Ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο) Αν το $\nabla F(\vec{x})$ είναι συνεχές στη γειτονιά του σημείου \vec{x}^* , ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$ και συγχρόνως το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ είναι θετικά ορισμένο, τότε το \vec{x}^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο της $F(\vec{x})$.

Απόδειξη: Αφού το μητρώο Hess είναι συνεχές και θετικά ορισμένο στο \vec{x}^* , επιλέγουμε μια ακτίνα r ώστε το $\nabla^2 F(\vec{x})$ να παραμένει θετικά ορισμένο για κάθε \vec{x} στην ανοικτή σφαίρα $D = \{\vec{z} : \|\vec{z} - \vec{x}^*\| < r\}$. Για το μη-μηδενικό διάνυσμα \vec{p} , για το οποίο $\|\vec{p}\| < r$, έχουμε $\vec{x}^* + \vec{p} \in D$ και συνεπώς

$$\begin{aligned} F(\vec{x}^* + \vec{p}) &= F(\vec{x}^*) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} \\ &= F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} \end{aligned}$$

όπου $\vec{z} = \vec{x}^* + t\vec{p}$ για κάποιο $t \in (0, 1)$. Αφού $\vec{z} \in D$, έχουμε ότι $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} > 0$ και συνεπώς $F(\vec{x}^* + \vec{p}) > F(\vec{x}^*)$. \diamond

Πρέπει να γίνει κατανοητό ότι οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο που παρουσιάστηκαν ως θεώρημα 2.4 είναι ισχυρότερες από τις αναγκαίες συνθήκες που μας απασχόλησαν προηγουμένως: το θεώρημα 2.4 οδηγεί σε αυστηρά τοπικό ελάχιστο και όχι απλά σε τοπικό ελάχιστο. Επίσης να γίνει κατανοητό ότι οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης δεν είναι και αναγκαίες, δηλαδή ένα διάνυσμα \vec{x}^* μπορεί να είναι αυστηρό τοπικό ακρότατο χωρίς να χρειάζεται να ικανοποιεί τις αναγκαίες συνθήκες. Απλό παράδειγμα είναι η $F(x) = x^4$, όπου το $x^* = 0$ είναι αυστηρά τοπικό ελάχιστο αλλά σε αυτό το μητρώο Hess (η δεύτερη παράγωγός της, δηλαδή) μηδενίζεται και άρα δεν είναι θετικά ορισμένο.

Υπενθυμίζεται ότι:

Ορισμός 2.7 Ως **κυρτή συνάρτηση** στο \mathbb{R}^N ορίζεται εκείνη για την οποία, για δύο οποιαδήποτε σημεία της \vec{x} και \vec{y} , ισχύει ότι

$$F(\lambda \vec{x} + (1 - \lambda) \vec{y}) \leq \lambda F(\vec{x}) + (1 - \lambda) F(\vec{y}) \quad (2.4)$$

για κάθε $\lambda \in (0, 1]$.

Ορισμός 2.8 Το σύνολο $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ ονομάζεται **κυρτό** αν, για δύο οποιαδήποτε $\vec{x}, \vec{y} \in \Omega$, ισχύει ότι $\lambda \vec{x} + (1 - \lambda) \vec{y} \in \Omega$ για κάθε $\lambda \in (0, 1]$.

Θεώρημα 2.5 (Καθολικό ελάχιστο σε κυρτές συναρτήσεις) Αν η F είναι κυρτή συνάρτηση, κάθε τοπικό της ελάχιστο \vec{x}^* αποτελεί και καθολικό ελάχιστό της. Αν, επιπλέον, η F είναι διαφορίσιμη, τότε κάθε στάσιμο σημείο \vec{x}^* είναι καθολικό ελάχιστο της F .

Απόδειξη: Ας υποθέσουμε ότι το \vec{x}^* είναι τοπικό αλλά όχι καθολικό ελάχιστο. Τότε, υπάρχει $\vec{z} \in \mathbb{R}^N$ τέτοιο ώστε $F(\vec{z}) < F(\vec{x}^*)$. Ας ορίσουμε εδώ το $\vec{x} = \lambda \vec{z} + (1 - \lambda) \vec{x}^*$, με τα ίδια όρια με $\lambda \in (0, 1]$. Αφού η F είναι κυρτή, θα ισχύει ότι

$$F(\vec{x}) < \lambda F(\vec{z}) + (1 - \lambda) F(\vec{x}^*) < F(\vec{x}^*)$$

Στη γειτονιά του \vec{x}^* ανήκει πάντα ένα τμήμα του ευθύγραμμου τμήματος που περιγράφει η προηγούμενη σχέση (για κάποιες τιμές του λ), άρα θα υπάρχουν σημεία \vec{x} στη γειτονιά αυτή για τα οποία η τελευταία εξίσωση ικανοποιείται. Άρα το \vec{x}^* δεν είναι τοπικό ελάχιστο. Με αντίστοιχο περίπου συλλογισμό αποδεικνύεται και το δεύτερο σκέλος του θεωρήματος. \diamond

2.2 Προβλήματα Πολλών Στόχων

Οι επόμενοι ορισμοί, μαθηματικές διατυπώσεις και θεωρήματα θα υποστηρίξουν, στη συνέχεια, την ενασχόλησή μας με προβλήματα πολλών στόχων. Για M στόχους, το πρόβλημα βελτιστοποίησης στοχεύει στην ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση των συνιστωσών της **διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης** $\vec{F}(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$, $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$.

Ορισμός 2.9 Ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης M στόχων ονομάζεται **κυρτό** αν οι M αντικειμενικές συναρτήσεις είναι όλες κυρτές και το σύνολο $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ των αποδεκτών λύσεων είναι επίσης κυρτό.

Η έννοια των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων, την οποία γνωρίσαμε στα παραδείγματα του κεφαλαίου 1 βοηθά πραγματικά να ξεπερασθεί το πρόβλημα της ιεράρχησης λύσεων στον πολυδιάστατο χώρο. Στο χώρο \mathbb{R}^2 υπάρχει εγγενές κενό στην ταξινόμηση των λύσεων, με την έννοια ότι το $(1, 1)^T \in \mathbb{R}^2$ είναι όντως μικρότερο του $(5, 5)^T$, αλλά υπάρχει αδυναμία σύγκρισής του με το $(0, 4)^T$ ή το $(4, 0)^T$. Η έννοια του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων (Pareto front) οφείλεται στο Γάλλο-Ιταλό οικονομολόγο και κοινωνιολόγο Vilfredo Pareto που, κατά κάποιο τρόπο, ολοκλήρωσε και έθεσε σε πρακτική χρήση αντίστοιχης σημασίας όρους που είχαν ήδη προταθεί από άλλους επιστήμονες.

Ακολουθεί ο ορισμός της κατά Pareto βέλτιστης λύσης και η συναφής έννοια της κυριαρχίας:

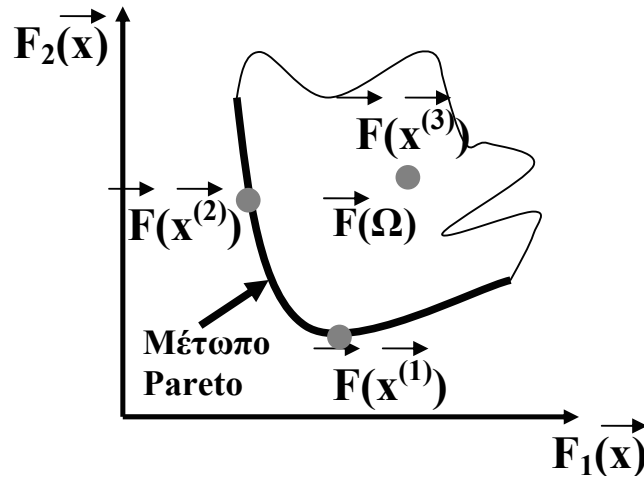
Ορισμός 2.10 Η λύση $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) **κυριαρχεί** της λύσης $\vec{y} \in \Omega$ και αυτό θα συμβολίζεται με

$$\vec{x} < \vec{y} \quad (2.5)$$

όταν και μόνο όταν ισχύει ότι $F_m(\vec{x}) \leq F_m(\vec{y})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και, συγχρόνως, υπάρχει ένας τουλάχιστον στόχος από αυτούς (έστω ο k) για τον οποίο η τελευταία σχέση ισχύει ως ανισότητα μόνο ($F_k(\vec{x}) < F_k(\vec{y})$).

Το σχήμα 2.1 ανατρέπει εποπτικά ένα πρόβλημα δύο στόχων (ελαχιστοποίηση των $F_1(\vec{x})$ και $F_2(\vec{x})$, δηλαδή $M = 2$), με τα διανύσματα \vec{x} των ελεύθερων παραμέτρων να ανήκουν στο \mathbb{R}^N . Αυτό που απεικονίζεται στο σχήμα είναι ο διδιάστατος χώρος (το επίπεδο, δηλαδή) των στόχων ή αντικειμενικών συναρτήσεων. Για το σχολιασμό και κατανόηση του σχήματος, η τιμή του N είναι πραγματικά αδιάφορη. Στο σχήμα

2.1 απεικονίζεται η εικόνα $\vec{F}(\Omega)$ του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω στο επίπεδο (F_1, F_2) και το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων του προβλήματος. Γίνεται άμεσα αντιληπτό γιατί η λύση $\vec{x}^{(1)}$ κυριαρχεί της $\vec{x}^{(3)}$ (αφού έχει μικρότερες τιμές και για τις δύο αντικειμενικές συναρτήσεις) αλλά και η αδυναμία ιεράρχισης δύο λύσεων $(\vec{x}^{(1)})$ και $(\vec{x}^{(2)})$ του μετώπου Pareto.



Σχήμα 2.1: Παρουσίαση στο επίπεδο των στόχων της εικόνας του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω και του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων.

Ας σημειωθεί ότι, αποκλειστικά για λόγους απλότητας, σχεδιάστηκε το $\vec{F}(\Omega)$ ως ένα κλειστό σύνολο. Θα μπορούσε να είναι ανοικτό ή, ακόμη συχνότερα σε πραγματικά προβλήματα, να αποτελείται από μεγάλο πλήθος κλειστών και ανοικτών συνόλων.

Στον ορισμό 2.10, ο κάτω δείκτης της διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης καθορίζει τη συνιστώσα της. Με βάση τον ορισμό της κυριαρχίας, προκύπτει εύκολα ο ορισμός της κατά Pareto βέλτιστης λύσης:

Ορισμός 2.11 Το διάνυσμα $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) αποτελεί κατά Pareto βέλτιστη λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης της $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ αν και μόνο αν δεν υπάρχει άλλη λύση $\vec{y} \in \Omega$ τέτοια ώστε $F_m(\vec{y}) \leq F_m(\vec{x})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και για έναν τουλάχιστον από αυτούς (έστω τον k) να ισχύει $F_k(\vec{y}) < F_k(\vec{x})$.

ή

Ορισμός 2.12 Η λύση $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^M$) αποτελεί κατά Pareto βέλτιστη λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης της $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ αν και μόνο αν δεν υπάρχει άλλη λύση $\vec{y} \in \Omega$ η οποία να κυριαρχεί της \vec{x} .

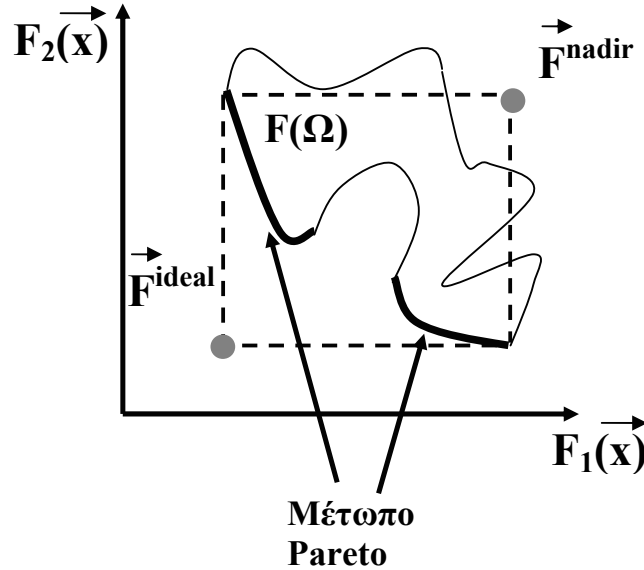
Οι ορισμοί 2.11 και 2.12 αντιστοιχούν σε κατά Pareto καθολικά βέλτιστες λύσεις του προβλήματος. Με τον ίδιο τρόπο που ορίστηκαν για προβλήματα ενός στόχου, εισάγεται στα προβλήματα πολλών στόχων ο όρος των κατά Pareto τοπικά βέλτιστων λύσεων. Είναι προφανές ότι η κατά Pareto τοπικά βέλτιστη λύση είναι και καθολικά βέλτιστη λύση. Το αντίστροφο ισχύει μόνο για για κυρτά προβλήματα βελτιστοποίησης, σύμφωνα με τον ορισμό 2.9. Έτσι (η απόδειξη συμβαδίζει με την απόδειξη του θεωρήματος 2.5):

Θεώρημα 2.6 (Καθολικό ελάχιστο σε κυρτές διανυσματικές συναρτήσεις)
 Αν η \vec{F} είναι κυρτή συνάρτηση, κάθε τοπικό της κατά Pareto ελάχιστο \vec{x}^* αποτελεί και κατά Pareto καθολικό ελάχιστό της.

Ορισμός 2.13 Το αντικειμενικό διάνυσμα $\vec{F}(\vec{x}) \in \mathbb{R}^M$ το οποίο αντιστοιχεί στην ελάχιστη δυνατή τιμή όλων των αντικειμενικών συναρτήσεων F_m , $m = 1, \dots, M$ θα ονομάζεται **ιδανικό ή τέλει αντικειμενικό διάνυσμα** (*ideal or perfect objective vector*).

Ο παραπάνω ορισμός χρειάζεται επιπλέον σχόλια και διευκρινήσεις ώστε να γίνει σωστά κατανοητός. Για να υπολογισθεί το ιδανικό αντικειμενικό διάνυσμα \vec{F}^{ideal} απαιτούνται να λυθούν **ανεξάρτητα** M προβλήματα ελαχιστοποίησης, ενός στόχου το καθένα (ένα για κάθε μια από τις M συνιστώσες της διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή, για τα F_m , $m = 1, \dots, M$). Επόμενως, δεν είναι απαραίτητο το σημείο που αντιστοιχεί στο \vec{F}^{ideal} να ανήκει στην εικόνα $\vec{F}(\Omega)$ του χώρου των αποδεκτών λύσεων. Μια τέτοια περίπτωση απεικονίζεται χαρακτηριστικά στο σχήμα 2.2. Προσέξτε, στην περίπτωση του σχήματος 2.2, ότι το μέτωπο Pareto αποτελείται από δύο διακριτά τμήματα της περιβάλλουσας το σύνολο $\vec{F}(\Omega)$. Είναι προφανές ότι, αν $\vec{F}^{ideal} \in \vec{F}(\Omega)$, τότε το αντίστοιχο διάνυσμα \vec{x} αποτελεί και τη ζητούμενη λύση στο πρόβλημα, αφού ελαχιστοποιεί όλες τις αντικειμενικές συναρτήσεις. Δυστυχώς, αυτό σπάνια συμβαίνει και, έτσι, οι περισσότερες μέθοδοι καταφεύγουν στον υπολογισμό μετώπου κατά Pareto βέλτιστων λύσεων. Ακόμα, όμως, και σε αυτές τις περιπτώσεις, το ιδανικό αντικειμενικό διάνυσμα χρησιμεύει μεταξύ άλλων ως ‘οδηγός’ (χαμηλότερο όριο ή απλά σημείο αναφοράς) για την τοποθέτηση σε ‘πλαίσιο’ (με μετρήσιμα χαρακτηριστικά) του μετώπου Pareto. Με ένα τέτοιο ‘πλαίσιο’, γίνεται δυνατή η ποσοτική σύγκριση μετώπων Pareto υπολογισμένων από διαφορετικούς αλγορίθμους.

Λιγότερο προφανές στον ορισμό του (με εξαίρεση την περίπτωση $M = 2$, βλ. σχήμα 2.2) είναι το **ναδίρ ή μη-τέλει αντικειμενικό διάνυσμα** (*nadir or non-perfect objective vector*, \vec{F}^{nadir}). Για τον υπολογισμό του, χρειάζεται να σχηματισθεί ένας βοηθητικός πίνακας διάστασης $M \times M$ (ονομάζεται **αντισταθμιστικός πίνακας**, *payoff table*). Οι γραμμές του αποτελούνται από τις τιμές των συνιστωσών των αντικειμενικών διανυσμάτων που προέκυψαν από την ελαχιστοποίηση κάθε στόχου χωριστά, δηλαδή κατά τη διαδικασία που έγινε ώστε να βρεθεί το \vec{F}^{ideal} . Το ήδη γνωστό \vec{F}^{ideal} έχει, προφανώς, συνιστώσες τα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου του



Σχήμα 2.2: Παρουσίαση στο επίπεδο των στόχων της εικόνας του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω , του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων του ιδανικού και ναδύρ αντικειμενικών διανυσμάτων.

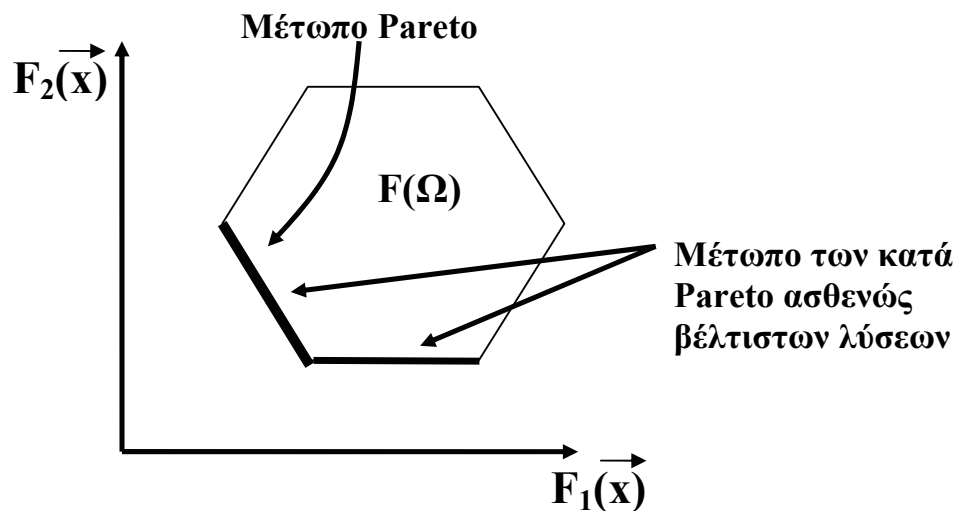
αντισταθμιστικού πίνακα. Αν, τώρα, από κάθε στήλη του ίδιου πίνακα καταγράψουμε το αριθμητικά μέγιστο στοιχείο κάθε στήλης του, σχηματίζονται οι συνιστώσες του \vec{F}^{nadir} .

Το ναδύρ αντικειμενικό διάνυσμα χρησιμοποιείται (μαζί με το ιδανικό) για τον καθορισμό του πλαισίου ποσοτικοποίησης του μετώπου Pareto.

Εκτός από τις κατά Pareto βέλτιστες λύσεις που ορίστηκαν προηγουμένως (ορισμοί 2.11 και 2.12, υπάρχουν και κατά περίπτωση χρησιμοποιούνται και άλλοι συναφείς ορισμοί. Έτσι:

Ορισμός 2.14 Το διάνυσμα $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) αποτελεί κατά Pareto ασθενώς βέλτιστη λύση (weakly Pareto optimal solution) του προβλήματος ελαχιστοποίησης της $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ αν και μόνο αν δεν υπάρχει άλλη λύση $\vec{y} \in \Omega$ τέτοια ώστε $F_m(\vec{y}) < F_m(\vec{x})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$).

Στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων, ένα αντικειμενικό διάνυσμα ονομάζεται κατά Pareto ασθενώς βέλτιστο αν δεν υπάρχει άλλο με μικρότερες τις τιμές όλων των συνιστωσών του. Για το απλό αλλά εποπτικό παράδειγμα του σχήματος 2.3 διακρίνετε το ασθενώς βέλτιστο μέτωπο (δύο πλευρές του εξαγώνου) από το ‘κλασικό’ μέτωπο Pareto (μια μόνο πλευρά).



Σχήμα 2.3: Παρουσίαση στο επίπεδο των στόχων της εικόνας του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω , του μετώπου των κατά Pareto ασθενώς βέλτιστων λύσεων και του αντίστοιχου μετώπου Pareto.

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή

Στο κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε την πιο γνωστή και βασική κατηγορία μεθόδων ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης, αυτήν της **ανίχνευσης κατά γραμμή** (line search methods). Προς το παρόν, ας θεωρήσουμε ότι τα προβλήματα βελτιστοποίησης που μας απασχολούν διατυπώνονται στη μορφή ελαχιστοποίησης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, χωρίς η λύση να υπόκειται σε περιορισμούς ισότητας ή ανισότητας. Αναφερόμαστε, δηλαδή, σε προβλήματα ενός στόχου ή σε προβλήματα πολλών στόχων αρκεί τα τελευταία να έχουν διατυπωθεί στη μορφή μιας αντικειμενικής συνάρτησης προς ελαχιστοποίηση. Το θέμα της διαχείρισης των περιορισμών, αν υπάρχουν, θα μας απασχολήσει σε επόμενο κεφάλαιο.

Η παρουσίαση που θα ακολουθήσει θα καλύψει ένα εύρος μεθόδων που αναζητούν τη βέλτιστη λύση πραγματοποιώντας μια διαδρομή μορφής ζιγκ-ζαγκ στο χώρο των λύσεων: θα αρχίσουμε από την πιο προφανή, αυτή της απότομης καθόδου και θα καταλήξουμε στην περισσότερο ισχυρή και σύνθετη, αυτή των συζυγών κλίσεων. Όλες τους είναι επαναληπτικές ή βηματικές: κάθε ευθύγραμμο τμήμα δηλαδή κάθε κλάδος της διαδρομής ζιγκ-ζαγκ αποτελεί ένα βήμα ή μια πρόοδο της λύσης, η οποία ξεκίνησε από μια αρχική τιμή και εξελίσσεται προς τη βέλτιστη. Μεταξύ των μεθόδων που θα παρουσιασθούν, υπάρχουν διαφορές ως προς το πως υπολογίζεται η νέα κατεύθυνση έρευνας σε κάθε νέο βήμα αλλά και ως προς το ποιο είναι το μήκος του βήματος στην κατεύθυνση αυτή.

Ανατρέχοντας τις μεθόδους αυτές από την πλευρά του μηχανικού που ενδιαφέρεται να τις χρησιμοποιήσει για προβλήματα αναζήτησης βέλτιστων λύσεων στην αεροδυναμική (και όχι από την πλευρά του μαθηματικού που αναζητεί τη θεμελίωση και απόδειξη της σχετικής θεωρίας) η κριτική τους γίνεται με διαφορετικά κριτήρια. Έτσι, θα δίνουμε έμφαση κυρίως στο τι πληροφορία χρειάζεται κάθε μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή ώστε να πραγματοποιήσει το επόμενο βήμα, αν είναι εύκολο ή πόσο υπολογιστικά επίπονο είναι να αποκτηθεί αυτή η πληροφορία, κλπ. Δίνουμε ένα απλό παράδειγμα: το να χρησιμοποιεί λ.χ. μια μέθοδος βελτιστοποίησης το μητρώο Hess της αντικειμενικής συνάρτησης, που μπορεί να είναι συνάρτηση της άνωσης ή της αντίστασης, δηλαδή δεύτερες παραγώγους, την καθιστούν εκ προοιμίου δυσεφάρμοστη.

Σε μια τέτοια περίπτωση, όσο ‘καλή’ και αν φαίνεται η μέθοδος βελτιστοποίησης, ο μηχανικός ενδεχομένως σκέφτεται να χρησιμοποιήσει μια άλλη μέθοδο, ίσως λιγότερο ‘καλή’ αλλά που παρακάμπτει αυτήν την απαίτηση. Εναλλακτικά, προσπαθεί τουλάχιστον να εξετάσει την περίπτωση να προσεγγίσει, αντί να υπολογίσει ακριβώς, το μητρώο Hess, ελπίζοντας ότι η πρακτική αυτή παρέμβαση δεν θα καταστρέψει ιδιαίτερα την αποτελεσματικότητα που θεωρητικά υπόσχεται η μέθοδος.

Έχοντας διαρκώς υπόψη τις παραπάνω παρατηρήσεις, στην παρουσίαση των μεθόδων που θα ακολουθήσει θα αναφερόμαστε στο πρόβλημα ελαχιστοποίησης τιμής της **αντικειμενικής συνάρτησης** $F(\vec{x})$, $F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$. Μια τέτοια σχέση υπονοεί ότι το πρόβλημα βελτιστοποίησης που καλούμαστε να λύσουμε έχει N ελεύθερες μεταβλητές και ένα στόχο και, επιπλέον, ότι θα ασχοληθούμε προς το παρόν με προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η διαχείριση προβλημάτων ελαχιστοποίησης επιτρέπει εναλλακτικά τη χρήση του όρου **συνάρτηση κόστους** (cost function) αντί της αντικειμενικής συνάρτησης.

Επειδή, όπως θα δούμε παρακάτω, όλες οι μέθοδοι που θα παρουσιασθούν απαιτούν τον υπολογισμό (τουλάχιστον) της τιμής της $\nabla F(\vec{x})$, η μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή αποτελεί το βασικότερο αντιπρόσωπο μιας κατηγορίας αλγορίθμων βελτιστοποίησης που φέρονται με το γενικό τίτλο **μέθοδοι βασισμένες στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης** (gradient-based methods). Κάθε μέθοδος που έχει αυτή την απαίτηση, για το μαθηματικό προϋποθέτει συνέχεια της $F(\vec{x})$ και συχνά και συνέχεια πρώτων παραγώγων. Ο μηχανικός που ασχολείται με προβλήματα βελτιστοποίησης σε εφαρμογές της αεροδυναμικής καλείται, αυτόματα, να παρακάμψει ‘έξυπνα’ αυτό το πρόβλημα. Ας πάρουμε για παράδειγμα τη βελτιστοποίηση μορφής μιας αεροτομής σε συνθήκες ατριβούς ροής και δεδομένες (διηχητικές) συνθήκες ροής. Παράμετροι \vec{x} της βελτιστοποίησης θα είναι γεωμετρικά χαρακτηριστικά της αεροτομής (το ποιά εξαρτάται από την παραμετροποίηση που θα επιλεγεί) και στόχος είναι να ελαχιστοποιηθεί ο συντελεστής αντίστασης c_D , διατηρώντας σταθερή την τιμή του συντελεστή άνωσης $c_L = c_{L,desired}$. Αφού ασχολούμαστε με προβλήματα ελαχιστοποίησης, η αντικειμενική συνάρτηση θα μπορούσε να είναι η $F(\vec{x}) = (c_L - c_{L,desired})^2 + \frac{\beta}{c_D}$ (όπου το β συντελεστής που ορίζει ο χρήστης). Στην τιμή του c_D , ουσιαστικά συνεισφέρει το κρουστικό κύμα και αυτό που επιδιώκει ο μηχανικός είναι να το ‘εξαφανίσει’, διατηρώντας συγχρόνως την επιθυμητή τιμή άνωσης. Γίνεται αμέσως αντιληπτό ότι, αφενός εμπλέκεται η (αριθμητική) επίλυση των εξισώσεων Navier–Stokes κάθε φορά που χρειάζεται η τιμή της $F(\vec{x})$, αφετέρου η λύση θα παρουσιάζει ασυνέχειες (κρουστικά κύματα). Άρα κάθε συζήτηση για συνέχεια της $F(\vec{x})$ έχει αποκλειστικά θεωρητικό χαρακτήρα. Κι όμως, ο μηχανικός (σε πείσμα του μαθηματικού) πρέπει να λύσει αυτό το πρόβλημα.

Μια τελευταία εισαγωγική παρατήρηση αφορά τον τρόπο που θα παρουσιασθούν οι μέθοδοι αυτές. Στο κεφάλαιο αυτό, παρόλο που ενδιαφερόμαστε αποκλειστικά για μη-γραμμικές αντικειμενικές συναρτήσεις (με όλες, μάλιστα, τις επιπλέον δυσκολίες που αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο) θα εισάγουμε κάθε μέθοδο πρώτα για **γραμμικά προβλήματα**. Σε πολλά δε σημεία, ίσως φανεί ανισοβαρής η ενασχόληση με τη γραμμική παραλλαγή της μεθόδου. Αυτό γίνεται σκόπιμα από το γράφοντα, επειδή βασικό μέλημά του είναι ο σπουδαστής να κατανοήσει τη φυσική σημασία και την

ιδέα που κρύβει η κάθε μέθοδος. Αυτό μπορεί να γίνει μόνο με την παρουσίαση γραμμικών προβλημάτων. Αλλιώς, οι σημειώσεις αυτές θα εκφυλίζονταν στην παράθεση ‘αλγορίθμων’ που ο φοιτητής πρέπει να μάθει να υλοποιεί, χωρίς δυστυχώς να κατανοεί το γιατί ‘δουλεύει’ (αν και αυτό σπάνια μας ενδιαφέρει) η μια μέθοδος και το γιατί ‘δεν δουλεύει’ ή ‘τι χρειάζεται για να δουλέψει’ καλύτερα η άλλη, κοκ.

3.1 Βασική Αρχή κάθε Μεθόδου Ανίχνευσης κατά Γραμμή

Η βασική αρχή της επαναληπτικής μεθόδου ανίχνευσης κατά γραμμή είναι να δημιουργείται η επόμενη προσέγγιση \vec{x}^{n+1} της λύσης χρησιμοποιώντας την τρέχουσα \vec{x}^n και μια κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n (search direction), σύμφωνα με το σχήμα

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta \vec{p}^n \quad (3.1)$$

όπου η είναι μια βαθμωτή ποσότητα που ρυθμίζει το μήκος του βήματος (step length) στην κατεύθυνση \vec{p}^n . Ο άνω δείκτης n θα συμβολίζει τον αριθμό της επανάληψης ή βήματος. Όπως ήδη αναφέρθηκε, οι μέθοδοι ανίχνευσης κατά γραμμή διαφέρουν κυρίως ως προς τον υπολογισμό της κατεύθυνσης ανίχνευσης \vec{p}^n και, δευτερευόντως, ως προς τον τρόπο υπολογισμού του η . Ανάλογα με την παραλλαγή της μεθόδου που θα χρησιμοποιήσουμε, μπορεί η τιμή του η να είναι σταθερή με τις επαναλήψεις ή, αφού έχει ήδη επιλεγεί η κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n , το η να υπολογίζεται εκ νέου σε κάθε βήμα. Στην τελευταία περίπτωση, είναι ορθότερο να ξαναγραφεί η σχέση 3.1 ως

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n \quad (3.2)$$

και να διατυπωθεί μαθηματικά το ζητούμενο ως

$$\min_{\eta^n > 0} F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) \quad (3.3)$$

Έχοντας προεπιλέξει την κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n , η σχέση 3.3 κρύβει ένα νέο μονοπαραμετρικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, που σχετίζεται με την εύρεση της ελάχιστης τιμής της $F(\vec{x})$ σε μια συγκεκριμένη κατεύθυνση, με άγνωστο το η^n . Πέρα από κάθε μέθοδο που θα παρουσιάσουμε στη συνέχεια, μπορούμε να κάνουμε δύο πρακτικά σχόλια σχετικά με τον τρόπο υπολογισμού της τιμής του η ή η^n στο επαναληπτικό σχήμα:

- (α) Η περίπτωση σταθερής τιμής του η είναι η απλούστερη. Προφανώς, δεν εξασφαλίζει την ταχύτερη σύγκλιση στη βέλτιστη λύση. Μάλιστα, αν διαθέτουμε τρόπο επιλογής της κατεύθυνσης ανίχνευσης \vec{p}^n , μια απλή (με ελάχιστο κόπο από τον προγραμματιστή) λύση είναι να επιλεγεί μια μικρή τιμή του η , ελπίζοντας ότι έτσι ο αλγόριθμος θα συγκλίνει αργά αλλά σταθερά. Προφανώς, κάτι τέτοιο δεν συνιστάται, αλλά κάποιες φορές χρησιμοποιείται αν λ.χ. πρόκειται να λύσουμε ένα απλό πρόβλημα μια μόνο φορά. Θα τονίσουμε πάντως ότι, εννοιολογικά, τουλάχιστον, η επιλογή σταθερού η δεν δικαιολογεί τον τίτλο μιας

μεθόδου που ανιχνεύει (δηλαδή αναζητά το μέγιστο κέρδος) σε μια συγκεκριμένη γραμμή, αυτή της διεύθυνσης \vec{p}^n .

- (β) Η αντιδιαμετρικά ακραία περίπτωση, όπου το πρόβλημα 3.3 λύνεται πλήρως ως προς η^n σε κάθε νέα επανάληψη και πραγματικά επιτυγχάνεται το μέγιστο κέρδος καθώς η μέθοδος ανιχνεύει σαρώνοντας την ευθεία με αφετηρία το \vec{x}^n κατά με κατεύθυνση \vec{p}^n , στοιχίζει ακριβιά σε χρόνο υπολογιστή. Είναι όμως πιο σημαντικό και χρήσιμο να τονίσουμε ότι η λεπτομερής ανίχνευση κάθε φορά κατά \vec{p}^n μπορεί να είναι αναίτια και επιβλαβής για την τελική σύγκλιση.

Επομένως, θα μπορούσε κανείς να υιοθετήσει μια ενδιάμεση διαδικασία υπολογισμού του η^n κατά την οποία ο αλγόριθμος δημιουργεί ένα μικρό αριθμό τιμών του η^n (άρα, βημάτων) κατά \vec{p}^n , από αυτά επιλέγει αυτό που δίνει μικρότερη (όχι αναγκαστικά την ελάχιστη) τιμή στην $F(\vec{x}^n)$ και συνεχίζει με το επόμενο βήμα, κοκ.

Σχετικά με τη σχέση 3.3, αφήνουμε προς το παρόν ανοικτό το θέμα της επίλυσης της, με την έννοια ότι θα ήταν εύκολα επιλύσιμη σε ένα γραμμικό πρόβλημα αλλά, σε ένα μη-γραμμικό πρόβλημα, η επίλυσή της θα έχει ενδεχομένως μεγάλο υπολογιστικό κόστος και θα θέτει ένα επιπλέον πρόβλημα: το με ποιά μέθοδο θα επιλυθεί. Στο θέμα αυτό θα επανέλθουμε αρκετές φορές στη συνέχεια.

Ακολουθούν οι βασικότερες μέθοδοι βελτιστοποίησης με ανίχνευση κατά γραμμή.

3.2 Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου

Στη μέθοδο της απότομης καθόδου (steepest descent method), η εφαρμογή της σχέσης 3.2 ανανέωσης της τιμής του διανύσματος \vec{x} γίνεται επιλέγοντας ως κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n το αντίθετο του τοπικού διανύσματος κλίσης της συνάρτησης $F(\vec{x}^n)$. Αφού η κλίση της $F(\vec{x})$, δηλαδή το διάνυσμα $\nabla F(\vec{x})$, δείχνει σε κάθε σημείο την κατεύθυνση μέγιστης μεταβολής της τιμής της $F(\vec{x})$, (η κατεύθυνση $-\nabla F(\vec{x}^n)$ είναι ορθογώνια στις ισο- F γραμμές που διέρχονται από το σημείο \vec{x}^n) η επιλογή του διανύσματος

$$\vec{p}^n = -\nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.4)$$

ως κατεύθυνσης ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης έχει προφανή αιτιολογία. Για λόγους πληρότητας, παραθέτουμε το ανάπτυγμα Taylor

$$F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) = F(\vec{x}^n) + \eta^n \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + O(\eta^2) \quad (3.5)$$

όπου, το πρόσημο του δεύτερου όρου στο δεξιό μέλος (αρνητική ποσότητα για $\eta^n > 0$) δικαιολογεί και την επιλογή της σχέσης 3.4. Παρακάτω θα δείξουμε και θα συζητήσουμε αν όντως είναι η καλύτερη επιλογή.

Χαρακτηριστικό της μεθόδου της απότομης καθόδου είναι ότι απαιτεί, σε κάθε νέα θέση, τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης και πλεονέκτημά της ότι δεν απαιτεί πληροφορία για το μητρώο Hess (δεύτερες παραγώγους). Η απόδοσή της εξαρτάται από την αρχική λύση \vec{x}^0 , το η^n και, προφανώς, τη μορφή της συνάρτησης.

Είναι καλή μέθοδος για απλά προβλήματα αλλά γίνεται ιδιαίτερα αργή και αναποτελεσματική στα πολύπλοκα προβλήματα (ας μην ξεχνάμε ότι στην αεροδυναμική τα προβλήματα βελτιστοποίησης είναι πάντα πολύπλοκα).

3.2.1 Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου σε Γραμμικά Προβλήματα

Για τους λόγους που προαναφέραμε, θα ασχοληθούμε παρενθετικά με την παραλλαγή της μη-γραμμικής μεθόδου της απότομης καθόδου για γραμμικά προβλήματα. Συγκεκριμένα, για τη μορφή που επιλύει γραμμικά συστήματα της μορφής

$$A \vec{x} = \vec{b} \quad (3.6)$$

Το θέμα της αριθμητικής επίλυσης γραμμικών συστημάτων καλύπτεται από τα μαθήματα της Αριθμητικής Ανάλυσης. Εδώ, όμως, ας προσπαθήσουμε να παρουσιάσουμε μια διαφορετική όψη του προβλήματος. Καταρχή, αντί να αναφερόμαστε στο 'εύκολο' πρόβλημα 3.6 (που, εκ πρώτης όψεως, λίγο σχετίζεται με θέματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική – αν και υπάρχει και η άποψη ότι ένα μη-γραμμικό πρόβλημα με κατάλληλη γραμμικοποίηση μπορεί να αντιμετωπιστεί μέσω της πολλαπλής επίλυσης γραμμικών προβλημάτων, άρα να που υπεισέρχεται η σχέση 3.6 !) ας επαναδιατυπώσουμε το πρόβλημα ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης της τιμής μιας αντικειμενικής συνάρτησης. Για να γίνει αυτό, θα προηγηθεί ο ορισμός της τετραγωνικής μορφής ενός διανύσματος:

Ορισμός 3.1 Ορίζουμε ως **τετραγωνική μορφή** (*quadratic form*) ενός διανύσματος \vec{x} κάθε βαθμωτή συνάρτηση της μορφής

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{x}^T A \vec{x} - \vec{b}^T \vec{x} + c \quad (3.7)$$

όπου A ένα τετραγωνικό μητρώο και c μια βαθμωτή σταθερά.

Η σταθερά c μπορεί να απουσιάζει από τη γραφή 3.7, αφού ούτως ή άλλως δεν προσφέρει τίποτα στην αναζήτηση του \vec{x}^* που ελαχιστοποιεί την $F(\vec{x})$. Το επόμενο θεώρημα είναι σημαντικό:

Θεώρημα 3.1 Αν το A είναι συμμετρικό και θετικά ορισμένο μητρώο, τότε το ελάχιστο της $F(\vec{x})$ (σχέση 3.7) ταυτίζεται με τη λύση του γραμμικού συστήματος 3.6, είναι δηλαδή το $\vec{x}^* = A^{-1} \vec{b}$ το οποίο αποτελεί και το καθολικό ελάχιστο της $F(\vec{x})$.

Απόδειξη: Η κλίση της 3.7 είναι

$$\nabla F(\vec{x}) = \frac{1}{2} A^T \vec{x} + \frac{1}{2} A \vec{x} - \vec{b} \quad (3.8)$$

η οποία, όταν το A είναι συμμετρικό, γράφεται ως

$$\nabla F(\vec{x}) = A\vec{x} - \vec{b} \quad (3.9)$$

Συνεπώς, μηδενίζοντας την κλίση της τετραγωνικής συνάρτησης 3.7 οδηγούμαστε πράγματι στη λύση του γραμμικού συστήματος 3.6. \diamond

Σημειώστε ότι, αν το μητρώο A δεν ήταν συμμετρικό, τότε η 3.8 απλά μας προτρέπει να αναζητήσουμε το ελάχιστο της τετραγωνικής συνάρτησης στη λύση του συστήματος

$$\frac{1}{2}(A^T + A)\vec{x} = \vec{b} \quad (3.10)$$

Τέλος, στην 3.10 συγκρατείστε ότι το μητρώο $\frac{1}{2}(A^T + A)$ είναι συμμετρικό.

Αξίζει, πραγματικά, να κατανοήσουμε σε βάθος το γιατί μας απασχολούν οι τετραγωνικές μορφές των διανυσμάτων. Για την παρουσίαση που θα ακολουθήσει, ας θεωρήσουμε ότι το A είναι συμμετρικό μητρώο, χωρίς προς το παρόν να απαιτούμε ότι είναι και θετικά ορισμένο, παραδοχή που μέχρι τώρα αναφέρθηκε αλλά δεν χρησιμοποιήθηκε. Αν \vec{x}^* είναι η λύση της 3.6 και \vec{e} είναι οποιοδήποτε άλλο διάνυσμα, τότε

$$\begin{aligned} F(\vec{x}^* + \vec{e}) &= \frac{1}{2}(\vec{x}^* + \vec{e})^T A(\vec{x}^* + \vec{e}) - \vec{b}^T(\vec{x}^* + \vec{e}) + c \\ &= \frac{1}{2}\vec{x}^{*T} A \vec{x}^* + \vec{e}^T A \vec{x}^* + \frac{1}{2}\vec{e}^T A \vec{e} - \vec{b}^T \vec{x}^* - \vec{b}^T \vec{e} + c \\ &= \frac{1}{2}\vec{x}^{*T} A \vec{x}^* - \vec{b}^T \vec{x}^* + c + \vec{e}^T \vec{b} + \frac{1}{2}\vec{e}^T A \vec{e} - \vec{b}^T \vec{e} \\ &= F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2}\vec{e}^T A \vec{e} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Επειδή κάθε άλλο διάνυσμα \vec{x} μπορεί να προκύψει ως η υπέρθεση $\vec{x} = \vec{x}^* + \vec{e}$, αυτόματα δίνουμε στο διάνυσμα \vec{e} την έννοια σφάλματος (e=error) του \vec{x} σε σχέση με τη ζητούμενη λύση \vec{x}^* . Κάνοντας, τώρα, την επιπλέον παραδοχή ότι το A είναι και θετικά ορισμένο, τότε η βαθμωτή ποσότητα $\vec{e}^T A \vec{e}$ είναι πάντα θετική ($\vec{e} \neq 0$), άρα ισχύει ότι $F(\vec{x}) = F(\vec{x}^* + \vec{e}) > F(\vec{x}^*)$. Επομένως, μόλις δείξαμε ότι το \vec{x}^* είναι το καθολικό ελάχιστο της $F(\vec{x})$.

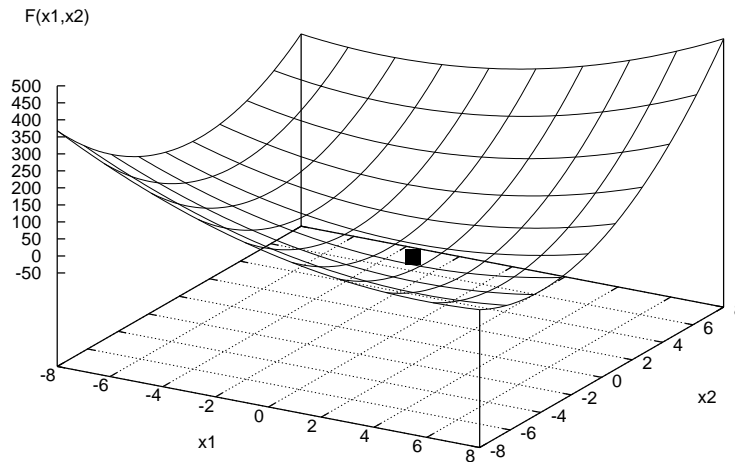
Ήδη πρέπει να έχει γίνει αντιληπτό ότι η αριθμητική επίλυση της 3.6 και η ελαχιστοποίηση της 3.7, με τις παραδοχές συμμετρικού και θετικά ορισμένου A , είναι το ίδιο πρόβλημα!

Επειδή μια αριθμητική εφαρμογή, σχετική με τα προηγούμενα αλλά και με πολλά άλλα σημεία στη συνέχεια, είναι πάντα χρήσιμη, προτρέπουμε αυτή να γίνει στην τετραγωνική μορφή 3.7 που δημιουργείται επιλέγοντας

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}, \quad c = 0 \quad (3.12)$$

για την οποία το καθολικό ελάχιστο της 3.7 είναι το διάνυσμα $\vec{x}^* = [2, -2]^T$. Το μητρώο A της 3.12 είναι θετικά ορισμένο και συμμετρικό.

Στο σχήμα 3.1 απεικονίζεται γραφικά η συνάρτηση 3.7 με τα δεδομένα της 3.12. Έχει παραβολοειδή μορφή, με το καθολικό ελάχιστο να βρίσκεται στο χαμηλότερο



Σχήμα 3.1: Γραφική παράσταση της μορφής της τετραγωνικής συνάρτησης 3.7 με τα δεδομένα της 3.12. Το ολικό ελάχιστο σημειώνεται πάνω στη γραφική παράσταση ως έντονο σημείο.

σημείο της επιφάνειας που ορίζει. Σημειώστε ότι το ίδιο θα συνέβαινε για οποιαδήποτε άλλη τετραγωνική μορφή, με συμμετρικό και θετικά ορισμένο A . Το ότι η επιφάνεια έχει παραβολοειδή μορφή αποτελεί πλεονέκτημα ως προς τις μεθόδους που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εύρεση του καθολικού ακρότατου. Πρακτικά, κάθε μέθοδος που ανιχνεύει κατά γραμμική ακολουθώντας καθοδική πορεία (πόσο μάλλον η μέθοδος της απότομης καθόδου) είναι εξασφαλισμένο ότι, αργά ή γρήγορα, θα εντοπίσει το καθολικό ακρότατο. Το ζητούμενο, βέβαια, είναι αυτό να επιτευχθεί με το μικρότερο αριθμό βημάτων, αφού ο υπολογισμός του $\nabla F(\vec{x})$ έχει υπολογιστικό κόστος.

Το υπόλοιπο της εξίσωσης 3.6 στη n -ιστή επανάληψη, με τρέχουσα λύση τη \vec{x}^n , θα συμβολίζεται με \vec{r}^n (r =residual) και θα ορίζεται ως

$$\vec{r}^n = \vec{b} - A\vec{x}^n \quad (3.13)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις 3.4, 3.9 και 3.13, προκύπτει ότι στη γραμμική μέθοδο της απότομης καθόδου ισχύει ότι

$$\vec{r}^n = \vec{p}^n = -\nabla F(\vec{x}^n) = \vec{b} - A\vec{x}^n \quad (3.14)$$

ενώ αξίζει να ξαναγράψουμε την 3.2 και ως

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{r}^n \quad (3.15)$$

Στο σημείο αυτό, απομένει να προτείνουμε μια έκφραση για τον υπολογισμό του η^n σε κάθε επανάληψη.

Με βάση την αρχή της ανίχνευσης κατά γραμμή (όπου κατατάσσεται και η παρούσα μέθοδος) αναζητούμε την τιμή του η^n που ελαχιστοποιεί την τιμή του $F(\vec{x}^{n+1})$ κατά την κατεύθυνση \vec{p}^n , καθώς κινούμαστε με αφετηρία το \vec{x}^n . Το ίδιο ισχύει, ασφαλώς, και για το αρχικό σημείο \vec{x}^0 . Γραφικά, στο σχήμα 3.1, η αναζήτηση αυτή αντιστοιχεί στο να φέρουμε την τομή του παραβολοειδούς με το κατακόρυφο επίπεδο που διέρχεται από το εκάστοτε σημείο $\vec{x}^n = (x_1^n, x_2^n)$ και είναι παράλληλο στο διάνυσμα \vec{p}^n και να αναζητήσουμε την τιμή του η^n που θα δώσει το ελάχιστο της τομήσ-καμπύλης αυτής. Μαθηματικά αυτό διατυπώνεται ως

$$\frac{d}{d\eta} F(\vec{x}^{n+1}) = \nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \frac{d}{d\eta} \vec{x}^{n+1} = 0 \quad (3.16)$$

και, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 3.14 και 3.15, τελικά ως

$$\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \vec{r}^n = -\vec{r}^{n+1T} \vec{r}^n = 0 \quad (3.17)$$

Η γεωμετρική σημασία της σχέσης 3.17 είναι εξαιρετική και κρύβει την ουσία της μεθόδου: η γραμμική μέθοδος της απότομης καθόδου προχωρεί με τέτοια ζιγκ-ζαγκ κίνηση ώστε, κάθε φορά, το υπόλοιπο της προηγούμενης και της τρέχουσας επανάληψης να είναι μεταξύ τους ορθογώνια. Από τη σχέση 3.14, την ορθογωνιότητα δύο διαδοχικών υπολοίπων τη γράφουμε και ως ορθογωνιότητα δύο διαδοχικών διανυσμάτων κατευθύνσεων ανίχνευσης, αφού

$$\vec{p}^{n+1T} \vec{p}^n = 0 \quad (3.18)$$

Η σχέση 3.18 αποκαλύπτει συγχρόνως και ένα σημαντικό μειονέκτημα της μεθόδου της απότομης καθόδου: δεν υπάρχει μηχανισμός που να αποτρέπει την επαναλαμβανόμενη ανίχνευση κατά την ίδια κατεύθυνση! Αυτό γίνεται κατανοητό στο παράδειγμα του σχήματος 3.1, όπου έχουμε δύο μεταβλητές και άρα κάθε κατεύθυνση ανίχνευσης είναι ένα διάνυσμα \vec{p}^n πάνω στο ίδιο επίπεδο. Αφού, με βάση τη σχέση 3.18, $\vec{p}^0 \perp \vec{p}^1$, $\vec{p}^1 \perp \vec{p}^2$, $\vec{p}^2 \perp \vec{p}^3$, κοκ, εύκολα γίνεται αντιληπτό ότι το \vec{p}^0 είναι παράλληλο του \vec{p}^2 , για τον ίδιο λόγο το \vec{p}^1 είναι παράλληλο του \vec{p}^3 , κοκ. Θα ήταν πραγματικά καλύτερο αν κάθε κατεύθυνση ανιχνεύονταν μόνο μια φορά και αυτό είναι η ιδέα στην οποία στηρίζονται επόμενες μέθοδοι.

Τέλος, η σχέση 3.17 μπορεί να οδηγήσει στον υπολογισμό του μήκους βήματος η^n . Ακολουθούν αναλυτικά οι αντίστοιχες πράξεις

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1T} \vec{r}^n &= 0 \\ (\vec{b} - A\vec{x}^{n+1})^T \vec{r}^n &= 0 \\ (\vec{b} - A(\vec{x}^n + \eta^n \vec{r}^n))^T \vec{r}^n &= 0 \\ (\vec{b} - A\vec{x}^n)^T \vec{r}^n - \eta^n (A\vec{r}^n)^T \vec{r}^n &= 0 \\ (\vec{b} - A\vec{x}^n)^T \vec{r}^n &= \eta^n (A\vec{r}^n)^T \vec{r}^n \\ \vec{r}^{nT} \vec{r}^n &= \eta^n \vec{r}^{nT} A \vec{r}^n \end{aligned}$$

που οδηγούν στην τελική έκφραση του η^n , που είναι η

$$\eta^n = \frac{\vec{r}^n T \vec{r}^n}{\vec{r}^n T A \vec{r}^n} \quad (3.19)$$

Ολοκληρώνοντας, ο αλγόριθμος της γραμμικής μεθόδου της απότομης καθόδου, διατυπωμένος σε μορφή που προγραμματίζεται άμεσα, συνοψίζεται στα εξής απλά βήματα:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης \vec{x}^0 . Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Υπολογισμός υπολοίπου $\vec{r}^n = \vec{b} - A \vec{x}^n$.

Βήμα 2: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\vec{r}^n T \vec{r}^n}{\vec{r}^n T A \vec{r}^n}$, (σχέση 3.19).

Βήμα 3: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{r}^n$.

Βήμα 4: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Το υπολογιστικό κόστος του αλγορίθμου ανά επανάληψη καθορίζεται ουσιαστικά από τους δύο πολλαπλασιασμούς μητρώου με διάνυσμα, στο πρώτο και δεύτερο βήμα. Είναι, εν τούτοις, δυνατό να αποφευχθεί ο ένας από αυτούς. Για το σκοπό αυτό, πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη της 3.15 με το μητρώο $-A$ και προσθέτουμε το διάνυσμα \vec{b} . Βήμα προς βήμα οι πράξεις δίνουν:

$$\begin{aligned} \vec{x}^{n+1} &= \vec{x}^n + \eta^n \vec{r}^n \\ \vec{b} - A \vec{x}^{n+1} &= \vec{b} - A \vec{x}^n - \eta^n A \vec{r}^n \\ \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^n - \eta^n A \vec{r}^n \end{aligned} \quad (3.20)$$

Με τη σχέση 3.20 μπορούμε πρακτικά να υπολογίσουμε το νέο υπόλοιπο χωρίς προηγουμένως να χρειαστεί να υπολογίσουμε το ανανεωμένο διάνυσμα λύσης. Έτσι, αρκεί να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση 3.20 στο βήμα 1 του προηγούμενου αλγορίθμου. Για λόγους πληρότητας, ξαναγράφουμε τον αλγόριθμο στη νέα, **οικονομική παραλλαγή του**:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης \vec{x}^0 . Δείκτης $n = 0$. Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\vec{r}^n = \vec{b} - A \vec{x}^n$.

Βήμα 1: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\vec{r}^n T \vec{r}^n}{\vec{r}^n T A \vec{r}^n}$, με αποθήκευση του διάνυσματος $A \vec{r}^n$ για επόμενη χρήση.

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{r}^n$.

Βήμα 3: Ανανέωση υπολοίπου $\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n - \eta^n A \vec{r}^n$, χρησιμοποιώντας το ήδη υπολογισμένο διάνυσμα $A \vec{r}^n$. Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$ και επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Το βασικό μειονέκτημα του νέου αλγορίθμου είναι ότι ο αναδρομικός τύπος 3.20 είναι επιρρεπής στη συσσώρευση σφαλμάτων στρογγύλευσης (round-off errors).

3.2.2 Εύρεση Μήκους Βήματος σε Μη-Γραμμικά Προβλήματα

Σχέσεις όπως η 3.19 είναι απλές και βολικές για να υπολογισθεί το μήκος βήματος, αλλά δυστυχώς ισχύουν μόνο για γραμμικά προβλήματα. Σε αυτούς που χρησιμοποιούν τη μέθοδο της απότομης καθόδου για προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, ελάχιστα μπορεί να προσφέρει η 3.19.

Γενικά, στα μη-γραμμικά προβλήματα η επιλογή του η^n κρύβει έναν προσεκτικό συμβιβασμό: θέλουμε η τιμή που θα επιλεγεί να οδηγήσει σε αισθητή μείωση τιμής την αντικειμενική συνάρτηση αλλά δεν είμαστε διατεθειμένοι να ‘πληρώσουμε’ την εύρεσή της με δυσανάλογα υψηλό υπολογιστικό κόστος. Γι’ αυτό συνήθως λύνουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα ελαχιστοποίησης 3.3 σε δύο βήματα. Πρώτα, επιλέγουμε άνω όριο στην τιμή του η^n και στη συνέχεια, με μια απλή μέθοδο ανίχνευσης όπως αυτή των διαδοχικών διχοτομήσεων, επιλέγουμε την ‘καλύτερη’ (χωρίς να μας απασχολεί αν είναι η βέλτιστη) τιμή του η^n . Και αυτό δεν γίνεται μόνο με κριτήριο το υπολογιστικό κόστος αλλά και με την πρακτική παρατήρηση ότι πολλές φορές είναι επιβλαβές για τη σύγκλιση του αλγορίθμου το να χρησιμοποιήσουμε το καθολικό βέλτιστο της 3.3.

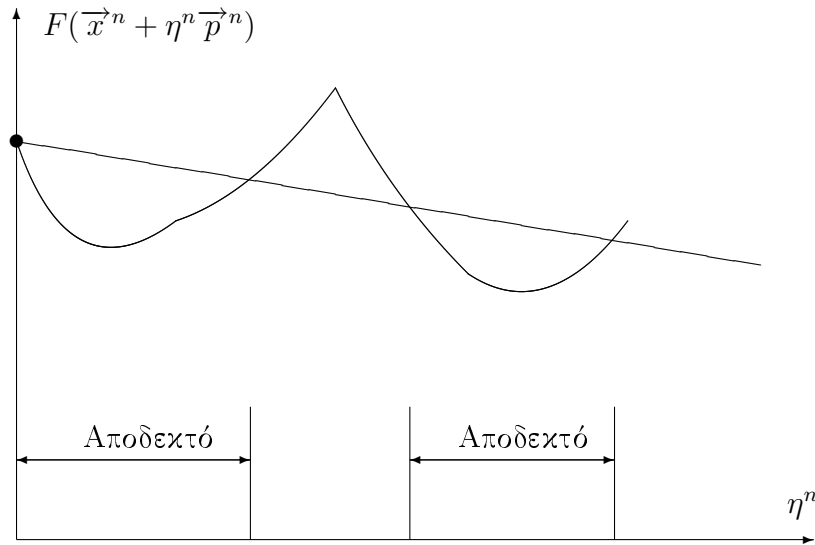
Στη λογική της μη-ακριβούς επίλυσης του μονοδιάστατου προβλήματος ελαχιστοποίησης 3.3 που ήδη αναφέραμε εντάσσεται ένας δημοφιλής τρόπος εργασίας, που μαθηματικά αντιστοιχεί στις λεγόμενες **συνθήκες του Wolfe**. Η απαίτηση είναι απλή και κατανοητή: επιθυμούμε η μείωση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης να διέπεται από την ανισότητα

$$F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) \leq F(\vec{x}^n) + c_1 \eta^n \nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n \quad (3.21)$$

με τη βαθμωτή ποσότητα c_1 να λαμβάνει τιμές στο διάστημα $(0, 1)$. Το γινόμενο $\nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n$ είναι αρνητικό (σχέση 3.4) και, έτσι, σύμφωνα με τη σχέση 3.21 η μείωση της τιμής της $F(\vec{x})$ είναι ανάλογη αφενός της τιμής του η^n και αφετέρου της κατά κατεύθυνση παραγώγου $\nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n$.

Αξίζει να κατανοήσουμε το τι σημαίνει η σχέση 3.21 και αυτό μπορεί να γίνει με τη βοήθεια του σχήματος 3.2. Σ’ αυτό, η καμπύλη γραμμή παριστάνει την πραγματική τιμή της $F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)$, για δεδομένα $F(\vec{x}^n)$ (πλήρης κύκλος, στο σχήμα) και $\nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n$ και συνεχή μεταβολή τιμής του η^n . Η κεκλιμένη ευθεία (η κλίση της αλλάζει αρκεί να επιλεγεί διαφορετική τιμή για τη σταθερά c_1) παριστάνει τη γραμμική σχέση 3.21 και δείχνει, για κάθε τιμή του η^n , το άνω όριο της $F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)$ που μπορεί να γίνει αποδεκτό. Επομένως, η επιλογή τιμής του η^n πρέπει να γίνει στο εύρος τιμών που στο σχήμα σημειώνεται ως ‘Αποδεκτό’, όπου δηλαδή ικανοποιείται η ανισότητα 3.21.

Παρά τη χρήσιμη καθοδήγηση που εισάγει η σχέση 3.21, εν τούτοις έχει το μειονέκτημα ότι δυστυχώς επιτρέπει επιλογές πολύ μικρών τιμών του η^n , άρα επιλογές που αποφέρουν ελάχιστη μείωση στην τιμή της $F(\vec{x})$. Για το λόγο αυτό, η παραπάνω πρώτη συνθήκη του Wolfe πρέπει να συμπληρωθεί με τη δεύτερη συνθήκη του Wolfe, σύμφωνα με την οποία επιβάλλεται επιπλέον η ανισότητα



Σχήμα 3.2: Γραφική παράσταση της φυσικής σημασίας της σχέσης 3.21, του τρόπου δηλαδή με τον οποίο υπολογίζεται το η^n , εφαρμόζοντας την πρώτη συνθήκη του Wolfe.

$$\nabla F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)^T \vec{p}^n \geq c_2 \nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n \quad (3.22)$$

με τη βαθμωτή ποσότητα c_2 να λαμβάνει τιμές στο διάστημα $(c_1, 1)$. Η σχέση 3.22 επιβάλλει η τιμή της παραγώγου της $F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)$ ως προς η^n , στο η^n που θα επιλεγεί, να είναι μεγαλύτερη της τιμής της ίδιας ποσότητας για $\eta^n = 0$. Δηλαδή, πρόκειται για συνθήκη που σχετίζεται με την καμπυλότητα. Επειδή η παράγωγος είναι αρνητική, η σχέση 3.22 μας ωθεί να επιλέξουμε η^n σε σημείο όπου η παράγωγος να είναι λιγότερο αρνητική, μηδέν ή (ακόμα καλύτερα) θετική, γεγονός που αποτελεί ένδειξη ότι μάλλον δεν ελπίζουμε σε ακόμα μεγαλύτερη μείωση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης (για διαφορετική επιλογή τιμής του η^n).

3.3 Η Μέθοδος της Καθόδου

Η μέθοδος της ('απλής', σε αντιδιαστολή με ότι ονομάσαμε 'απότομη') καθόδου αποτελεί γενίκευση της προηγούμενης μεθόδου. Με αφετηρία το ανάπτυγμα Taylor της 3.5, το γινόμενο $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n)$ γράφεται

$$\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) = \|\vec{p}^n\| \|\nabla F(\vec{x}^n)\| \cos\theta^n \quad (3.23)$$

Επιλέγοντας ως \vec{p}^n μια κατεύθυνση για την οποία $\cos\theta^n < 0$ (και όχι κατ' ανάγκη $\cos\theta^n = -1$ όπως στη μέθοδο της απότομης καθόδου) μπορούμε να δημιουργήσουμε παραλλαγές της μεθόδου της καθόδου που όλες εξασφαλίζουν ότι $F(\vec{x}^{n+1}) < F(\vec{x}^n)$, με την προϋπόθεση ότι το η^n θα επιλεγεί κατάλληλα. Γίνεται φανερό ότι η μέθοδος

αυτή παρουσιάζεται περισσότερο για λόγους πληρότητας, αφού γενικά η μέθοδος της απότομης καθόδου υπερτερεί.

Με την ευκαιρία, πάντως, είναι ενδιαφέρον να παρουσιάσουμε και μια άλλη γενική μαθηματική γραφή κάθε μεθόδου τύπου ‘καθόδου’. Για την επιλογή της κατεύθυνσης ανίχνευσης μπορεί να χρησιμοποιείται η γενική σχέση

$$\vec{p}^n = - (B^n)^{-1} \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.24)$$

όπου το B^n είναι συμμετρικό και αντιστρέψιμο μητρώο. Στη μέθοδο της απότομης καθόδου η επιλογή ήταν ο B^n να είναι το μοναδιαίο μητρώο. Η μέθοδος της καθόδου επιτρέπει άλλες επιλογές για το μητρώο B^n .

3.4 Η Μέθοδος Newton

Η μέθοδος Newton αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους αντιπροσώπους της κατηγορίας των μεθόδων ανίχνευσης κατά γραμμή. Για τη θεμελίωσή της αρκεί να γραφεί ξανά το ανάπτυγμα Taylor της 3.5 διατηρώντας επιπλέον τον όρο δεύτερης τάξης. Ισχύει η προσέγγιση (θεωρείστε προς το παρόν ότι $\eta^n = \eta = 1$, παραδοχή που θα σχολιάσουμε στη συνέχεια)

$$F(\vec{x}^n + \vec{p}^n) \approx F(\vec{x}^n) + \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n \quad (3.25)$$

Η απαίτηση μηδενικής πρώτης παραγώγου της (προσέγγισης της) $F(\vec{x}^n + \vec{p}^n)$ ως προς \vec{p}^n δίνει

$$\nabla F(\vec{x}^n) + \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n = 0$$

που καθορίζει τη κατεύθυνση ανίχνευσης για την τρέχουσα επανάληψη ως

$$\vec{p}^n = - (\nabla^2 F(\vec{x}^n))^{-1} \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.26)$$

Η τελευταία σχέση γράφτηκε με την προϋπόθεση ότι το μητρώο Hess $\nabla^2 F(\vec{x}^n)$ είναι θετικά ορισμένο. Αν αυτό δεν συμβαίνει, η κατεύθυνση που δίνει η 3.26 δεν ορίζεται, αφού δεν μπορεί να υπολογιστεί ο αντίστροφος του μητρώου Hess.

Προφανής διαφορά ανάμεσα στη μέθοδο της απότομης καθόδου και στη μέθοδο Newton είναι το ότι η τελευταία απαιτεί και τον υπολογισμό (ή, σε ορισμένες παραλλαγές της, την προσέγγιση) του μητρώου Hess της αντικειμενικής συνάρτησης. Η ανάγκη αυτή εισάγει μεγαλύτερες υπολογιστικές δυσκολίες αλλά και αυξημένο υπολογιστικό κόστος κατά την εφαρμογή της. Σύμφωνα με τις τελευταίες παρατηρήσεις, η μέθοδος Newton αξίζει να χρησιμοποιείται αν μπορεί να προκαλέσει αισθητά ταχύτερη σύγκλιση από τις προηγούμενες. Λίγα σχόλια για τον τρόπο που συγκλίνει η μέθοδος Newton ακολουθούν στη συνέχεια.

Ας συγκρίνουμε την προσεγγιστική σχέση 3.25 με το ακριβές ανάπτυγμα κατά Taylor της 2.3, που επαναλαμβάνεται εδώ για ευκολία,

$$F(\vec{x}^n + \vec{p}^n) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n + t \vec{p}^n) \vec{p}^n \quad (3.27)$$

με $t \in (0, 1)$. Η κατεύθυνση ανίχνευσης που υπολογίζει η μέθοδος Newton είναι αξιόπιστη όταν η απόκλιση ανάμεσα στην προσεγγιστική σχέση 3.25 και την ακριβή 3.27 είναι μικρή. Τονίζεται ότι η προσεγγιστική σχέση 3.25 είναι τετραγωνικής μορφής.

Το αν η επιλογή κατεύθυνσης ανίχνευσης από τη σχέση 3.26 οδηγεί σε μείωση τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή για το αν πραγματικά η μέθοδος Newton λειτουργεί ως μέθοδος καθόδου, διερευνάται υπολογίζοντας το πρόσημο του γινομένου $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n)$. Είναι

$$\begin{aligned} \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) &= \vec{p}^{nT} (-\nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n) = \\ &= - \vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n \end{aligned} \quad (3.28)$$

Το ότι το μητρώο Hess $\nabla^2 F(\vec{x}^n)$ είναι θετικά ορισμένο οδηγεί στη βεβαιότητα ότι $\vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n < 0$, άρα η μέθοδος Newton λειτουργεί ως μέθοδος καθόδου αφού $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) < 0$.

Θεωρητικά, αλλά και πρακτικά στις περισσότερες εφαρμογές της μεθόδου Newton, δεν υπεισέρχεται η βαθμωτή ποσότητα η^n ($\eta^n = 1$) που καθορίζει το μέγεθος του βήματος κατά την κατεύθυνση \vec{p}^n . Στη βιβλιογραφία θα συναντήσουμε παραλλαγές της μεθόδου Newton οι οποίες λειτουργούν μεν με $\eta^n = 1$, στην περίπτωση όμως που η παραπάνω τιμή δεν επιφέρει ‘επαρκή’ μείωση στην τιμή της F , τροποποιείται η τιμή του η^n με εμπειρικές διορθωτικές σχέσεις.

Επισημαίνεται ότι, σύμφωνα με τον τρόπο γραφής της σχέσης 3.24, στη μέθοδο Newton το B^n ταυτίζεται με το μητρώο Hess (συγκρίνετε με τη σχέση 3.26).

3.5 Η Προσεγγιστική Μέθοδος Newton

Πρόκειται για παραλλαγή της κλασικής (‘ακριβούς’) μεθόδου Newton η οποία διατηρεί το πλεονέκτημα του πολύ καλού ρυθμού σύγκλισης (ιδίως καθώς πλησιάζει τη βέλτιστη λύση, αν βέβαια έχουν γίνει οι σωστές επιλογές), εντούτοις αποφεύγει τον υπολογισμό του μητρώου Hess. Σύμφωνα με τη γραφή της σχέσης 3.24, κάθε προσεγγιστική μέθοδος Newton (Quasi-Newton) υπολογίζει και χρησιμοποιεί ως B^n μια προσέγγιση του μητρώου Hess. Για να υπάρχει σαφήνεια, εδώ το σύμβολο B θα παριστάνει το προσεγγιστικό μητρώο Hess.

Μια πρώτη ιδέα για υπολογισμό του μητρώου B βασίζεται σε ‘ισοδύναμα’ σχήματα πεπερασμένων διαφορών (άμεση συνέπεια αναπτυγμάτων κατά Taylor), σύμφωνα με τα οποία

$$\nabla^2 F(\vec{x}^{n+1}) (\vec{x}^{n+1} - \vec{x}^n) \approx \nabla F(\vec{x}^{n+1}) - \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.29)$$

(μέθοδος της τέμνουσας, secant method) οπότε το μητρώο B^{n+1} πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση

$$B^{n+1} \vec{s}^n = \vec{y}^n \quad (3.30)$$

όπου

$$\vec{s}^n = \vec{x}^{n+1} - \vec{x}^n \quad (3.31)$$

και

$$\vec{y}^n = \nabla F(\vec{x}^{n+1}) - \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.32)$$

Πρακτικά, στο μητρώο B^{n+1} επιβάλλεται ο περιορισμός να είναι συμμετρικό, όπως εξ άλλου συμμετρικό είναι κάθε μητρώο Hess.

Πρακτική αξία και ευρεία χρήση έχουν συναντήσει σχήματα τα οποία υλοποιούν αναδρομικούς τύπους ώστε να υπολογισθεί το μητρώο Hess στη νέα επανάληψη (έστω $n+1$) από το γνωστό μητρώο Hess της προηγούμενης (n) επανάληψης. Σε κάθε τέτοιο σχήμα, η αρχικοποίηση B^0 είναι συνήθως επιλογή του χρήστη, που πρέπει να ικανοποιεί τουλάχιστον την απαίτηση συμμετρίας.

Στη συνέχεια παραθέτουμε δύο από τις πιο γνωστές μεθόδους που υλοποιούν απευθείας τον υπολογισμό του B^{n+1} από το B^n . Αυτές είναι:

1. Μέθοδος SR1 (Symmetric Rank One), κατά την οποία

$$B^{n+1} = B^n + \frac{(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)^T}{(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)^T \vec{s}^n} \quad (3.33)$$

2. Μέθοδος BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), κατά την οποία

$$B^{n+1} = B^n - \frac{B^n \vec{s}^n \vec{s}^{nT} B^n}{\vec{s}^{nT} B^n \vec{s}^n} + \frac{\vec{y}^n \vec{y}^{nT}}{\vec{y}^{nT} \vec{s}^n} \quad (3.34)$$

Και οι δύο αυτές μέθοδοι ικανοποιούν την εξίσωση της τέμνουσας και εξασφαλίζουν ότι κάθε παραγόμενο μητρώο B^{n+1} είναι επίσης συμμετρικό (αρκεί, βέβαια, η αρχικοποίηση B^0 να είναι συμμετρική).

Εναλλακτικά ως προς τις σχέσεις 3.33 και 3.34, οι οποίες εκ των πραγμάτων απαιτούν την αντιστροφή του ανανεωμένου μητρώου B^{n+1} , προτείνεται η παρακάτω σχέση η οποία υπολογίζει και ανανεώνει απευθείας τον αντίστροφο του B που θα συμβολίσουμε με H (άρα $H^n = (B^n)^{-1}$ και $H^{n+1} = (B^{n+1})^{-1}$)

$$H^{n+1} = (I - \rho^n \vec{s}^n \vec{y}^{nT}) H^n (I - \rho^n \vec{y}^n \vec{s}^{nT}) + \rho^n \vec{s}^n \vec{s}^{nT} \quad (3.35)$$

όπου

$$\rho^n = \frac{1}{\vec{y}^{nT} \vec{s}^n} \quad (3.36)$$

Τότε, η κατεύθυνση ανίχνευσης προκύπτει άμεσα από τη σχέση

$$\vec{p}^n = -H^n \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.37)$$

3.6 Η Μέθοδος των Συζυγών Κατευθύνσεων

Τη μέθοδο των συζυγών κατευθύνσεων (conjugate directions), αν και η μορφή στην οποία θα παρουσιασθεί στη συνέχεια δεν χρησιμοποιείται συχνά (τα μειονεκτήματά της αναλύονται παρακάτω), αξίζει κανείς να τη γνωρίσει σε βάθος γιατί αποτελεί τον πρόδρομο της ευρύτατα χρησιμοποιούμενης μεθόδου των συζυγών κλίσεων. Και οι δύο μέθοδοι βασίζονται σε αντίστοιχες αρχές, έχοντας όμως συγκεκριμένες διαφορές. Ως διαφορετικές αξίζει να τις καταλάβει ο σπουδαστής, έστω και αν πολλά καλά βιβλία τις ενοποιούν και τις παρουσιάζουν ως μία.

Στην παρουσίαση της μεθόδου των συζυγών κατευθύνσεων θα κάνουμε εκτενή αναφορά στα γραμμικά προβλήματα, στην ελαχιστοποίηση δηλαδή της τετραγωνικής μορφής της σχέσης 3.7, για λόγους που ήδη έχουμε κάνει γνωστούς. Για εκπαιδευτικούς λόγους, η παρουσίαση της μεθόδου έχει χωριστεί σε μικρότερες ενότητες.

3.6.1 Η Έννοια της Συζυγίας

Αφετηρία για να δημιουργηθεί η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων υπήρξε η τάση να δημιουργηθεί μια μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή η οποία να χρησιμοποιεί κάθε κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n μια μόνο φορά. Για να γίνει κατανοητή αυτή η ανάγκη, θυμηθείτε ότι στη μέθοδο της απότομης καθόδου η κατεύθυνση \vec{p}^n μπορεί να συνέπιπτε με πολλές προηγούμενες ή επόμενες κατευθύνσεις ανίχνευσης.

Εκ πρώτης όψεως, η λύση θα ήταν απλά να ορίζονταν εξ αρχής οι κατευθύνσεις ανίχνευσης, με συγκεκριμένες ιδιότητες. Η πιο προφανής ιδιότητα θα ήταν η αμοιβαία καθετότητα: να επιλεγούν N κατευθύνσεις ανίχνευσης (για γραμμικό πρόβλημα διάστασης $N \times N$. Γιατί όχι περισσότερες από N ;) $\vec{p}^0, \vec{p}^1, \vec{p}^2, \dots, \vec{p}^{N-1}$ για τις οποίες να ισχύει

$$\vec{p}^{iT} \vec{p}^j = 0, \quad i \neq j \quad (3.38)$$

Το αν η επιλογή αυτή είναι καλή φαίνεται στο γραμμικό πρόβλημα 3.6. Από τη σχέση 3.2 ανανέωσης τιμών στο διάνυσμα των αγνώστων (αφαιρώντας και από τα δύο μέλη το \vec{x}^*) και με τον ορισμό του εκάστοτε σφάλματος

$$\vec{e}^n = \vec{x}^n - \vec{x}^* \quad (3.39)$$

(θυμίζουμε ότι \vec{x}^* είναι η ζητούμενη, άρα άγνωστη κατά την επίλυση βέλτιστη λύση), προκύπτει αμέσως ότι

$$\vec{e}^{n+1} = \vec{e}^n + \eta^n \vec{p}^n \quad (3.40)$$

Επειδή στόχος μας είναι, έχοντας μόλις ανιχνεύσει στην κατεύθυνση \vec{p}^n , με αφετηρία την τρέχουσα λύση \vec{x}^n , να μη χρειαστεί να επιστρέψουμε στην ίδια κατεύθυνση, απαιτούμε το νέο σφάλμα \vec{e}^{n+1} να μην περιέχει συνιστώσα κατά \vec{p}^n , ή απλά

$$\vec{p}^{nT} \vec{e}^{n+1} = 0 \quad (3.41)$$

Όμως, από τη σχέση 3.40, με αντικατάσταση στην προηγούμενη προκύπτει

$$\vec{p}^{nT} \vec{e}^n + \eta^n \vec{p}^{nT} \vec{p}^n = 0$$

από όπου προκύπτει η σχέση υπολογισμού του μήκους βήματος

$$\eta^n = - \frac{\vec{p}^{nT} \vec{e}^n}{\vec{p}^{nT} \vec{p}^n} \quad (3.42)$$

Δυστυχώς, η τελευταία σχέση είναι πραγματικά ‘μια τρύπα στο νερό’! Η σχέση 3.42 χρειάζεται το \vec{e}^n , η γνώση του οποίου είναι αδύνατη (αν το γνωρίζαμε θα γνωρίζαμε και τη λύση!)

Μόλις, δηλαδή, απορρίψαμε την ιδέα να χρησιμοποιηθεί η σχέση 3.38. Αντ’ αυτής εισάγουμε την έννοια της **συζυγίας (conjugacy)**, που μαθηματικά σημαίνει να απαιτήσουμε να είναι τα \vec{p}^i και \vec{p}^j **A-ορθογώνια (A-orthogonal)**, δηλαδή

$$\vec{p}^{iT} A \vec{p}^j = 0, \quad i \neq j \quad (3.43)$$

Αφήνουμε προς το παρόν κατά μέρος το με ποιον αλγόριθμο μπορούν να υπολογισθούν τέτοιες κατευθύνσεις ανίχνευσης και αναπτύσσουμε τις παράπλευρες σχέσεις της 3.43. Για το γραμμικό πρόβλημα, η έννοια του μέγιστου κέρδους (μέγιστη μείωση της τιμής της F , σχέση 3.7 ενώ ισχύει και η σχέση 3.14 που συνδέει το υπόλοιπο \vec{r}^n με την κλίση $\nabla F(\vec{x}^n)$) κατά γραμμή ανίχνευσης, σχέση 3.3, γράφεται κατά σειρά ως

$$\begin{aligned} \frac{dF(\vec{x}^{n+1})}{d\eta^n} &= 0 \\ \nabla F(\vec{x}^{n+1}) \frac{d\vec{x}^{n+1}}{d\eta^n} &= 0 \\ -\vec{r}^{n+1T} \vec{p}^n &= 0 \end{aligned} \quad (3.44)$$

επιβάλλοντας να είναι το νέο υπόλοιπο ορθογώνιο με την προηγούμενη κατεύθυνση ανίχνευσης. Επειδή όμως

$$\vec{r}^{n+1} = \vec{b} - A\vec{x}^{n+1} = \vec{b} - A(\vec{x}^* + \vec{e}^{n+1})$$

και $\vec{b} - A\vec{x}^* = 0$, ισχύει ότι

$$\vec{r}^{n+1} = -A\vec{e}^{n+1} \quad (3.45)$$

και η σχέση 3.44 γράφεται και ως

$$\vec{p}^{nT} A \vec{e}^{n+1} = 0 \quad (3.46)$$

Επιβάλλει, συνεπώς, να είναι το νέο σφάλμα A -ορθογώνιο με την προηγούμενη κατεύθυνση ανίχνευσης. Συγκρίνετε τη σχέση 3.41 (που, προηγουμένως την απορρίψαμε ως μη βολική και εξηγήσαμε το γιατί) με τη σχέση 3.46. Δεν απαιτούμε, πλέον, το νέο σφάλμα να είναι απλά ορθογώνιο αλλά A -ορθογώνιο ως προς την τελευταία κατεύθυνση ανίχνευσης που χρησιμοποιήθηκε. Υπενθυμίζεται, επιπλέον, ότι η 3.46 προέκυψε με αφετηρία τη σχέση 3.3, δηλαδή ισοδυναμεί με το να βρίσκουμε την ελάχιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης κατά την \vec{p}^n .

Επαναλαμβάνουμε τώρα τον υπολογισμό του μήκους βήματος. Είναι, με βάση τις προηγούμενες σχέσεις,

$$\begin{aligned} \vec{p}^{nT} A \vec{e}^{n+1} &= 0 \\ \vec{p}^{nT} A (\vec{e}^n + \eta^n \vec{p}^n) &= 0 \\ \vec{p}^{nT} A \vec{e}^n + \eta^n \vec{p}^{nT} A \vec{p}^n &= 0 \\ -\vec{p}^{nT} \vec{r}^n + \eta^n \vec{p}^{nT} A \vec{p}^n &= 0 \end{aligned}$$

και τελικά

$$\eta^n = \frac{\vec{p}^{nT} \vec{r}^n}{\vec{p}^{nT} A \vec{p}^n} \quad (3.47)$$

Σημειώστε ότι η σχέση 3.47 μοιάζει απόλυτα με την αντίστοιχη για τη γραμμική μέθοδο της απότομης καθόδου, σχέση 3.19, αν αντί του \vec{p}^n χρησιμοποιηθεί το \vec{r}^n . Σε αντίθεση με την 3.42, η 3.47 είναι μια σχέση που υπολογιστικά δεν παρουσιάζει δυσκολία.

3.6.2 Σύγκλιση σε N το πολύ Βήματα. Γιατί ;

Στην ενότητα αυτή θα παρουσιασθεί το θέμα της σύγκλισης της γραμμικής μεθόδου των συζυγών κατευθύνσεων σε N το πολύ βήματα. Έστω ότι η επίλυση ξεκινά από την αρχική λύση \vec{x}^0 και με αρχικό σφάλμα $\vec{e}^0 = \vec{x}^0 - \vec{x}^*$. Εκφράζουμε το αρχικό σφάλμα \vec{e}^0 ως γραμμικό συνδυασμό των N κατευθύνσεων ανίχνευσης

$$\vec{e}^0 = \sum_{j=0}^{N-1} \delta^j \vec{p}^j \quad (3.48)$$

και υπολογίζουμε τους συντελεστές δ ως εξής

$$\vec{p}^{nT} A \vec{e}^0 = \sum_{j=0}^{N-1} \delta^j \vec{p}^{nT} A \vec{p}^j = \delta^n \vec{p}^{nT} A \vec{p}^n$$

άρα

$$\delta^n = \frac{\vec{p}^{nT} A \vec{e}^0}{\vec{p}^{nT} A \vec{p}^n} \quad (3.49)$$

(ισχύει για κάθε τιμή του δείκτη n). Στον αριθμητή της σχέσης 3.49, αντικαθιστούμε το \vec{e}^0 με την ποσότητα $\vec{e}^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \eta^i \vec{p}^i$ και αυτό δεν αλλοιώνει τον αριθμητή αφού, λόγω της σχέσης 3.43, κάθε γινόμενο $\vec{p}^{nT} A \vec{p}^i$ (για $i < n$) είναι μηδενικό. Έτσι γίνεται

$$\delta^n = \frac{\vec{p}^{nT} A (\vec{e}^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \eta^i \vec{p}^i)}{\vec{p}^{nT} A \vec{p}^n}$$

Από τη σχέση 3.40 προκύπτει εύκολα ότι

$$\vec{e}^n = \vec{e}^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \eta^i \vec{p}^i \quad (3.50)$$

και η 3.49 παίρνει την τελική της μορφή

$$\delta^n = \frac{\vec{p}^{nT} A \vec{e}^n}{\vec{p}^{nT} A \vec{p}^n} \quad (3.51)$$

Η σύγκριση των σχέσεων 3.47 και 3.51, δεδομένης και της 3.45 (γραμμένης για n , αντί για $n+1$), οδηγεί στη σχέση

$$\delta^n = -\eta^n \quad (3.52)$$

Τελικά, λοιπόν, ισχύει ο γραμμικός συνδυασμός

$$\vec{e}^0 = - \sum_{j=0}^{N-1} \eta^j \vec{p}^j = \sum_{j=0}^{N-1} \delta^j \vec{p}^j \quad (3.53)$$

που εξηγεί πλήρως το γιατί σε N το πολύ βήματα η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων εντοπίζει τη λύση του προβλήματος. Από τη σχέση 3.53 φαίνεται και κάτι άλλο, σημαντικό για τον τρόπο που λειτουργεί η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων: η λύση \vec{x}^n δομείται βηματικά (κάθε \vec{p}^j προσθέτει τη συνεισφορά του) ή, αντίστοιχα, κάθε \vec{p}^j αποκόπτει από το σφάλμα \vec{e}^n μια συνιστώσα του.

Η μέχρι τώρα παρουσίαση (για γραμμικά συστήματα) δεν ασχολήθηκε καθόλου με το θέμα της γένεσης των κατευθύνσεων \vec{p}^i . Θεωρήσαμε ότι είναι δεδομένες. Τώρα θα παρουσιάσουμε έναν αλγόριθμο ο οποίος υπολογίζει τις κατευθύνσεις \vec{p}^i και είναι είναι γνωστός ως η συζυγής διαδικασία των Gram-Schmidt.

3.6.3 Η συζυγής διαδικασία των Gram-Schmidt

Η διαδικασία ξεκινά με την υπόθεση ότι διαθέτουμε N γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα ($N \times N$ είναι η διάσταση του μητρώου A), τα $\vec{u}^0, \vec{u}^1, \vec{u}^2, \dots, \vec{u}^{N-1}$. Η εύκολη επιλογή για τα \vec{u}^i θα μπορούσε να είναι τα μοναδιαία διανύσματα κατά τους άξονες συντεταγμένων. Στη συνέχεια, παράγουμε κάθε διάνυσμα \vec{p}^n από τη σχέση

$$\vec{p}^n = \vec{u}^n + \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{ni} \vec{p}^i \quad (3.54)$$

όπου β_{ni} βαθμωτές ποσότητες που ορίζονται μόνο για $i < n$. Για παράδειγμα, αν $N = 4$, οι συντελεστές β διατάσσονται στην παρακάτω εύχρηστη μητρωϊκή μορφή

$$\begin{bmatrix} - & - & - & - \\ \beta_{10} & - & - & - \\ \beta_{20} & \beta_{21} & - & - \\ \beta_{30} & \beta_{31} & \beta_{32} & - \end{bmatrix}$$

Η απαίτηση A -ορθογωνιότητας $\vec{p}^{iT} A \vec{p}^j = 0$, αν $i \neq j$ (σχέση 3.43) δίνει διαδοχικά (για $i > j$)

$$\begin{aligned} \vec{p}^{iT} A \vec{p}^j &= 0 \\ (\vec{u}^i + \sum_{m=0}^{i-1} \beta_{im} \vec{p}^m)^T A \vec{p}^j &= 0 \\ \vec{u}^{iT} A \vec{p}^j + \sum_{m=0}^{i-1} \beta_{im} \vec{p}^{mT} A \vec{p}^j &= 0 \\ \vec{u}^{iT} A \vec{p}^j + \beta_{ij} \vec{p}^{jT} A \vec{p}^j &= 0 \end{aligned}$$

άρα

$$\beta_{ij} = - \frac{\vec{u}^{iT} A \vec{p}^j}{\vec{p}^{jT} A \vec{p}^j}, \quad i > j \quad (3.55)$$

Με εργαλεία τις σχέσεις 3.54 και 3.55 λύνεται το πρόβλημα της εύρεσης του συνόλου των N A -ορθογώνιων διανυσμάτων κατεύθυνσης ανίχνευσης. Όμως, τα πράγματα δεν είναι τόσο απλά. Για να εφαρμοστεί για όλα τα β , που απαιτούνται για να βρεθεί λ.χ. το \vec{p}^n , η σχέση 3.55 υποτίθεται ότι έχουν αποθηκευτεί όλα τα προηγούμενα \vec{p}^i ($i < n$), άρα υπάρχει σοβαρό πρόβλημα υψηλών απαιτήσεων για μνήμη στον υπολογιστή. Ακόμα, ο όλος υπολογισμός απαιτεί $O(N^3)$ αριθμητικές πράξεις.

Τη θεραπεία στα προηγούμενα μειονεκτήματα έδωσε η μέθοδος των συζυγών κλίσεων που θα παρουσιασθεί παρακάτω.

3.6.4 Χρήσιμες Σχέσεις

Στην παρούσα ενότητα, θα αποδείξουμε μια σειρά από σχέσεις που ισχύουν στη μέθοδο των συζυγών κατευθύνσεων και που θα φανούν χρήσιμες, αργότερα, και στη μέθοδο των συζυγών κλίσεων.

Με αφετηρία τη σχέση 3.50, γράφουμε ότι

$$\begin{aligned}\vec{e}^n &= \vec{e}^0 + \sum_{j=0}^{n-1} \eta^j \vec{p}^j \\ 0 = \vec{e}^N &= \vec{e}^0 + \sum_{j=0}^{N-1} \eta^j \vec{p}^j\end{aligned}$$

αφού, φθάνοντας στο N -ιοστό βήμα, το σφάλμα της λύσης μηδενίζεται. Η κατά μέλη αφαίρεση δίνει

$$\vec{e}^n = - \sum_{j=n}^{N-1} \eta^j \vec{p}^j$$

ή, με τη βοήθεια της σχέσης 3.52, ότι

$$\vec{e}^n = \sum_{j=n}^{N-1} \delta^j \vec{p}^j \quad (3.56)$$

Πολλαπλασιάζουμε την τελευταία σχέση με $-\vec{p}^{mT} A$ ($m < n$) και έχουμε

$$-\vec{p}^{mT} A \vec{e}^n = - \sum_{j=n}^{N-1} \delta^j \vec{p}^{mT} A \vec{p}^j$$

όπου το δεξιό μέλος είναι μηδέν, αφού τα διανύσματα ανίχνευσης είναι A -ορθογώνια μεταξύ τους. Συνεπώς

$$-\vec{p}^{iT} A \vec{e}^j = 0 \quad , \quad i < j \quad (3.57)$$

Επειδή δε ισχύει και η σχέση 3.45, καταλήγουμε στη χρήσιμη σχέση

$$\vec{p}^{iT} \vec{r}^j = 0 \quad , \quad i < j \quad (3.58)$$

Η σημασία της σχέσης 3.57 είναι ότι, στη μέθοδο των συζυγών κατευθύνσεων, το σφάλμα της νέας επανάληψης είναι A -ορθογώνιο σε κάθε προηγούμενη κατεύθυνση ανίχνευσης. Η σημασία της διαφορετικής γραφής της (σχέση 3.58) είναι ότι κάθε νέο υπόλοιπο είναι ορθογώνιο σε κάθε προηγούμενη κατεύθυνση ανίχνευσης.

Η επόμενη χρήσιμη σχέση προκύπτει με αφετηρία τη σχέση 3.54 η οποία ξαναγράφεται εδώ για το δείκτη i αντί του n

$$\vec{p}^i = \vec{u}^i + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{ik} \vec{p}^k$$

πολλαπλασιάζοντάς την με \vec{r}^j , $i < j$. Γίνεται

$$\vec{p}^{iT} \vec{r}^j = \vec{u}^{iT} \vec{r}^j + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{nk} \vec{p}^{kT} \vec{r}^j$$

Το αριστερό μέλος είναι μηδέν, λόγω της σχέσης 3.58. Ο τελευταίος όρος το δεξιό μέλος είναι επίσης μηδέν, για τον ίδιο λόγο. Καταλήγουμε, λοιπόν, στη σχέση

$$\vec{u}^{iT} \vec{r}^j = 0 \quad , \quad i < j \quad (3.59)$$

που αποδεικνύει ότι το νέο υπόλοιπο είναι ορθογώνιο ως προς κάθε προηγούμενη κατεύθυνση \vec{u} .

Χρήσιμη είναι και η σχέση που προκύπτει αν ο προηγούμενος πολλαπλασιασμός γίνει με το \vec{r}^i , αντί του \vec{r}^j . Είναι

$$\vec{p}^{iT} \vec{r}^i = \vec{u}^{iT} \vec{r}^i + \sum_{k=0}^{i-1} \beta_{nk} \vec{p}^{kT} \vec{r}^i$$

με τον τελευταίο όρο στο δεξιό μέλος επίσης μηδέν. Άρα δείξαμε ότι

$$\vec{p}^{iT} \vec{r}^i = \vec{u}^{iT} \vec{r}^i \quad (3.60)$$

Η τελευταία σχέση που θα παράγουμε μας βοηθά ουσιαστικά να αποφύγουμε έναν περιττό πολλαπλασιασμό μητρώου με διάνυσμα κατά τον υπολογισμό του υπολοίπου. Από τις σχέσεις 3.45 και 3.40, έχουμε

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1} &= -A \vec{e}^{n+1} \\ \vec{r}^{n+1} &= -A(\vec{e}^n + \eta^n \vec{p}^n) \\ \vec{r}^{n+1} &= -A \vec{e}^n - \eta^n A \vec{p}^n \end{aligned}$$

και τελικά

$$\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n - \eta^n A \vec{p}^n \quad (3.61)$$

Ολοκληρώνοντας εδώ την παρουσίαση των αρχών της μεθόδου των συζυγών κατευθύνσεων, μπορεί εύκολα ο αναγνώστης να παρατηρήσει ότι αφενός μεν η ανάλυση αφορούσε αποκλειστικά γραμμικά προβλήματα, αφετέρου δε δεν παρουσιάστηκε ουσιαστικά ο αλγόριθμος της. Και τα δύο έγιναν σκόπιμα γιατί θέλαμε να παρουσιάσουμε τη μέθοδο των συζυγών κατευθύνσεων μόνο ως πρόδρομο αυτής των συζυγών κλίσεων, όπου θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στα μη-γραμμικά προβλήματα.

3.7 Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων

Είναι εύκολο να εισάγουμε τον αναγνώστη στη μέθοδο των συζυγών κλίσεων (conjugate gradient method) όταν έχει προηγηθεί η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων. Η μέθοδος των συζυγών κλίσεων λειτουργεί όμοια, με μοναδική διαφορά ότι οι κατευθύνσεις ανίχνευσης παράγονται από τη συζυγία των υπολοίπων. Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι χρησιμοποιεί τα υπόλοιπα \vec{r}^i στη θέση των \vec{u}^i της προηγούμενης μεθόδου.

Εφαρμόζοντας την ήδη γνωστή συζυγή διαδικασία των Gram-Schmidt, θα καταλήγαμε στον υπολογισμό των β_{ij} με σχέση όμοια της 3.55 που θα λαμβάνει υπόψη της και την παραπάνω αλλαγή. Έτσι

$$\beta_{ij} = - \frac{\vec{r}^{iT} A \vec{p}^j}{\vec{p}^{jT} A \vec{p}^j}, \quad i > j \quad (3.62)$$

Για να επεξεργαστούμε περαιτέρω τον αριθμητή της σχέσης αυτής, πολλαπλασιάζουμε τη σχέση 3.61 με το διάνυσμα \vec{r}^i και, αναδιατάσσοντας τους όρους, αυτός ο πολλαπλασιασμός δίνει (για τη συνεργασία με τα προηγούμενα, χρησιμοποιούμε το δείκτη j αντί του n)

$$\eta^j \vec{r}^{iT} A \vec{p}^j = \vec{r}^{iT} \vec{r}^j - \vec{r}^{iT} \vec{r}^{j+1} \quad (3.63)$$

Η σχέση 3.59, που προηγουμένως αποδείξαμε, γράφεται στην περίπτωση της μεθόδου των συζυγών κλίσεων ως

$$\vec{r}^{iT} \vec{r}^j = 0, \quad i < j \quad (3.64)$$

Με τη βοήθεια της τελευταίας σχέσης και ανάλογα με τη σχέση τιμής των δεικτών i και j προκύπτουν μηδενικές ή μη-μηδενικές για το δεξιό μέλος της σχέσης 3.63. Έτσι, κατά περίπτωση, είναι

$$\vec{r}^{iT} A \vec{p}^j = \begin{cases} \frac{1}{\eta^j} \vec{r}^{jT} \vec{r}^j & , i = j \\ -\frac{1}{\eta^j} \vec{r}^{j+1T} \vec{r}^{j+1} & , i = j + 1 \\ 0 & , otherwise \end{cases}$$

Η τελευταία σχέση απλουστεύεται ακόμα περισσότερο γιατί, σύμφωνα με τη σχέση 3.62, οι συντελεστές β_{ij} λαμβάνουν μη-μηδενικές τιμές μόνο για την περίπτωση $i > j$. Κατά συνέπεια, από τις παραπάνω περιπτώσεις, μόνο η $i = j + 1$ έχει σημασία για τον υπολογισμό των β_{ij} και τελικά θα είναι

$$\beta_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\eta^{i-1}} \frac{\vec{r}^{iT} \vec{r}^i}{\vec{p}^{i-1T} A \vec{p}^{i-1}} & , i = j + 1 \\ 0 & , otherwise \end{cases} \quad (3.65)$$

Τα σχόλια για τη σχέση 3.65 είναι διαφωτιστικά: Με την επιλογή του \vec{r}^i στη θέση των \vec{u}^i της μεθόδου των συζυγών κατευθύνσεων, η συζυγής διαδικασία των Gram-Schmidt (απαραίτητη για τον υπολογισμό των κατευθύνσεων ανίχνευσης) καταλήγει να

χρησιμοποιεί έναν πολύ μικρό αριθμό συντελεστών β_{ij} . Το κέρδος είναι ότι δεν χρειάζεται πλέον να αποθηκεύουμε όλες τις παλιές κατευθύνσεις ανίχνευσης (διανύσματα \vec{p}^i) ώστε να εξασφαλίσουμε την A -ορθογωνιότητα των νέων κατευθύνσεων ανίχνευσης ως προς τις προηγούμενες. Πρακτικά, λοιπόν, δεν υφίσταται πλέον η ανάγκη χρήσης διπλού δείκτη για τα β_{ij} και στη συνέχεια θα χρησιμοποιούμε την αντιστοίχιση

$$\beta^i \longleftrightarrow \beta_{i,i-1} \quad (3.66)$$

οπότε η σχέση 3.65 απλοποιείται στη μορφή

$$\beta^i = \frac{1}{\eta^{i-1}} \frac{\vec{r}^{iT} \vec{r}^i}{\vec{p}^{i-1T} A \vec{p}^{i-1}} \quad (3.67)$$

Έτσι, η μητρωϊκή γραφή του προηγούμενου παραδείγματος τροποποιείται σε

$$\begin{bmatrix} - & - & - & - \\ \beta^1 & - & - & - \\ - & \beta^2 & - & - \\ - & - & \beta^3 & - \end{bmatrix}$$

Τελευταίο στάδιο επεξεργασίας στη σχέση 3.47 είναι η αντικατάσταση των διανυσμάτων ανίχνευσης \vec{p}^i με τα υπόλοιπα \vec{r}^i . Η σχέση 3.47 δίνει ότι

$$\eta^{i-1} = \frac{\vec{p}^{i-1T} \vec{r}^{i-1}}{\vec{p}^{i-1T} A \vec{p}^{i-1}} \Rightarrow \eta^{i-1} \vec{p}^{i-1T} A \vec{p}^{i-1} = \vec{p}^{i-1T} \vec{r}^{i-1}$$

και η σχέση 3.67 γίνεται

$$\beta^i = \frac{\vec{r}^{iT} \vec{r}^i}{\vec{p}^{i-1T} \vec{r}^{i-1}} \quad (3.68)$$

Από τη σχέση 3.60 της μεθόδου των συζυγών κατευθύνσεων, διατυπωμένη με τη βασική παραδοχή της μεθόδου των συζυγών κλίσεων στη μορφή

$$\vec{p}^{iT} \vec{r}^i = \vec{r}^{iT} \vec{r}^i \Rightarrow \vec{p}^{i-1T} \vec{r}^{i-1} = \vec{r}^{i-1T} \vec{r}^{i-1} \quad (3.69)$$

η σχέση 3.68 τελικά παίρνει τη μορφή

$$\beta^i = \frac{\vec{r}^{iT} \vec{r}^i}{\vec{r}^{i-1T} \vec{r}^{i-1}} \quad (3.70)$$

3.7.1 Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων - Βασικός Αλγόριθμος

Ο αλγόριθμος της μεθόδου των συζυγών κλίσεων για γραμμικά προβλήματα διατυπώνεται ως εξής:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης \vec{x}^0 . Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\vec{r}^0 = \vec{b} - A\vec{x}^0$. Ορισμός αρχικής κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^0 = \vec{r}^0$. Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Υπολογισμός μεγέθους βήματος $\eta^n = \frac{\vec{r}^{nT} \vec{r}^n}{\vec{p}^{nT} A \vec{p}^n}$, (σχέση 3.47, σε συνδυασμό με τη σχέση 3.69).

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n$.

Βήμα 3: Ανανέωση υπολοίπου $\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n - \eta^n A \vec{p}^n$, (σχέση 3.61).

Βήμα 4: Υπολογισμός συντελεστή $\beta^{n+1} = \frac{\vec{r}^{n+1T} \vec{r}^{n+1}}{\vec{r}^{nT} \vec{r}^n}$, (σχέση 3.70).

Βήμα 5: Ανανέωση διανύσματος κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^{n+1} = \vec{r}^{n+1} + \beta^{n+1} \vec{p}^n$, (προκύπτει από τη σχέση 3.54, για δείκτη $n+1$ αντί του n , με το \vec{r}^{n+1} αντί του \vec{u}^{n+1} λόγω της γνωστής παραδοχής και κρατώντας τη μοναδική μη-μηδενική τιμή του συντελεστή β από όλους τους όρους της άθροισης).

Βήμα 6: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

3.8 Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων για Μη-Γραμμικά Προβλήματα

Η γενίκευση του προηγούμενου αλγορίθμου για μη-γραμμικά προβλήματα είναι δυνατή με τρεις συγκεκριμένες παρεμβάσεις σε αυτόν. Οι τρεις παρεμβάσεις είναι:

- (α) Παύει να ισχύει ο απλός αναδρομικός τύπος υπολογισμού των υπολοίπων που χρησιμοποιήθηκε στο βήμα 3.
- (β) Στο βήμα 1, ο υπολογισμός του μεγέθους βήματος η^n γίνεται με περισσότερο πολύπλοκο τρόπο.
- (γ) Συναντώνται παραλλαγές σχέσεων για τον υπολογισμό των συντελεστών β . Μεταξύ αυτών, οι μέθοδοι των Fletcher–Reeves και των Polak–Ribiere είναι οι πιο γνωστές και οι οποίες θα παρουσιασθούν με λεπτομέρειες.

3.8.1 Η Μέθοδος των Fletcher–Reeves

Η μέθοδος των Fletcher–Reeves χρησιμοποιεί κανονικό σχήμα ανίχνευσης κατά γραμμή για να υπολογίσει την τιμή της η^n και υιοθετεί για τον υπολογισμό του υπολοίπου τη σχέση

$$\vec{r}^n = -\nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.71)$$

Τα βήματα του αλγορίθμου είναι:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης \vec{x}^0 . Υπολογισμός $F(\vec{x}^0)$. Υπολογισμός αρχικού υπολοίπου $\vec{r}^0 = -\nabla F(\vec{x}^0)$, (σχέση 3.71). Ορισμός αρχικής κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^0 = \vec{r}^0$. Δείκτης $n = 0$.

Βήμα 1: Αν $\vec{r}^n \neq 0$, υπολογισμός μεγέθους βήματος η^n με (ακριβή ή έστω προσεγγιστική) ανίχνευση κατά γραμμή, στην κατεύθυνση \vec{p}^n , της σχέσης $\min_{\eta^n > 0} F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)$.

Βήμα 2: Ανανέωση λύσης $\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n$.

Βήμα 3: Υπολογισμός $\nabla F(\vec{x}^{n+1})$.

Βήμα 4: Υπολογισμός συντελεστή β^{n+1} από τη σχέση

$$\beta_{FR}^{n+1} = \frac{\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \nabla F(\vec{x}^{n+1})}{\nabla F(\vec{x}^n)^T \nabla F(\vec{x}^n)} \quad (3.72)$$

Βήμα 5: Ανανέωση διανύσματος κατεύθυνσης ανίχνευσης $\vec{p}^{n+1} = -\nabla F(\vec{x}^{n+1}) + \beta_{FR}^{n+1} \vec{p}^n$.

Βήμα 6: Ανανέωση τιμής δείκτη $n \leftarrow n+1$. Επιστροφή στο βήμα 1, μέχρι σύγκλισης.

Πιθανό πρόβλημα που μπορεί να παρουσιασθεί κατά τη χρήση του αλγορίθμου των Fletcher-Reeves είναι, κατά το βήμα 5, να υπολογίζεται νέα κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^{n+1} η οποία όμως να μην προκαλεί μείωση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Πιθανή αιτία του προβλήματος μπορεί να είναι το ότι χρησιμοποιήθηκε προσεγγιστική ανίχνευση κατά γραμμή στο βήμα 1. Αν πολλαπλασιάσουμε τη σχέση υπολογισμού του \vec{p}^{n+1} με το διάνυσμα $\nabla F(\vec{x}^{n+1})$, προκύπτει ότι

$$\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \vec{p}^{n+1} = -\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \nabla F(\vec{x}^{n+1}) + \beta_{FR}^{n+1} \nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \vec{p}^n \quad (3.73)$$

Το πιθανό πρόβλημα που μόλις αναφέραμε απεικονίζεται καθαρά στην παραπάνω σχέση. Επιθυμούμε, για να μην υφίσταται αυτό το πρόβλημα, το αριστερό μέλος να είναι αρνητικό. Αναγνωρίζουμε ότι ο πρώτος όρος του δεύτερου μέλους είναι πάντοτε αρνητικός και ο 'κίνδυνος' είναι μήπως ο τελευταίος όρος κυριαρχήσει (αποκτήσει μεγάλη θετική τιμή) του $-\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \nabla F(\vec{x}^{n+1})$ και γίνει θετικό το γινόμενο $\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T \vec{p}^{n+1}$. Για την αποφυγή του προβλήματος, συνιστάται η χρήση των συνθηκών Wolfe (σχέσεις 3.21 και 3.22) και, μάλιστα, στη λεγόμενη αυστηρή διατύπωσή τους, ως

$$F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) \leq F(\vec{x}^n) + c_1 \eta^n \nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n \quad (3.74)$$

και

$$|\nabla F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n)^T \vec{p}^n| \leq c_2 |\nabla F(\vec{x}^n)^T \vec{p}^n| \quad (3.75)$$

με $0 < c_1 < c_2 < \frac{1}{2}$.

3.8.2 Η Μέθοδος των Polak–Ribiere

Ο αλγόριθμος της μεθόδου των Polak–Ribiere είναι ίδιος με αυτόν της μεθόδου των Fletcher–Reeves αλλά χρησιμοποιείται διαφορετικός τύπος υπολογισμού του συντελεστή β^{n+1} . Αντί της σχέσης 3.72, χρησιμοποιείται η

$$\beta_{PR}^{n+1} = \frac{\nabla F(\vec{x}^{n+1})^T (\nabla F(\vec{x}^{n+1}) - \nabla F(\vec{x}^n))}{\|\nabla F(\vec{x}^n)\|} \quad (3.76)$$

Οι μέθοδοι των Fletcher–Reeves και Polak–Ribiere είναι ταυτοτικά ίδιες όταν η αντικειμενική συνάρτηση είναι ισχυρά κυρτή τετραγωνική συνάρτηση και για τον υπολογισμό του μεγέθους βήματος η^n χρησιμοποιείται ακριβής (και όχι προσεγγιστική) ανίχνευση κατά γραμμή. Σε κάθε άλλη περίπτωση, οι Fletcher–Reeves και Polak–Ribiere μπορεί να παρουσιάζουν αρκετά διαφορετική πορεία σύγκλισης προς τη βέλτιστη λύση.

Μια τελευταία χρήσιμη παρατήρηση είναι ότι οι συνθήκες Wolfe αδυνατούν να εξασφαλίσουν ότι κάθε νέα κατεύθυνση ανίχνευσης είναι και κατεύθυνση καθόδου. Για να ξεπεραστεί αυτή η αδυναμία της μεθόδου των Polak–Ribiere, προτείνεται να συνοδεύεται η σχέση 3.76 με τον περιορισμό

$$\beta_{PR+}^{n+1} = \max(\beta_{PR}^{n+1}, 0) \quad (3.77)$$

δημιουργώντας μια αλγοριθμική παραλλαγή, γνωστή ως Polak–Ribiere+.

Κεφάλαιο 4

Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης

Στο κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε την (κατά πολλούς) εναλλακτική μέθοδο της ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης κατά γραμμή (line search method). Πρόκειται για τη μέθοδο ανίχνευσης κατά περιοχές εμπιστοσύνης (trust region method). Και πάλι θα θεωρήσουμε ότι τα προβλήματα που μας απασχολούν δεν υπόκεινται σε περιορισμούς.

4.1 Μαθηματική Διατύπωση της Μεθόδου

Η βασική αρχή της επαναληπτικής μεθόδου ανίχνευσης κατά περιοχές εμπιστοσύνης, ως εργαλείο βελτιστοποίησης (πρακτικά, ελαχιστοποίησης της τιμής) της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$ με $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$, στηρίζεται στην επαναληπτική δημιουργία ενός (δι-αρκώς ανανεούμενου) τοπικού μοντέλου της $F(\vec{x})$, έστω του $\phi^n(\vec{x})$, στη γειτονιά της βέλτιστης λύσης και στη χρήση του ώστε, βήμα προς βήμα, να προσεγγίζεται η βέλτιστη λύση. Στα παραπάνω, n ας είναι ο δείκτης των βημάτων ή επαναλήψεων.

Η παραπάνω επιγραμματική παρουσίαση της μεθόδου καθορίζει αμέσως τα ανοικτά θέματα μιας τέτοιας μεθόδου. Τέτοια θέματα είναι ο τύπος του μοντέλου $\phi^n(\vec{x})$ που θα επιλεγεί, η περιοχή εμπιστοσύνης γύρω από την τρέχουσα λύση που το μοντέλο ισχύει (‘εμπιστεύομαστε’ την πρόλεξη που θα δώσει), ο τρόπος που θα χρησιμοποιηθεί για να υπολογισθεί η λύση στο επόμενο βήμα.

Η συνηθέστερη τεχνική για τη δημιουργία του μοντέλου είναι μια συνάρτηση τετραγωνικής μορφής. Έτσι, αν \vec{x}^n είναι η τρέχουσα λύση, δημιουργείται η $\phi^n(\vec{x})$, ή καλύτερα η $\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p})$ (εδώ φαίνεται καλύτερα η έννοια της γειτονιάς ‘γύρω’ από την τρέχουσα λύση \vec{x}^n) ως

$$\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p}) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p} \quad (4.1)$$

(η γραφή $\nabla^2 F(\vec{x}^n)$ μπορεί να σημαίνει οποιαδήποτε προσέγγιση του μητρώου Hess). Η σχέση 4.1 είναι το ανάπτυγμα σε σειρά Taylor ως προς το \vec{x}^n . Με βάση αυτή τη σχέση, το πρόβλημα διατυπώνεται ως

$$\min \phi(\vec{x}^n + \vec{p}), \quad (\vec{x}^n + \vec{p}) \in T(\vec{x}^n) \quad (4.2)$$

όπου $T(\vec{x}^n)$ είναι η περιοχή εμπιστοσύνης γύρω από το \vec{x}^n . Η περιοχή εμπιστοσύνης ορίζεται συνήθως από μια νόρμα, άρα είναι ο χώρος γύρω από το \vec{x}^n που καθορίζεται από τη σχέση

$$\|\vec{p}\|_2 \leq \Delta \quad (4.3)$$

με το Δ να καλείται ακτίνα περιοχής εμπιστοσύνης (trust region radius).

Έχοντας ήδη παρουσιάσει τη μέθοδο ανίχνευσης κατά γραμμή, αξίζει να επιχειρήσουμε την παρουσίαση των βασικών τους διαφορών. Έτσι, θα κατανοήσει ο αναγνώστης καλύτερα τα χαρακτηριστικά της νέας μεθόδου. Στη μέθοδο ανίχνευσης κατά γραμμή, υπολογίζεται για την τρέχουσα λύση \vec{x}^n η κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n και, με γνωστή την κατεύθυνση που αναζητάται η λύση, υπολογίζεται το μήκος του βήματος (στη μορφή του συντελεστή η^n). Αντίθετα, στη μέθοδο ανίχνευσης κατά περιοχές εμπιστοσύνης, πρώτα υπολογίζεται η μέγιστη ακτίνα Δ στο σημείο \vec{x}^n , άρα πρώτα καθορίζεται η απόσταση από το \vec{x}^n όπου αναζητάται η λύση και μετά υπολογίζεται η κατεύθυνση αναζήτησης. Φαίνεται, δηλαδή, ότι τα δύο βασικά βήματα σε κάθε επανάληψη εκτελούνται, κατά κάποιο τρόπο, με αντίθετη σειρά. Ισχύει, επίσης, ότι και οι δύο μέθοδοι χρησιμοποιούν (ενδεχομένως) μια τετραγωνική συνάρτηση αλλά η χρήση της γίνεται με διαφορετικό τρόπο.

4.1.1 Απλό Μοντέλο Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης

Στη σχέση 4.1, ο όρος ο οποίος συνεπάγεται τη μεγαλύτερη δυσκολία είναι αυτός που περιλαμβάνει το μητρώο Hess. Η δυσκολία υπολογισμού του, για μη-αναλυτικές συναρτήσεις, είναι ήδη γνωστή.

Με βάση αυτή τη δυσκολία, θα μπορούσαμε να αντιπροτείνουμε ένα απλούστερο μοντέλο, το γραμμικό, δηλαδή να είναι

$$\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p}) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^n) \quad (4.4)$$

Στην περίπτωση του γραμμικού μοντέλου, η επόμενη λύση που θα εντοπισθεί είναι η $\vec{x}^n + \vec{p}$ με

$$\vec{p} = -\Delta^n \frac{\nabla F(\vec{x}^n)}{\|\nabla F(\vec{x}^n)\|} \quad (4.5)$$

δηλαδή θα είναι το σημείο σε απόσταση Δ από το \vec{x}^n στην κατεύθυνση της αρνητικής κλίσης (για πρόβλημα ελαχιστοποίησης). Πρακτικά πρόκειται για τη μέθοδο ανίχνευσης κατά γραμμή, με το βήμα να καθορίζεται άμεσα από την ακτίνα Δ της περιοχής εμπιστοσύνης.

Το τελευταίο παράδειγμα πιστοποιεί ουσιαστικά ότι η μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή και αυτή της ανίχνευσης κατά περιοχή εμπιστοσύνης είναι δομημένες με αντίστοιχη λογική.

4.1.2 Γενικό Μοντέλο Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης

Γενικεύοντας, την αδυναμία συνήθως να υπολογισθεί το μητρώο Hess αντιμετωπίζουμε δημιουργώντας το μοντέλο

$$\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p}) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^T B^n \vec{p} \quad (4.6)$$

όπου B^n είναι ένα συμμετρικό μητρώο.

Θυμίζουμε ότι μια σχέση της μορφής 4.1 θα ήταν ακριβής αν γράφονταν ως

$$\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p}) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x} + t\vec{p}) \vec{p} \quad (4.7)$$

με $t \in (0, 1)$. Όταν $B^n = \nabla^2 F(\vec{x}^n)$ τότε το σφάλμα προσέγγισης είναι τάξης $\|p\|^3$ ($O(\|p\|^3)$) και η μέθοδος αποκαλείται **μέθοδος Newton ανίχνευσης κατά περιοχές εμπιστοσύνης** (trust region Newton method).

4.2 Υλοποίηση της Μεθόδου

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε στα δύο πιά σημαντικά θέματα που σχετίζονται με την εφαρμογή της μεθόδου σε προβλήματα βελτιστοποίησης. Πρώτο θέμα είναι ο τρόπος καθορισμού της ακτίνας Δ της περιοχής εμπιστοσύνης και δεύτερο θέμα είναι ο σχεδιασμός ενός αποδοτικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης.

4.2.1 Καθορισμός Ακτίνας Περιοχής Εμπιστοσύνης

Η επιλογή της ακτίνας Δ βασίζεται στο κατά πόσο συμφωνεί το μοντέλο $\phi^n(\vec{x})$ με τη συνάρτηση $F(\vec{x})$. Ένας τρόπος να ποσοτικοποιηθεί η απόκλιση μεταξύ τους είναι, αφού υπολογισθεί το βήμα \vec{p}^n να υπολογισθεί ο λόγος της πραγματικής μείωσης στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης προς τη μείωση που υποδεικνύει το μοντέλο (προβλεπόμενη μείωση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης). Αν μάλιστα, εφεξής, συμβολίζουμε το μοντέλο ως $\phi^n(\vec{p})$, αντί $\phi^n(\vec{x}^n + \vec{p})$, ώστε να τονίζεται ο τοπικός χαρακτήρας του), ο λόγος αυτός θα είναι

$$\rho^n = \frac{F(\vec{x}^n) - F(\vec{x}^n + \vec{p}^n)}{\Phi^n(0) - \Phi^n(\vec{p}^n)} \quad (4.8)$$

Η πληροφορία που εμπεριέχει η ποσότητα ρ είναι χρήσιμη και καθορίζει την αποδοχή ή όχι της νέας λύσης, αυτής δηλαδή που προκύπτει από το \vec{x}^n όταν σ' αυτό υπερτερεί η 'διόρθωση' \vec{p}^n . Ο παρονομαστής είναι πάντα αρνητική ποσότητα, αφού η τάση είναι να μειωθεί η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, έτσι όπως αυτή προβλέπεται από το μοντέλο που δημιουργήθηκε. Με βάση την τελευταία παρατήρηση καθορίζονται και οι περαιτέρω ενέργειες. Έτσι, αν $\rho^n < 0$, η διόρθωση \vec{p}^n οφείλει να απορριφθεί. Πρόκειται για την περίπτωση που, ενώ το μοντέλο προβλέπει μείωση της τιμής για

τη μεταβολή \vec{p}^n , η πραγματική συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης είναι διαφορετική. Στην περίπτωση που $\rho^n \approx 1$, η διόρθωση \vec{p}^n γίνεται ασφαλώς αποδεκτή και (επειδή η κοντά στη μονάδα τιμή του ρ^n σημαίνει επάρκεια του μοντέλου) προτείνεται η αύξηση της ακτίνας Δ της περιοχής εμπιστοσύνης στην επόμενη επανάληψη. Τέλος, θετική αλλά μικρή τιμή του ρ^n (κοντά στο μηδέν) σημαίνει την αποδοχή μεν της διόρθωσης \vec{p}^n αλλά και μείωση της ακτίνας Δ στην επόμενη επανάληψη, ως 'αντίδραση' (διορθωτική κίνηση) στην όχι καλή πρόβλεψη του μοντέλου.

4.2.2 Αλγόριθμος Ανίχνευσης κατά Περιοχές Εμπιστοσύνης

Βήμα 1: Ο χρήστης καθορίζει ένα γενικό ανώτατο όριο για την ακτίνα, έστω $\bar{\Delta}$. Επιλέγεται η αρχική ακτίνα Δ , έστω Δ^0 στο διάστημα $0 < \Delta^0 \leq \bar{\Delta}$. Ορίζεται και η βοηθητική παράμετρος $\eta \in [0, \frac{1}{4}]$. Μηδενίζεται ο μετρητής κύκλων n . Επιλέγεται η αρχική λύση \vec{x}^0 .

Βήμα 2: Επιλύεται (με οποιαδήποτε γνωστή μέθοδο) το πρόβλημα ελαχιστοποίησης $\min \phi^n(\vec{p})$, όπου η ϕ^n δίνεται από τη σχέση 4.6 και, συγκεκριμένα, αναζητάται λύση με $\|\vec{p}\| \leq \Delta^n$, λύση δηλαδή μέσα στην περιοχή εμπιστοσύνης. Ας είναι \vec{p}^n η λύση αυτή. Το αν θα χρησιμοποιηθεί και με ποιό τρόπο το βήμα \vec{p}^n που μόλις υπολογίστηκε εξαρτάται από τα κριτήρια του βήματος 4.

Βήμα 3: Υπολογίζεται ο λόγος ρ^n της πραγματικής μείωσης στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης προς τη μείωση που υποδεικνύει το μοντέλο, σύμφωνα με τη σχέση 4.8.

Βήμα 4: Ακολουθεί ο επαναπροσδιορισμός της ακτίνας Δ της περιοχής εμπιστοσύνης για τα επόμενα βήματα του αλγορίθμου. Έτσι:

Εάν $\rho^n < \frac{1}{4}$ τότε

ελαττώνεται η ακτίνα στην τιμή $\Delta^{n+1} = \frac{1}{4}\|\vec{p}^n\|$, ως αποτέλεσμα της κακής πρόβλεψης του μοντέλου,

αλλιώς:

εάν $\rho^n > \frac{3}{4}$ και $\|\vec{p}^n\| = \Delta^n$ τότε:

μεγαλώνει η ακτίνα στην τιμή $\Delta^{n+1} = \min(2\Delta^n, \bar{\Delta})$, δείγμα καλής πρόβλεψης σε συνδυασμό με το γεγονός ότι το βήμα διόρθωσης άγγιξε τα όρια της περιοχής εμπιστοσύνης,

αλλιώς:

είναι $\Delta^{n+1} = \Delta^n$, δηλαδή η ακτίνα παραμένει ίδια, δείγμα μιας 'μέτριας' πρόβλεψης του μοντέλου.

Βήμα 5: Στο τελευταίο βήμα του κύκλου πραγματοποιείται ο υπολογισμός της νέας λύσης \vec{x}^{n+1} . Ισχύει:

εάν $\rho^n > \eta$ τότε:

$$\text{η νέα λύση είναι η } \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \vec{p}^n,$$

αλλιώς:

$$\text{η νέα λύση συμπίπτει με την προηγούμενη } \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n.$$

Βήμα 6: Εφαρμογή κριτηρίων σύγκλισης και, αν δεν έχει συγκλίνει, επαναφορά στο βήμα 2.

Είναι σημαντικό να παρατηρήσουμε ότι, στον παραπάνω αλγόριθμο, η ακτίνα Δ αυξάνεται μόνο όταν η διόρθωση \vec{p}^n αγγίζει σε μέγεθος την ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης. Κάθε φορά που η διόρθωση \vec{p}^n είναι τέτοια που το νέο σημείο να παραμένει μέσα στην ακτίνα εμπιστοσύνης, θεωρείται ότι η ακτίνα Δ^n είναι επαρκής και δεν τροποποιείται.

Κεφάλαιο 5

Βελτιστοποίηση με Περιορισμούς

Σχεδόν πάντα, τα προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική (και όχι μόνο) που καλείται να αντιμετωπίσει ένας μηχανικός εμπλέκουν έναν αριθμό περιορισμών. Στη γενικότητά τους, οι περιορισμοί αυτοί διατυπώνονται μαθηματικά ως ισότητες ή ανισότητες. Και στις δύο περιπτώσεις, συνηθίζεται να γράφονται με μηδενικό το δεξιό μέλος ενώ το αριστερό μέλος αποτελεί συνάρτηση των μεταβλητών σχεδιασμού.

Αν και παρακάτω θα ασχοληθούμε με παραδείγματα-προβλήματα ελαχιστοποίησης της τιμής μαθηματικών συναρτήσεων, με περιορισμούς που συνήθως είναι και αυτοί μαθηματικές συναρτήσεις, στα πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης του μηχανικού, κυρίως στην αεροδυναμική, τα πράγματα συνήθως δεν είναι απλά. Ένα απλό παράδειγμα βοηθά στην κατανόηση. Έστω ότι στόχος είναι ο σχεδιασμός μιας πτέρυγας με συγκεκριμένα ή βέλτιστα αεροδυναμικά χαρακτηριστικά (άνωση, οπισθέλκουσα) σε προκαθορισμένες συνθήκες πτήσης. Η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Navier–Stokes είναι το μέσο για τον υπολογισμό των τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης και, άμεσα ή έμμεσα, εμπλέκεται στη διαδικασία αναζήτησης της βέλτιστης λύσης. Ονομάσαμε ‘άμεση’ την εμπλοκή στην περίπτωση λ.χ. χρήσης συζυγών διατυπώσεων - adjoint formulation όπου η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Navier–Stokes δίνει, πέραν της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης και τις τιμές των παραγώγων για την υποστήριξη της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Ονομάσαμε ‘έμμεσα’ την εμπλοκή στην περίπτωση λ.χ. των εξελικτικών αλγορίθμων όπου ο ρόλος της αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων Navier–Stokes είναι να παρέχει τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης στη μέθοδο βελτιστοποίησης. Σε προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, οι περιορισμοί μπορεί να είναι πολλοί: κατασκευαστικοί περιορισμοί, περιορισμοί βάρους, αεροδυναμικοί περιορισμοί (διαφορετικοί των μεγεθών που εμπλέκονται στην αντικειμενική συνάρτηση και που μπορεί να αφορούν τη θέση του αεροδυναμικού κέντρου της πτέρυγας ή το συντελεστή ροπής πρόνευσης, pitching moment coefficient). Άρα, η διαχείρισή τους μπορεί να απαιτεί στοιχεία από ίδιους ή από άλλους υπολογισμούς Navier–Stokes αποτελέσματα από αναλύσεις καταπονήσεων κ.ο.κ.

Η βέλτιστη λύση που προκύπτει λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς και αυτή που θα προέκυπτε από μια μελέτη που παρακάμπει-αγνοεί τους περιορισμούς αυτούς μπορεί να είναι πολύ διαφορετικές. Σχετικά σχόλια μπορούν να γίνουν στη βάση ενός απλούστατου αριθμητικού παραδείγματος: το πρόβλημα

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} \|\vec{x}\|_2^2$$

έχει την προφανή λύση $\vec{x} = \vec{0}$. Αντίθετα, το πρόβλημα

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N, \|\vec{x}\|_2 > 1} \|\vec{x}\|_2^2$$

έχει ως λύση κάθε διάνυσμα με $\|\vec{x}\|_2 = 1$. Δηλαδή, ως λύση γίνεται δεκτό κάθε διάνυσμα με αφετηρία την αρχή των αξόνων και τέλος οποιοδήποτε σημείο της επιφάνειας υπερσφαίρας μοναδιαίας ακτίνας. Συγκρατήστε, όχι μόνο ότι αλλάζει η λύση αλλά το ότι το πρόβλημα με τους περιορισμούς έχει πλέον άπειρες λύσεις αντί μιας!

Ακόμα και σε απλά προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, η επιβολή περιορισμών είναι επιβεβλημένη. Λ.χ. το πρόβλημα σχεδιασμού 'βέλτιστης' αεροτομής, με την έννοια της μεγιστοποίησης της άνωσης σε συγκεκριμένες συνθήκες ροής χωρίς περιορισμούς για τη μέγιστη τιμή της οπισθέλκουσάς της, στερείται σημασίας. Οποιοσδήποτε αλγόριθμος βελτιστοποίησης θα δώσει μια αεροτομή με αρκετά καμπυλομένη τη μέση γραμμή της και υψηλή τιμή του συντελεστή οπισθέλκουσας. Όμοια, η αναζήτηση αεροτομής με ελάχιστη τιμή του συντελεστή οπισθέλκουσας, χωρίς περιορισμούς για την ελάχιστη τιμή του συντελεστή άνωσης, στερείται σημασίας. Ο αλγόριθμος θα δώσει μια λεπτή αεροτομή που θα μοιάζει με επίπεδη πλάκα που θα έχει πράγματι χαμηλή τιμή οπισθέλκουσας αλλά και χαμηλή τιμή άνωσης.

5.1 Βασικοί Ορισμοί - Θεμελίωση

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς διατυπώνεται ως πρόβλημα τεσσάρων συνιστωσών που αφορούν:

(α) Την ελαχιστοποίηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, όπου κατά τα γνωστά $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$ είναι το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού.

(β) Την ικανοποίηση M_1 περιορισμών ισότητας γραμμένων στη μορφή

$$h_i(\vec{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, M_1 \quad (5.1)$$

(γ) Την ικανοποίηση M_2 περιορισμών ανισότητας (ουσιαστικά, ανισοϊσότητας), γραμμένων στη μορφή

$$g_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, M_2 \quad (5.2)$$

- (δ) Την ικανοποίηση M_3 περιορισμών ανισότητας για τις ίδιες τις μεταβλητές σχεδιασμού (δηλαδή για κάποιες ή όλες από τις N μεταβλητές, άρα $M_3 \leq N$). Αυτοί διατυπώνονται ως

$$x_i^L \leq x_i \leq x_i^U \quad (5.3)$$

με τον άνω δείκτη L ή U να συμβολίζει αντίστοιχα την κατώτερη και ανώτερη επιτρεπόμενη τιμή για τη μεταβλητή. Ας σημειωθεί ότι για κάποιες μεταβλητές μπορεί να υπάρχει μόνο κάτω ή μόνο άνω όριο.

Γνωρίζοντας μία προς μία τις πιο σημαντικές μεθόδους βελτιστοποίησης, θα φανεί ότι οι περιορισμοί τύπου 5.3 αντιμετωπίζονται διαφορετικά από μέθοδο σε μέθοδο. Έτσι, για παράδειγμα, σε έναν εξελικτικό αλγόριθμο) είναι απαραίτητος ο ορισμός κάτω και άνω ορίου για κάθε μεταβλητή. Τα όρια αυτά υπεισέρχονται στην κωδικοποίηση των μεταβλητών και το ότι η βέλτιστη λύση περιέχεται στο μεταξύ τους διάστημα εξασφαλίζεται από τον ίδιο τον αλγόριθμο. Αντίθετα, σε μια μέθοδο βελτιστοποίησης που βασίζεται στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης, τέτοιοι περιορισμοί δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν άμεσα.

Σε κάθε περίπτωση, είναι λογικό οι περιορισμοί 5.3 να ενσωματωθούν στους M_2 περιορισμούς ανισότητας και αυτό θα ισχύει για το υπόλοιπο κεφάλαιο. Μάλιστα, με στόχο τον ενιαίο συμβολισμό των περιορισμών, είτε ισότητας ή ανισότητας, είτε για τις μεταβλητές σχεδιασμού ή για παράγωγες συναρτήσεις αυτών, επαναδιατυπώνουμε τους στόχους του προβλήματος ως εξής:

- (α) Ελαχιστοποίηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$.

- (β) Ικανοποίηση K_2 περιορισμών ανισότητας, της μορφής

$$c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, K_2 \quad (5.4)$$

ή, με εναλλακτικό συμβολισμό ως προς τις τιμές του δείκτη, ότι $i \in I$, όπου I (=Inequality) είναι σύνολο τιμών του δείκτη i για τους περιορισμούς ανισότητας.

- (γ) Ικανοποίηση K_1 περιορισμών ισότητας, της μορφής

$$c_i(\vec{x}) = 0, \quad i = K_2 + 1, \dots, K_1 + K_2 \quad (5.5)$$

ή, με $i \in E$, όπου E (=Equality) είναι σύνολο τιμών του δείκτη i για τους περιορισμούς ισότητας.

Ορισμός 5.1 Ορίζουμε ως χώρο αποδεκτών λύσεων δεδομένου προβλήματος το σύνολο

$$\Omega = \{ \vec{x} \mid c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I; c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \}$$

Με τη βοήθεια του συνόλου Ω , το πρόβλημα βελτιστοποίησης υπό περιορισμούς επαναδιατυπώνεται απλούστερα ως

$$\min_{\vec{x} \in \Omega} F(\vec{x}) \quad (5.6)$$

Στη συνέχεια, θα ορίσουμε μαθηματικές έννοιες όπως είναι η ‘τοπική λύση’ και τα παράγωγά της. Έτσι:

Ορισμός 5.2 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **τοπική λύση** του προβλήματος 5.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία $F(\vec{x}) \geq F(\vec{x}^*)$, $\forall \vec{x} \in (\gamma \cap \Omega)$.

Ορισμός 5.3 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **αυστηρά τοπική λύση** του προβλήματος 5.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία $F(\vec{x}) > F(\vec{x}^*)$, $\forall \vec{x} \in (\gamma \cap \Omega)$.

Ορισμός 5.4 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **μεμονωμένη τοπική λύση** του προβλήματος 5.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία το \vec{x}^* είναι η μοναδική τοπική λύση του $(\gamma \cap \Omega)$.

Τέλος, είναι πολύ χρήσιμοι και οι δύο επόμενοι ορισμοί:

Ορισμός 5.5 Στην υποψήφια λύση $\vec{x} \in \Omega$, ο i -ιστός περιορισμός ανισότητας είναι **ενεργός** αν και μόνο αν $c_i(\vec{x}) = 0$.

Ορισμός 5.6 Στην υποψήφια λύση $\vec{x} \in \Omega$, ο i -ιστός περιορισμός ανισότητας είναι **ανενεργός** αν και μόνο αν $c_i(\vec{x}) < 0$.

5.1.1 Μετασχηματισμοί και Τεχνάσματα

Δεν είναι σπάνιες οι φορές όπου δεν υπάρχει λειότητα στόχου ή/και περιορισμών. Στις περιπτώσεις αυτές, χρειάζονται συνήθως παρεμβάσεις του μηχανικού για τη διατύπωση του προβλήματος σε τρόπο ώστε, με τεχνάσματα και κατάλληλους μετασχηματισμούς, να αντιμετωπισθεί το πρόβλημα και να καταστεί εφικτό να εφαρμοσθούν μαθηματικές μέθοδοι βελτιστοποίησης που απαιτούν λειότητα της αντικειμενικής συνάρτησης και των περιορισμών.

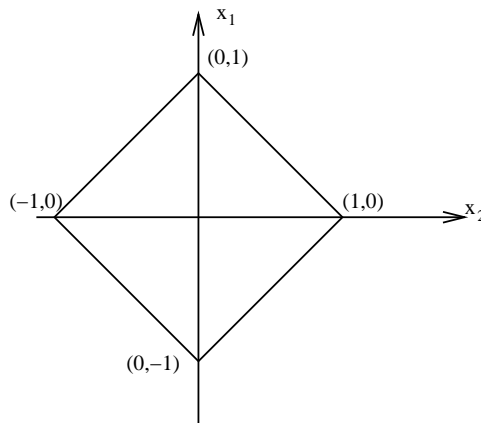
Ως πρώτο παράδειγμα, ας εξετάσουμε την περίπτωση ενός μαθηματικού προβλήματος ελαχιστοποίησης της τιμής μιας αντικειμενικής συνάρτησης της μορφής 5.6 όπου

το διάνυσμα \vec{x} έχει δύο συνιστώσες (x_1, x_2) και ο μοναδικός περιορισμός είναι η ανισότητα

$$\|x\|_1 \stackrel{\vec{x} \in \mathbb{R}^2}{=} |x_1| + |x_2| \leq 1 \quad (5.7)$$

Η τελευταία καθορίζει το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως το ρόμβο (περίγραμμα και εσωτερικό) που σχηματίζεται με κορυφές τα σημεία $(x_1, x_2) = (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1)$, βλ. σχήμα 5.1 Σε μια τέτοια περίπτωση, είναι σκόπιμο να επαναδιατυπώσουμε το μοναδικό αλλά δυστυχώς μη-λείο περιορισμό στη μορφή τεσσάρων λείων περιορισμών, δηλαδή

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &\leq 1 \\ x_1 - x_2 &\leq 1 \\ -x_1 + x_2 &\leq 1 \\ -x_1 - x_2 &\leq 1 \end{aligned}$$



Σχήμα 5.1: Γραφική παράσταση του χώρου των αποδεκτών λύσεων για το πρόβλημα με τον περιορισμό της σχέσης 5.7.

Ως δεύτερο παράδειγμα, αναφέρεται η περίπτωση βελτιστοποίησης όπου δεν υπάρχουν περιορισμοί αλλά η αντικειμενική συνάρτηση δεν είναι λεία. Ας υποθέσουμε ότι τίθεται προς επίλυση το πρόβλημα

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} F(\vec{x}) = \min_{x \in \mathbb{R}} \max(x^2, x)$$

με βέλτιστη λύση το $x = 0$. Η μη-λειότητα της $F(\vec{x})$ είναι προφανής. Σε μια τέτοια περίπτωση συμφέρει η επαναδιατύπωση του προβλήματος ως νέο πρόβλημα με περιορισμούς και λεία αντικειμενική συνάρτηση. Έτσι, αντ' αυτού προτείνεται να λυθεί το πρόβλημα

$$\min_{t \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}} t$$

(δύο μεταβλητές, οι x και t) με τους περιορισμούς

$$x \leq t \quad , \quad x^2 \leq t$$

Παρουσιάζοντας και σχολιάζοντας αυτές τις λίγες ενδεικτικές περιπτώσεις, στόχος ήταν να γίνει κατανοητή η τάση-ανάγκη να χρησιμοποιούνται τέτοιου είδους τεχνάσματα και μετασχηματισμοί κάθε φορά που στην αντικειμενική συνάρτηση εμφανίζονται απόλυτες τιμές, νόρμες ή συναρτήσεις όπως είναι οι \min και \max .

5.2 Διατύπωση με Χρήση Συνάρτησης Lagrange

Αρχικά, πρέπει να υπενθυμίσουμε και ανασυνθέσουμε δύο ορισμούς που είναι γνωστοί από τα προηγούμενα. Σε κάθε σημείο στο χώρο των μεταβλητών σχεδιασμού, η εφαπτόμενη (ευθεία για δύο μεταβλητές σχεδιασμού, επίπεδο για τρεις, κοκ) στην ισοσταθμική $F(\vec{x})$ χωρίζει το χώρο σε δύο υποχώρους ή υποτομείς. Από αυτούς, εκείνος στον οποίο αν επιλέξουμε κατεύθυνση ανίχνευσης αναμένεται βελτίωση της τρέχουσας λύσης, ονομάζεται **χρηστικός τομέας** (usable sector). Θεωρώντας προς το παρόν μόνο περιορισμούς ανισότητας (χωρίς βλάβη της γενικότητας ας θεωρήσουμε μόνο έναν, τον $c_1(\vec{x}) \leq 0$), η γραμμή-επιφάνεια-κλπ $c_1(\vec{x}) = 0$ χωρίζει το χώρο σε δύο υποχώρους ή υποτομείς. Ο ένας από αυτούς σχηματίζεται από λύσεις που δεν ικανοποιούν τον περιορισμό ενώ ο άλλος με λύσεις που τον ικανοποιούν θα ονομάζεται **αποδεκτός τομέας** (feasible sector). Για περισσότερους από έναν περιορισμούς, ο τελικός αποδεκτός τομέας είναι η τομή των αποδεκτών τομέων κάθε περιορισμού. Τέλος η τομή χρηστικού και αποδεκτού τομέα, σε κάθε σημείο του χώρου των λύσεων ορίζει τον **αποδεκτό-χρηστικό τομέα** (feasible-usable sector).

Στη συνέχεια, θα αναφερθούμε σε παραδείγματα διαχείρισης του αποδεκτού-χρηστικού τομέα σε μαθηματικά προβλήματα με περιορισμούς ισότητας και ανισότητας. Πρόκειται για εισαγωγικά παραδείγματα που στοχεύουν να προετοιμάσουν το έδαφος για την παρουσίαση και κατανόηση των συνθηκών Karush–Kuhn–Tucker.

5.2.1 Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ισότητας

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι να διατυπώσει την αναγκαία συνθήκη για τη βέλτιστη λύση σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ισότητας και, στη συνέχεια, να δείξει τη σημασία της σχέσης αυτής με ένα παράδειγμα.

Θεώρημα 5.1 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ισότητας)
Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^ να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα*

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \models \quad c_1(\vec{x}) = 0 \quad (5.8)$$

(με το σύμβολο \models να διαβάζεται 'με τον περιορισμό') είναι να μην υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} για την οποία συγχρόνως να ισχύουν οι σχέσεις

$$\left. \begin{aligned} \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}^*) &= 0 \\ \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) &< 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

Εναλλακτική διατύπωση της συνθήκης 5.9 είναι η:

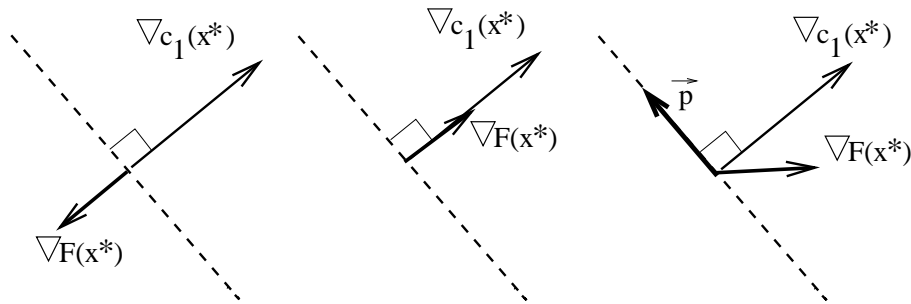
Θεώρημα 5.2 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ισότητας)

Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^* να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα 5.8 είναι τα διανύσματα $\nabla F(\vec{x}^*)$ και $\nabla c_1(\vec{x}^*)$ να είναι παράλληλα, δηλαδή να ισχύει

$$\nabla F(\vec{x}^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(\vec{x}^*) \quad (5.10)$$

για κάποια τιμή λ_1^* .

Η αναγκαία συνθήκη του θεωρήματος 5.2 σχολιάζεται γραφικά στο σχήμα 5.2.



Σχήμα 5.2: Διάφορες περιπτώσεις σχετικής θέσης των διανυσμάτων κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης και του περιορισμού, σχετικά με τη δυνατότητα ή όχι εύρεσης κατεύθυνσης κατά την οποία να υπάρχει βελτίωση της τρέχουσας λύσης.

Στο σημείο αυτό, και πριν το παράδειγμα εφαρμογής των παραπάνω, ας σημειώσουμε ότι αν **δεν** ισχύει η 5.10, τότε υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} για την οποία συγχρόνως να ισχύουν οι δύο σχέσεις 5.9. Τέτοια κατεύθυνση θα ήταν λ.χ. η

$$\vec{p} = - \left(I - \frac{\nabla c_1(\vec{x}^*)^T \nabla c_1(\vec{x}^*)}{\|\nabla c_1(\vec{x}^*)\|^2} \right) \nabla F(\vec{x}^*) \quad (5.11)$$

Δεν θα δώσουμε την απόδειξη της τελευταίας πρότασης. Η απόδειξη στηρίζεται στην ανισότητα του Holder, σύμφωνα με την οποία ισχύει ότι $|\vec{x}^T \vec{z}| \leq \|\vec{x}\| \|\vec{z}\|$, με την ισότητα να ισχύει όταν $\vec{x} = \lambda_1 \vec{z}$, $\lambda_1 \geq 0$. Θα επισημάνουμε, όμως, ότι το διάνυσμα της σχέσης 5.11 ικανοποιεί και τις δύο σχέσεις 5.9, όσο δεν ισχύει η 5.10 για κάποια τιμή λ_1^* .

Ως εφαρμογή, ας θεωρήσουμε το παρακάτω πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ισότητας

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1 + x_2 \quad (5.12)$$

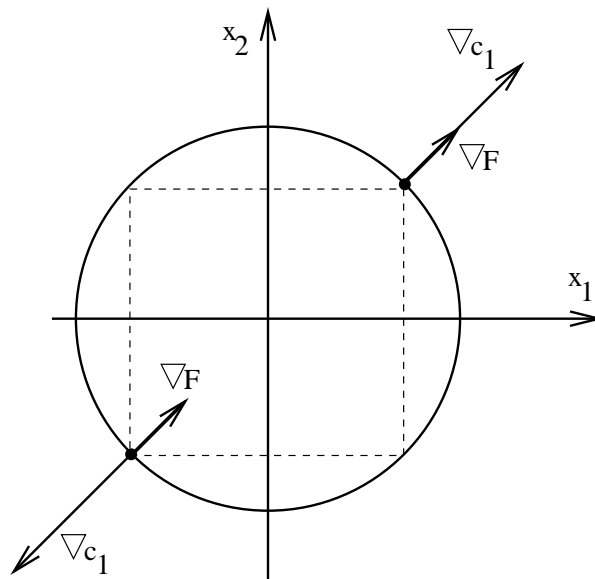
$$\models c_1(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0 \quad (5.13)$$

Ο περιορισμός 5.13 συγκεκριμενοποιεί το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως την περιφέρεια κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$. Στα σημεία της περιφέρειας, που σύμφωνα με την προηγούμενη ορολογία συνιστούν το χώρο Ω , αναζητούμε ως βέλτιστη λύση το ή τα σημεία που ελαχιστοποιούν την $F(\vec{x})$ της σχέσης 5.12. Εύκολα γίνεται αντιληπτό ότι η βέλτιστη λύση είναι η $\vec{x}^* = (-1, -1)$.

Ο υπολογισμός των κλίσεων της αντικειμενικής συνάρτησης και της συνάρτησης περιορισμού δίνει

$$\begin{aligned} \nabla F(\vec{x}) &= (1, 1) \\ \nabla c_1(\vec{x}) &= (2x_1, 2x_2) \end{aligned} \quad (5.14)$$

Το διάνυσμα $\nabla F(\vec{x})$ είναι σταθερού μέτρου και διεύθυνσης ενώ το $\nabla c_1(\vec{x})$ έχει μεν σταθερό μέτρο στα σημεία της περιφέρειας ακτίνας $\sqrt{2}$ αλλά η κατεύθυνσή του αλλάζει παραμένοντας κάθετο σε κάθε σημείο της με κατεύθυνση προς τα έξω του κύκλου. Παρατηρούμε εύκολα ότι μόνο στις αποδεκτές λύσεις $(-1, -1)$ και $(1, 1)$, τα $\nabla F(\vec{x})$ και $\nabla c_1(\vec{x})$ γίνονται συγγραμμικά, βλ. σχήμα 5.3, μόνο εκεί δηλαδή μπορούμε να γράψουμε ότι



Σχήμα 5.3: Γραφική ανάλυση του προβλήματος ελαχιστοποίησης 5.12 με τον περιορισμό 5.13.

$$\nabla F(\vec{x}) = \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x}) \quad (5.15)$$

Ειδικά για τη βέλτιστη λύση \vec{x}^* ισχύει η (αντίστοιχη της 5.15) σχέση 5.10, με $\lambda_1^* = -\frac{1}{2}$.

Ας διερευνήσουμε σε μεγαλύτερο βάθος το νόημα των παραπάνω. Ένας τρόπος για να γίνει αντιληπτή μια διαδικασία βελτιστοποίησης είναι, όντας σε μια λύση $\vec{x} \in \Omega$, να δημιουργηθεί μια νέα λύση $(\vec{x} + \vec{p}) \in \Omega$ με μικρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης. Πρακτικά, αναφερόμαστε σε δύο σημεία της περιφέρειας του κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$ όπου, σε προσέγγιση πρώτης τάξης, να ισχύουν οι εξής δύο απαιτήσεις:

- ως προς τη συνέχιση ικανοποίησης του περιορισμού

$$c_1(\vec{x} + \vec{p}) \approx c_1(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) = \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) = 0 \quad (5.16)$$

- ως προς τη βελτίωση (μείωση) της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης

$$F(\vec{x} + \vec{p}) \approx F(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < F(\vec{x}) \Rightarrow \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < 0 \quad (5.17)$$

Αν η τρέχουσα λύση \vec{x} είναι η βέλτιστη ($\vec{x} = \vec{x}^*$), τότε δεν πρέπει να υπάρχει διάνυσμα \vec{p} για το οποίο να ισχύουν συγχρόνως η ισότητα 5.16 και η ανισότητα 5.17. Ουσιαστικά, καταλήξαμε έτσι στην αναγκαία συνθήκη 5.9, με παραδοχές και σχήματα πρώτης τάξης.

Επόμενο βήμα της παραπάνω ανάπτυξης και συζήτησης είναι η επαναδιατύπωση του προβλήματος 5.8 ως ένα πρόβλημα στο οποίο αναζητούμε τα στάσιμα σημεία μιας **συνάρτησης Lagrange**. Η τελευταία ορίζεται ως

$$L(\vec{x}, \lambda_1) = F(\vec{x}) - \lambda_1 c_1(\vec{x}) \quad (5.18)$$

και η εύρεση των στάσιμων σημείων της προκύπτει από το μηδενισμό της κλίσης της

$$\nabla L(\vec{x}, \lambda_1) = \nabla F(\vec{x}) - \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x}) = 0 \quad (5.19)$$

Η σχέση 5.19 παραπέμπει ευθέως στην ικανοποίηση της σχέσης 5.10 για κάποια τιμή λ_1^* . Άρα, ένας τρόπος να επιλυθεί ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμό ισότητας είναι μέσω της αναζήτησης στάσιμων σημείων της συνάρτησης Lagrange 5.18. Θα τονίσουμε όμως ότι η συνθήκη αυτή είναι απλά **αναγκαία**, όχι **ικανή**. Για την κατανόηση αυτού, στο παράδειγμα που αναλύσαμε, παρατηρούμε ότι η σχέση 5.10 ισχύει σε δύο σημεία: το $(-1, -1)$ και το $(1, 1)$. Και στα δύο, τα διανύσματα $\nabla F(\vec{x})$ και $\nabla c_1(\vec{x})$ είναι συγγραμμικά, μόνο όμως το πρώτο αποτελεί βέλτιστη λύση του προβλήματος. Τέλος, με σκοπό να προλάβουμε κάθε σκέψη-ιδέα που θα αφορούσε στο πρόσημο της ποσότητας λ_1^* , γίνεται η διευκρίνιση ότι κάτι τέτοιο δεν ευσταθεί. Η εξήγηση είναι απλή: μπορούμε να γράψουμε τον περιορισμό ισότητας $c_1(\vec{x}) = 0$ στη μορφή $-c_1(\vec{x}) = 0$ οπότε κάθε προσπάθεια άντλησης πληροφορίας από το πρόσημο της ποσότητας λ_1^* είναι μάταιη, αφού και το $\nabla c_1(\vec{x})$ αλλάζει πρόσημο.

5.2.2 Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ανισότητας

Ακολουθεί η διατύπωση της αναγκαίας συνθήκης για τη ύπαρξη βέλτιστης λύσης σε πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ανισότητας. Ισχύει:

Θεώρημα 5.3 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ανισότητας)
Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^ να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα*

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \models \quad c_1(\vec{x}) \leq 0 \quad (5.20)$$

είναι η

$$\nabla F(\vec{x}^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(\vec{x}^*), \quad \lambda_1 \leq 0 \quad (5.21)$$

για κάποια τιμή λ_1^* και

$$\lambda_1^* c_1(\vec{x}^*) = 0 \quad (5.22)$$

Η συνθήκη αυτή σχετίζεται ασφαλώς με τις σχέσεις 5.18 και 5.19 και τη χρήση συνάρτησης Lagrange. Διαφέρει δε από την αντίστοιχη συνθήκη για τη βελτιστοποίηση με περιορισμό ισότητας ως προς την επιπλέον απαίτηση να είναι η ποσότητα λ_1^* μη-θετική. Υπενθυμίζεται ότι, στο τέλος της προηγούμενης ενότητας, σχολιάσαμε ότι, εκεί, το πρόσημο του λ_1 δεν έχει σημασία. Συγχρόνως με τη σχέση 5.21, επιβάλλεται και η συμπληρωματική συνθήκη 5.22, που σημαίνει ότι θα είναι $\lambda_1^* < 0$ μόνο αν ο περιορισμός $c_1(\vec{x})$ είναι ενεργός ($c_1(\vec{x}) = 0$). Αν ο περιορισμός $c_1(\vec{x})$ είναι ανενεργός, η 5.22 επιβάλλει $\lambda_1^* = 0$.

Το αριθμητικό πρόβλημα που θα αναλυθεί για την κατανόηση των παραπάνω είναι το

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1 + x_2 \quad (5.23)$$

$$\models \quad c_1(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 \leq 0 \quad (5.24)$$

Ο περιορισμός 5.24 καθορίζει ως χώρο αποδεκτών λύσεων (χώρο Ω) το εσωτερικό και την περιφέρεια κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$. Η βέλτιστη λύση που αναζητούμε είναι και πάλι η $\vec{x}^* = (-1, -1)$.

Σύμφωνα με την αναλυτική συζήτηση της προηγούμενης ενότητας, η τρέχουσα λύση \vec{x}^* δεν είναι βέλτιστη αν μπορεί να εντοπιστεί γειτονική της λύση $\vec{x} + \vec{p} \in \Omega$ η οποία να δίνει μικρότερη τιμή της $F(\vec{x})$. Σε προσέγγιση πρώτης τάξης, πρέπει

$$c_1(\vec{x} + \vec{p}) \approx c_1(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) \leq 0 \quad (5.25)$$

ενώ, συγχρόνως, θα ισχύει και η σχέση 5.17.

Με απλή γεωμετρική θεώρηση του προβλήματος, μπορούμε να διακρίνουμε δύο πιθανές περιπτώσεις:

- Αρχικά, έστω ότι το σημείο \vec{x} είναι εσωτερικό του κύκλου, δηλαδή $c_1(\vec{x}) < 0$. Για κάθε τέτοιο (εσωτερικό) σημείο του κύκλου, η επιλογή της κατεύθυνσης

$$\vec{p} = c_1(\vec{x}) \frac{\nabla F(\vec{x})}{\|\nabla F(\vec{x})\|} \quad (5.26)$$

εξασφαλίζει και ικανοποίηση της 5.17 αλλά και της 5.25. Μοναδική περίπτωση για να μην ισχύει αυτό είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}) = \vec{0}$. Η απόδειξη των παραπάνω είναι ιδιαίτερα εύκολη.

- Δεύτερη περίπτωση που αξίζει να εξετασθεί είναι αυτή όπου το \vec{x} ανήκει στο όριο του κύκλου, είναι δηλαδή $c_1(\vec{x}) = 0$ (ενεργός περιορισμός). Η απαίτηση 5.25 γράφεται απλούστερα ως $\vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) \leq 0$ και συνοδεύει την $\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < 0$ στην αναζήτηση καλύτερης λύσης από την τρέχουσα. Οι δύο τελευταίες απαιτήσεις ορίζουν έναν κλειστό (η πρώτη) και έναν ανοικτό (η δεύτερη) υπόχωρο. Η τομή τους ορίζει το χρηστικό-αποδεκτό τομέα, στον οποίο μπορεί να επιλεγεί κατεύθυνση μείωσης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης χωρίς να διαταράσσεται ο περιορισμός. Η μοναδική περίπτωση που η τομή αυτή είναι το κενό σύνολο είναι όταν τα διανύσματα $\nabla c_1(\vec{x})$ και $\nabla F(\vec{x})$ είναι συγγραμμικά και αντίθετης φοράς. Είναι η περίπτωση που ισχύει $\nabla F(\vec{x}) = \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x})$ με $\lambda_1 \leq 0$. Μόνο αν ικανοποιείται η τελευταία σχέση (προηγουμένως τη διατυπώσαμε ως αναγκαία συνθήκη 5.21) τότε είναι αδύνατο να βρεθεί ‘καλύτερη’ λύση που να ικανοποιεί τον περιορισμό, άρα η τρέχουσα είναι και η βέλτιστη λύση \vec{x}^* .

5.2.3 Συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker

Με τη βοήθεια των μέχρι τώρα απλών παραδειγμάτων, διατυπώσαμε τη βασική αναγκαία συνθήκη για την εύρεση βέλτιστης λύσης. Διατυπώσαμε τη συνάρτηση Lagrange, σχέση 5.18, της οποίας αναζητήσαμε τα στάσιμα σημεία. Επιβάλαμε απαιτήσεις προσήμου στους πολλαπλασιαστές λ_i που αντιστοιχούν σε περιορισμούς ανισότητας (βλ. σχέση 5.21) και διατυπώσαμε τη συμπληρωματική αναγκαία συνθήκη στη μορφή της σχέσης 5.22, πάλι για την περίπτωση περιορισμών ανισότητας.

Γενικεύοντας, ανεξάρτητα του πλήθους περιορισμών τύπου ισότητας ή ανισότητας που υπάρχουν, η συνάρτηση Lagrange γράφεται

$$L(\vec{x}, \vec{\lambda}) = F(\vec{x}) - \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i c_i(\vec{x}) \quad (5.27)$$

όπου με $\vec{\lambda}$ εκφράζουμε το διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange λ_i .

Οι πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες, γνωστές ως συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker, για την ύπαρξη βέλτιστης λύσης διατυπώνονται στη μορφή του παρακάτω θεωρήματος:

Αν \vec{x}^* είναι μια τοπική λύση του προβλήματος 5.6, τότε υπάρχει ένα διάνυσμα πολλαπλασιαστών Lagrange $\vec{\lambda}^*$, με συνιστώσες λ_i^* , $i \in E \cup I$, τέτοιο ώστε στο $(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*)$ να ισχύουν

$$\begin{aligned} \nabla L(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*) &= 0 \\ c_i(\vec{x}^*) &= 0, \quad \forall i \in E \\ c_i(\vec{x}^*) &\leq 0, \quad \forall i \in I \\ \lambda_i^* &\leq 0, \quad \forall i \in I \\ \lambda_i c_i(\vec{x}^*) &= 0, \quad \forall i \in E \cup I \end{aligned} \quad (5.28)$$

Τις συνθήκες 5.28 ονομάζουμε συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker. Αξίζει να ξαναγράψουμε την πρώτη από αυτές τις σχέσεις ως

$$\nabla F(\vec{x}^*) - \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i \nabla c_i(\vec{x}^*) = 0 \quad (5.29)$$

Επισημαίνεται ότι ο τελεστής κλίσης ∇ που χρησιμοποιείται θα έπρεπε κανονικά να συμβολίζεται με ∇_x ώστε να γίνεται εμφανές ότι η παραγωγή γίνεται μόνο ως προς τις συνιστώσες του διανύσματος \vec{x} και όχι αυτές του $\vec{\lambda}$. Η τελευταία από τις σχέσεις 5.28 είναι αυτή που συνήθως αποκαλούμε ‘συμπληρωματική συνθήκη’. Για τους ενεργούς περιορισμούς ανισότητας ($c_i(\vec{x}^*) = 0$, $i \in I$) η συμπληρωματική συνθήκη δεν δίνει πληροφορία για το πρόσημο του πολλαπλασιαστή λ_i . Αντίθετα, όμως, δείχνει την ανάγκη μηδενισμού οποιουδήποτε πολλαπλασιαστή λ_i συνοδεύει ένα μη-ενεργό περιορισμό ανισότητας ($c_i(\vec{x}^*) < 0$, $i \in I$).

Ακολουθεί ένα ακόμη παράδειγμα για την κατανόηση των αναγκαίων συνθηκών Karush–Kuhn–Tucker. Για $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$, ζητούμενο είναι η ελαχιστοποίηση της

$$\begin{aligned} F(x_1, x_2) &= (x_1 - \frac{3}{2})^2 + (x_2 - \frac{1}{8})^2 \\ \models c_1(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 1 \leq 0 \\ c_2(x_1, x_2) &= x_1 - x_2 - 1 \leq 0 \\ c_3(x_1, x_2) &= -x_1 + x_2 - 1 \leq 0 \\ c_4(x_1, x_2) &= -x_1 - x_2 - 1 \leq 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

με τους τέσσερις παραπάνω περιορισμούς και βέλτιστη λύση την $\vec{x}^* = (1, 0)$. Στη βέλτιστη λύση, οι δύο πρώτοι περιορισμοί είναι ενεργοί αφού $c_1(\vec{x}^*) = 0$ και $c_2(\vec{x}^*) = 0$. Το ίδιο όμως δεν ισχύει για τους άλλους δύο περιορισμούς, $c_3(\vec{x}^*) \neq 0$, $c_4(\vec{x}^*) \neq 0$. Για το λόγο αυτό, η συμπληρωματική συνθήκη (τελευταία σχέση των 5.28) επιβάλλει ότι $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$. Υπολογίζοντας τις κλίσεις της αντικειμενικής συνάρτησης και των δύο περιορισμών, στη βέλτιστη λύση, έχουμε

$$\begin{aligned}\nabla F(\vec{x}^*) &= (-1, -\frac{1}{2})^T \\ \nabla c_1(\vec{x}^*) &= (1, 1)^T \\ \nabla c_2(\vec{x}^*) &= (1, -1)^T\end{aligned}$$

Η σχέση 5.29 δίνει το σύστημα

$$\begin{aligned}-1 - \lambda_1^* - \lambda_2^* &= 0 \\ -\frac{1}{2} - \lambda_1^* + \lambda_2^* &= 0\end{aligned}$$

από το οποίο προκύπτει ότι $\lambda_1^* = -\frac{3}{4}$ και $\lambda_2^* = -\frac{1}{4}$. Συνολικά δηλαδή οι πολλαπλασιαστές Lagrange είναι

$$(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \lambda_3^*, \lambda_4^*) = (-\frac{3}{4}, -\frac{1}{4}, 0, 0)$$

με μη-θετικές όλες τις τιμές. Τέλος, είναι απλό να ελέγξουμε ότι $c_3(\vec{x}^*) = -2 < 0$ και $c_4(\vec{x}^*) = -2 < 0$, άρα επαληθεύονται και οι τέσσερις περιορισμοί.

5.3 Σειριακή Ελαχιστοποίηση για Προβλήματα με Περιορισμούς

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιάσουμε αλγοριθμικές παραλλαγές με τις οποίες μπορούν να αντιμετωπισθούν προβλήματα βελτιστοποίησης τα οποία διέπονται από περιορισμούς ισότητας ή/και ανισότητας. Βασικό χαρακτηριστικό τους είναι ότι μπορούν να χρησιμοποιήσουν ως μέθοδο αντίχενυσης οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης ικανή να επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Φαίνεται, έτσι, εύκολα ότι αν ο μηχανικός διαθέτει μια οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης για προβλήματα χωρίς περιορισμούς, είναι δυνατό να τη χρησιμοποιήσει για να λύσει προβλήματα με περιορισμούς, αρκεί να επέμβει κατάλληλα (όπως θα δούμε στη συνέχεια) στην αντικειμενική συνάρτηση που η μέθοδος χρησιμοποιεί. Όμως, το κόστος που καλείται να πληρώσει ως αντάλλαγμα της ευκολίας αυτής είναι ότι θα λύσει **σειριακά** περισσότερα από ένα προβλήματα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Τα παραπάνω σχόλια δικαιολογούν πλήρως το σύνθετο τίτλο του παρόντος κεφαλαίου.

Βασικό στοιχείο όλων των μεθόδων που θα παρουσιασθούν στη συνέχεια είναι η χρήση **συναρτήσεων ή συντελεστών ποινής** (penalty) για την ενσωμάτωση των περιορισμών στην αντικειμενική συνάρτηση. Η ιδέα είναι, ουσιαστικά, απλή: για να λυθεί το πρόβλημα με περιορισμούς

$$\begin{aligned} \min \quad & F(\vec{x}) \\ \models \quad & c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \\ & c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \end{aligned} \quad (5.31)$$

ορίζεται η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση (pseudo-objective function) $\Phi(\vec{x}, w_p)$ σύμφωνα με τη σχέση

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w_p P(\vec{x}) \quad (5.32)$$

όπου w_p είναι ο συντελεστής ποινής (ή βάρος ποινής, penalty weight) και $P(\vec{x})$ είναι η συνάρτηση ποινής, η οποία εξαρτάται από την παραλλαγή μεθόδου που θα επιλέξουμε. Ο συντελεστής w_p μπορεί να παραμένει σταθερός κατά τη διάρκεια των σειριακών κλήσεων στη μέθοδο βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (κάθε μια τέτοια κλήση θα την ονομάζουμε **κύκλος**) αν και συνήθως διατηρεί σταθερή τιμή σε έναν κύκλο και επαναπροσδιορίζεται στον επόμενο.

Για τη συνέχεια, για λόγους συντομογραφίας, κάθε μέθοδος η οποία επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς, μέσω σειριακών κλήσεων μιας μεθόδου ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς και με τη βοήθεια της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης της σχέσης 5.32, θα ονομάζεται SUMT (Sequential Unconstrained Minimization Technique).

Συγκεκριμένα, θα παρουσιασθούν τρεις παραλλαγές SUMT, των οποίων τα βασικά χαρακτηριστικά κατηγοριοποιούνται στη συνέχεια:

Η μέθοδος της εξωτερικής ποινής, η οποία είναι η περισσότερο κλασική και η ευκολότερη στον προγραμματισμό. Η συνάρτηση ποινής $P(\vec{x})$ αποκτά μη-μηδενική τιμή και άρα τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση μόνο όταν δεν ικανοποιείται ένας περιορισμός.

Η μέθοδος της εσωτερικής ποινής, κατά την οποία η συνάρτηση ποινής $P(\vec{x})$ αποκτά μη-μηδενική τιμή και άρα τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση όταν η λύση πλησιάζει τη μη-αποδεκτή περιοχή λύσεων έστω και αν η τρέχουσα λύση είναι ακόμα αποδεκτή. Στη μέθοδο αυτή δεν επιτρέπεται να διαταραχθεί οποιοσδήποτε περιορισμός και η τελική βέλτιστη λύση προκύπτει από τη διαδοχή αποδεκτών λύσεων.

Η μέθοδος της διευρυμένης εσωτερικής ποινής, η οποία συνδυάζει πλεονεκτήματα και αποφεύγει μειονεκτήματα των δύο προηγούμενων, όπως θα περιγραφεί λεπτομερώς στη συνέχεια.

5.3.1 Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής

Ήδη αναφέρθηκε ότι η μέθοδος της εξωτερικής ποινής (exterior penalty function method) είναι η απλούστερη κατά την εφαρμογή της. Η συνάρτηση ποινής ορίζεται από τη σχέση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} [\max(0, c_i(\vec{x}))]^2 + \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (5.33)$$

Από τη σχέση 5.31 φαίνεται αυτό που διατυπώσαμε ως βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου: η συνάρτηση ποινής τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση μόνο όταν δεν ικανοποιείται ένας περιορισμός ισότητας ή ανισότητας. Είναι, δηλαδή, $P(\vec{x}) = 0$ για κάθε λύση \vec{x} στην αποδεκτή περιοχή λύσεων Ω . Στη σχέση 5.33, τα τετράγωνα και στους δύο όρους του δεξιού μέλους εξυπηρετούν αφενός μεν το μηδενισμό της κλίσης μιας συνιστώσας του $P(\vec{x})$ στο σημείο που οριακά ικανοποιείται ο αντίστοιχος περιορισμός, αφετέρου δε το να έχει η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(\vec{x}, w_p)$ συνεχή κλίση παντού. Ας συγκρατήσουμε, όμως, ότι η δεύτερη παράγωγος της $P(\vec{x})$ και συνεπώς και της $\Phi(\vec{x}, w_p)$ είναι ασυνεχής εκεί που οριακά διαταράσσεται ο περιορισμός. Η τελευταία παρατήρηση σημαίνει ότι ενδεχομένως να προκύψουν προβλήματα κακής αριθμητικής συμπεριφοράς και δυσκολίας σύγκλισης αν χρησιμοποιηθεί μέθοδος βελτιστοποίησης δεύτερης τάξης.

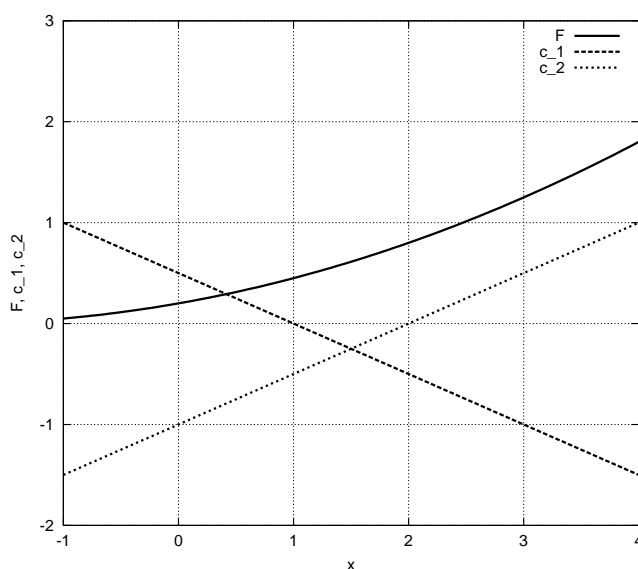
Έχοντας ορίσει τη συνάρτηση ποινής, το επόμενο βήμα είναι να επιλεγεί η κατάλληλη τιμή για το συντελεστή w_p , ώστε να σχηματισθεί η $\Phi(\vec{x}, w_p)$, σύμφωνα με τη σχέση 5.32. Τα παρακάτω σχόλια σχετικά με το αν είναι καλύτερα να επιλεγεί μικρή ή μεγάλη τιμή για το w_p γίνονται εύκολα κατανοητά. Μικρή τιμή του w_p οδηγεί σε ένα εύκολα επιλυόμενο πρόβλημα βελτιστοποίησης (υποβαθμίζεται ο ρόλος των περιορισμών στη σχέση 5.32) αλλά η λύση που θα προκύψει είναι πολύ πιθανό να μην ικανοποιεί τους περιορισμούς. Αντίθετα, επιλέγοντας μεγάλη τιμή για το w_p , ο ρόλος των περιορισμών στη σχέση 5.32 αναβαθμίζεται, από αριθμητικής πλευράς το πρόβλημα παρουσιάζει δυσκολίες σύγκλισης αλλά η βέλτιστη λύση που τελικά θα προκύψει δύσκολα δεν θα ικανοποιεί τους περιορισμούς.

Άμεση συνέπεια των παραπάνω είναι ο εξής απλός αλγόριθμος: η ελαχιστοποίηση ξεκινά με μια μικρή τιμή του w_p με την οποία πραγματοποιείται ο πρώτος κύκλος και στη συνέχεια, κάθε φορά που αρχίζει ένας νέος κύκλος, το w_p αυξάνεται (λ.χ. τριπλασιάζεται). Με μια τέτοια επιλογή διαδοχικών τιμών του w_p , είναι προφανές ότι στους πρώτους κύκλους αναμένονται μη-αποδεκτές λύσεις και, όσο μεγαλώνει η τιμή του w_p , η λύση πλησιάζει την αποδεκτή περιοχή. Το κριτήριο τερματισμού της σειριακής διαδικασίας ενεργοποιείται όταν η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$ στον τελευταίο κύκλο είναι μικρότερη από μια ανοχή που καθορίζει ο χρήστης ή/και ότι όλοι οι περιορισμοί ικανοποιούνται (με ανοχές, πάλι, που καθορίζει ο χρήστης). Βασικό λοιπόν χαρακτηριστικό της μεθόδου της εξωτερικής ποινής είναι ότι η βέλτιστη λύση (που στις περισσότερες των περιπτώσεων ικανοποιεί οριακά τους περιορισμούς) προσεγγίζεται από την περιοχή των μη-αποδεκτών λύσεων. Συνεπώς, αν διακοπεί πρόωρα η σύγκλιση του αλγορίθμου, θα έχει εντοπισθεί μια 'βέλτιστη' λύση που (οριακά, έστω) δεν θα ικανοποιεί κάποιους ή όλους τους περιορισμούς.

Το παρακάτω πρόβλημα θα βοηθήσει στην περαιτέρω κατανόηση της μεθόδου της εξωτερικής ποινής. Το ίδιο πρόβλημα θα φανεί χρήσιμο και στις επόμενες παραλλαγές της SUMT. Πρόκειται για πρόβλημα μιας ελεύθερης μεταβλητής και δύο περιορισμών ανισότητας, το

$$\begin{aligned} \min \quad & F(x) = \frac{(x+2)^2}{20} \\ \text{f.t.} \quad & c_1(x) = \frac{1-x}{2} \leq 0 \\ & c_2(x) = \frac{x-2}{2} \leq 0 \end{aligned} \quad (5.34)$$

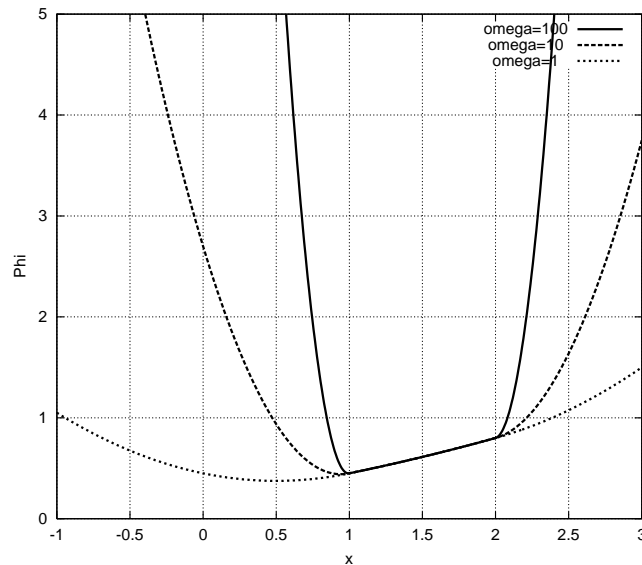
Οι περιορισμοί καθορίζουν και το πεδίο των αποδεκτών λύσεων $\Omega = [1, 2]$, βλ. και σχήμα 5.4. Η βέλτιστη λύση είναι η $x = 1$ (με $F = 0.45$), ικανοποιεί δηλαδή οριακά τον περιορισμό c_1 .



Σχήμα 5.4: Η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί του προβλήματος της σχέσης 5.34. Η βέλτιστη λύση είναι η $x^* = 1$, στο αριστερό όριο της αποδεκτής περιοχής λύσεων $\Omega = [1, 2]$.

Γραφικά, η εφαρμογή της μεθόδου της εξωτερικής ποινής απεικονίζεται στο σχήμα 5.5. Αν εφαρμοσθεί ο αλγόριθμος που περιγράψαμε προηγούμενα (ότι, δηλαδή, στην αρχή χρησιμοποιούνται μικρές τιμές του w_p , οι οποίες σταδιακά αυξάνονται), παρατηρούμε ότι σε κάποιον από τους πρώτους κύκλους (όπου, ας υποθεθεί, ότι $w_p = 1$), η ελάχιστη τιμή της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης συμβαίνει για $x < 1$ (άρα η βέλτιστη λύση είναι μη-αποδεκτή, βλ. σχήμα 5.5). Σε επόμενους κύκλους καθώς αυξάνει η τιμή του w_p , από το σχήμα 5.5 αντιλαμβανόμαστε τη βέλτιστη λύση κάθε κύκλου να πλησιάζει στην πραγματική βέλτιστη $x^* = 1$, πάντοτε όμως από τη μη-αποδεκτή περιοχή. Η λύση $x^* = 1$ προκύπτει ουσιαστικά καθώς $w_p \rightarrow \infty$.

Έτσι, αν η σειριακή εκτέλεση των κύκλων του SUMT διακοπεί νωρίτερα, η βέλτιστη λύση που θα προκύψει θα είναι μη-αποδεκτή αλλά με τιμή κοντά στην πραγματικά βέλτιστη (πρακτικά, $x = 1 - \varepsilon$, όπου ε είναι μια μικρή ποσότητα). Αυτό που μόλις διατυπώσαμε αποτελεί και τον κύριο λόγο που αναπτύχθηκε η μέθοδος της εσωτερικής ποινής ως εναλλακτικής της τρέχουσας.



Σχήμα 5.5: Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w_p)$ του προβλήματος 5.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w_p ($w_p = 100, 10, 1$). Παρατηρήστε ότι, στη μέθοδο της εξωτερικής ποινής, η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση παραμένει αναλλοίωτη στην περιοχή των αποδεκτών λύσεων $x \in [1, 2]$.

5.3.2 Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής

Όπως έγινε σαφές στην προηγούμενη παράγραφο, ο λόγος που αναπτύχθηκε η μέθοδος της (συνάρτησης) εσωτερικής ποινής (interior penalty function method) είναι για να μπορεί η διαδικασία SUMT να προσεγγίζει τη βέλτιστη λύση από την περιοχή των αποδεκτών λύσεων. Προφανές κέρδος είναι το ότι, αν η μέθοδος τερματίσει νωρίτερα, μπορεί μεν η λύση να μην είναι ακριβώς η βέλτιστη (θα είναι ίσως μια πολύ κοντινή της) αλλά θα είναι σίγουρα μια αποδεκτή λύση. Πρακτικά, η τελική βέλτιστη λύση προκύπτει ως μια αλληλουχία αποδεκτών λύσεων, πλεονέκτημα το οποίο 'στοιχίζει' τη διατύπωση ενός πιά πολύπλοκου προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η μέθοδος της εσωτερικής ποινής δεν επιτρέπει την εμφάνιση μη-αποδεκτών λύσεων σε κανένα κύκλο του SUMT.

Η διαφορά μεταξύ μεθόδων εξωτερικής και εσωτερικής ποινής έγκειται στον τρόπο ορισμού της συνάρτησης ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας. Στη μέθοδο εσωτερικής ποινής, η συνάρτηση ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας δίνεται από τη σχέση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} \frac{-1}{c_i(\vec{x})} \quad (5.35)$$

Παρακάτω δεν χρειάζεται να αναφερθούμε ιδιαίτερα σε περιορισμούς ισότητας. Αν υπάρχουν, αντιμετωπίζονται με το αντίστοιχο τμήμα της συνάρτησης εξωτερικής ποινής (σχέση 5.33). Έτσι η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(\vec{x}, w_p)$ γράφεται

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w'_p P(\vec{x}) + w_p \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (5.36)$$

ή

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w'_p \sum_{i \in I} \frac{-1}{c_i(\vec{x})} + w_p \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (5.37)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε ο διαφορετικός συντελεστής ποινής w'_p για τους περιορισμούς ανισότητας.

Είναι βασικό να κατανοήσουμε τον ορισμό 5.35. Όντας στην περιοχή αποδεκτών λύσεων, ισχύει $c_i(\vec{x}) < 0$ και επομένως υπάρχει θετική συνεισφορά στην τιμή της συνάρτησης $P(\vec{x})$. Μπορούν δε να χρησιμοποιηθούν και άλλες συναρτήσεις αντίστοιχης συμπεριφοράς με την 5.35. Ενδεικτικά, δίνεται και η εναλλακτική έκφραση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} [-\ln(-c_i(\vec{x}))] \quad (5.38)$$

Ανεξάρτητα αν θα χρησιμοποιηθεί η 5.35 ή η 5.38, η τιμή της ποινής αυξάνει ($P(\vec{x}) \rightarrow \infty$) καθώς πλησιάζουμε το σημείο όπου ο περιορισμός ικανοποιείται οριακά (εκεί που $c_i(\vec{x}) = 0$). Η σχέση 5.38 συνοδεύεται, γενικά, από καλύτερη αριθμητικά συμπεριφορά.

Υπενθυμίζεται ότι, στο ίδιο σημείο, στη μέθοδο της εξωτερικής ποινής η τιμή της $P(\vec{x})$ ήταν εξ ορισμού μηδενική.

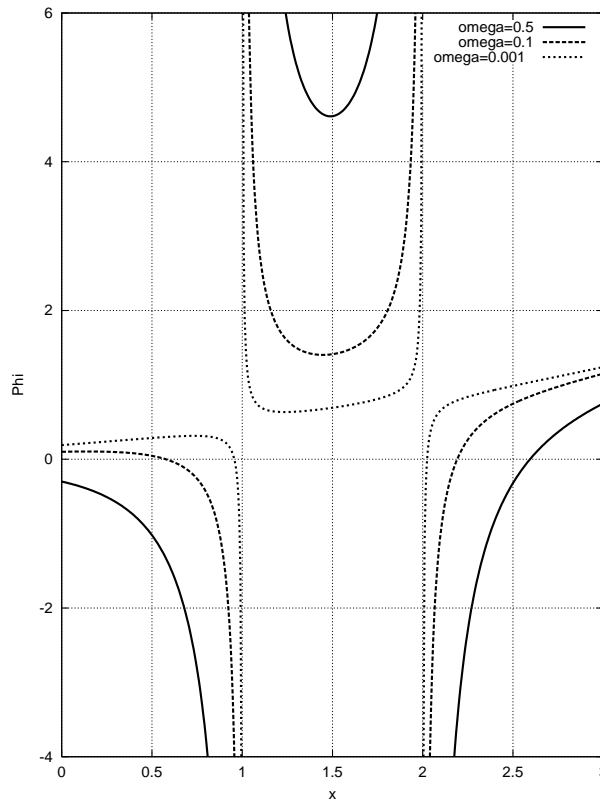
Κατά την πορεία της μεθόδου εσωτερικής ποινής, η συμπεριφορά των συντελεστών w'_p και w_p είναι αντίστροφη. Η τιμή του w'_p με την οποία ξεκινά η μέθοδος είναι μεγάλη (θετική) ενώ, αντίθετα, στους πρώτους κύκλους επιλέγεται μικρή τιμή για το συντελεστή w_p . Από κύκλο σε κύκλο, η τιμή του w'_p μειώνεται (θα μπορούσε λ.χ. στον επόμενο κύκλο να διαιρείται με 3) ενώ αυτή του w_p αυξάνεται (θα μπορούσε λ.χ. να πολλαπλασιάζεται με 3). Και στις δύο περιπτώσεις υπάρχει συνήθως κάτω όριο τιμής για το w'_p και άνω όριο για το w_p .

Αν υποθεθεί ότι το πρόβλημά μας έχει μόνο έναν περιορισμό ανισότητας και δεν έχει περιορισμούς ισότητας, μπορούμε να σχηματίσουμε τον τρόπο που συγκλίνει η μέθοδος. Η αρχική λύση είναι πάντα αποδεκτή. Αν υποθεθεί ότι είναι μακριά από το σημείο οριακής ικανοποίησης του περιορισμού, η τιμή της $P(\vec{x})$ είναι μικρή αλλά πολλαπλασιάζεται με την αρχικά μεγάλη τιμή του w'_p . Από κύκλο σε κύκλο, καθώς η λύση πλησιάζει την οριακή ικανοποίηση του περιορισμού, η τιμή της $P(\vec{x})$ αυξάνεται αρκετά αλλά συγχρόνως μειώνεται ο συντελεστής w'_p .

Στη συνέχεια, θα σχολιάσουμε τον τρόπο με τον οποίο η μέθοδος της εσωτερικής ποινής αντιμετωπίζει το πρόβλημα 5.34. Στο εσωτερικό της περιοχής των αποδεκτών λύσεων $\Omega = [1, 2]$, η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση γράφεται

$$\Phi(x, w'_p) = \frac{(x+2)^2}{20} + w'_p \left(\frac{-2}{1-x} - \frac{2}{x-2} \right) \quad (5.39)$$

Η γραφική παράσταση της σχέσης 5.39 δίνεται στο σχήμα 5.6.



Σχήμα 5.6: Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w_p)$ του προβλήματος 5.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w_p' ($w_p' = 0.5, 0.1, 0.01$). Παρατηρήστε ότι στη μέθοδο της εσωτερικής ποινής, η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση είναι ασυνεχής εκεί όπου η λύση εισέρχεται στη μη-αποδεκτή περιοχή.

Θα ολοκληρώσουμε την ενότητα αυτή με συγκριτικά σχόλια για τις μεθόδους της εσωτερικής και εξωτερικής ποινής.

- Η συνάρτηση εξωτερικής ποινής ορίζεται παντού χωρίς ασυνέχεια κατά τη μετάβαση από τη μη-αποδεκτή στην αποδεκτή περιοχή. Η βέλτιστη λύση προκύπτει καθώς $w_p \rightarrow \infty$ και προσεγγίζεται από την πλευρά των μη-αποδεκτών λύσεων. Γί αυτό ελοχεύει ο κίνδυνος η τελική λύση να είναι κοντά στη βέλτιστη αλλά να μην είναι αποδεκτή αν, για οποιοδήποτε λόγο, η σύγκλιση τερματίσει πρόωρα.
- Η συνάρτηση εσωτερικής ποινής παρουσιάζει ασυνέχεια τιμής κατά τη μετάβαση από τη μη-αποδεκτή στην αποδεκτή περιοχή. Η βέλτιστη λύση προκύπτει καθώς $w_p' \rightarrow 0$ και προσεγγίζεται από την πλευρά των αποδεκτών λύσεων ενώ αποκλείονται μη-αποδεκτές λύσεις.

5.3.3 Η Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

Ο επίλογος της προηγούμενης ενότητας δικαιολογεί την ανάγκη συγκερασμού των δύο προηγούμενων μεθόδων (εξωτερικής και εσωτερικής ποινής) ώστε, υιοθετώντας τα πλεονεκτήματα και αποφεύγοντας τα μειονεκτήματα κάθε μεθόδου, να δημιουργηθεί μια διευρυμένη μέθοδος (extended method). Επειδή οι βασικές παρεμβάσεις γίνονται στις συναρτήσεις ποινής οι οποίες ορίστηκαν ως συναρτήσεις εσωτερικής ποινής, η νέα μέθοδος θα ονομάζεται **μέθοδος της διευρυμένης εσωτερικής ποινής** (extended internal penalty method). Υπενθυμίζεται ότι οι παρεμβάσεις αφορούν πάντα τον τρόπο διαχείρισης των περιορισμών ανισότητας ενώ για τους περιορισμούς ισότητας εφαρμόζεται τυπικά η μέθοδος της εξωτερικής ποινής.

Παρόλο που με τον όρο διευρυμένες SUMT χαρακτηρίζονται αρκετές μέθοδοι, εδώ θα παρουσιασθούν μόνο δύο από αυτές.

Η Μέθοδος της Γραμμικής Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

Η μέθοδος της γραμμικής διευρυμένης εσωτερικής ποινής (linear extended penalty method) στηρίζεται σε συνάρτηση ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας της μορφής

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} \tilde{c}(\vec{x}) \quad (5.40)$$

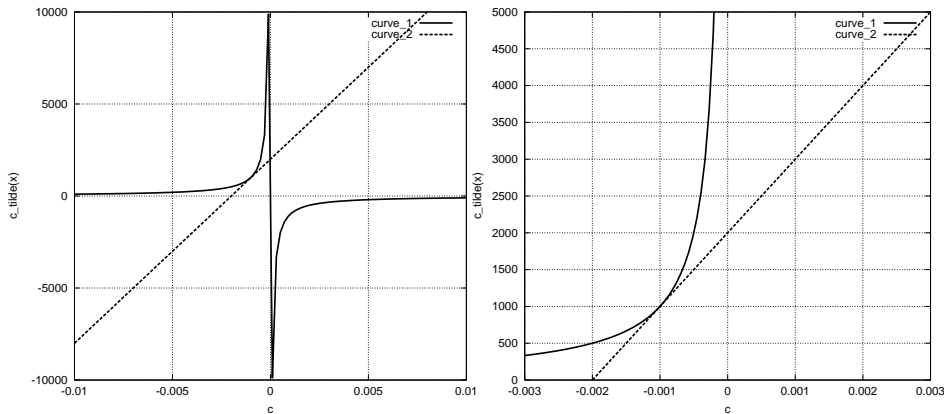
όπου

$$\begin{aligned} \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{1}{c_i(\vec{x})} \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) \leq \varepsilon \\ \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{2\varepsilon - c_i(\vec{x})}{\varepsilon^2} \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) > \varepsilon \end{aligned} \quad (5.41)$$

και ε είναι **αρνητικός** αριθμός μικρού μέτρου.

Η πρώτη από τις δύο προηγούμενες σχέσεις δεν είναι άλλη από τη σχέση 5.35, την έκφραση δηλαδή της συνάρτησης εσωτερικής ποινής. Απλά, παύει να εφαρμόζεται μεταπίπτοντας στη δεύτερη από τις σχέσεις 5.41, καθώς πλησιάζει η οριακή ικανοποίηση (ως ισότητα) του περιορισμού ανισότητας. Η δεύτερη από τις σχέσεις 5.41 είναι αυτό που, ειδικά, θα αποκαλούσαμε συνάρτηση της διευρυμένης εξωτερικής ποινής. Εκτελώντας τις απαραίτητες πράξεις στις σχέσεις 5.41, αποδεικνύεται εύκολα η συνέχεια τιμής και πρώτης παραγώγου στο σημείο μετάβασης $c_1(\vec{x}) = \varepsilon$. Συγχρόνως, φαίνεται εύκολα ότι η δεύτερη παράγωγος στο ίδιο σημείο είναι ασυνεχής. Η τελευταία ασυνέχεια καθιστά το σχήμα αυτό επισφαλές οποτεδήποτε χρησιμοποιείται μέθοδος βελτιστοποίησης δεύτερης τάξης.

Σημειώνεται ότι μέχρι τώρα δεν ασχοληθήκαμε με την τιμή του ε , η οποία αποτελεί (χρίσιμη) επιλογή του μηχανικού που χρησιμοποιεί τη μέθοδο αυτή σε πρόβλημα βελτιστοποίησης. Ένας τυπικός τρόπος επιλογής τιμής του ε είναι απαιτώντας να αποκτήσει $\Phi(\vec{x}, w_p)$ θετική κλίση στο οριακό σημείο ικανοποίησης του περιορισμού. Με αυτό ως κριτήριο, προτείνεται το ε να καθορίζεται από τη σχέση



Σχήμα 5.7: Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων 5.41, σχεδιασμένων για την (τυχαία) τιμή $\varepsilon = -0.001$. Το δεύτερο σχήμα είναι μεγέθυνση του πρώτου, στο σημείο μετάβασης.

$$\varepsilon = -C(w'_p)^a \quad (5.42)$$

όπου $\frac{1}{2} \leq a \leq \frac{1}{3}$ και C είναι μια σταθερά.

Για το ήδη γνωστό πρόβλημα 5.34, με $a = \frac{1}{2}$ και $C = 0.15$, η μορφή της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης $\Phi(\vec{x}, w_p)$, όπως προκύπτει για τρεις τιμές του w'_p και τις αντίστοιχες τιμές του ε παρουσιάζεται στο σχήμα 5.8

Η Μέθοδος της Τετραγωνικής Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

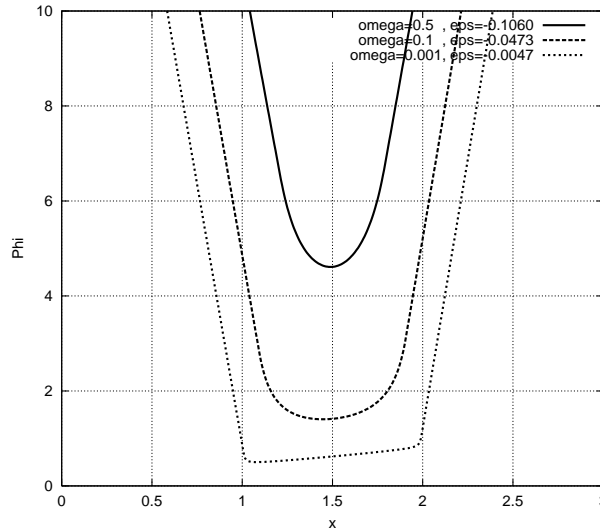
Η μέθοδος της τετραγωνικής διευρυμένης εσωτερικής ποινής (quadratic extended penalty method) καλύπτει το μειονέκτημα της γραμμικής μεθόδου ως προς την ασυνέχεια της δεύτερης παραγώγου. Οι αντίστοιχες της σχέσης 5.41 εκφράσεις είναι

$$\begin{aligned} \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{1}{c_i(\vec{x})} \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) \leq \varepsilon \quad (5.43) \\ \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{1}{\varepsilon} \left[\left(\frac{c_i(\vec{x})}{\varepsilon} \right)^2 - 3 \left(\frac{c_i(\vec{x})}{\varepsilon} \right) + 3 \right] \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) > \varepsilon \end{aligned}$$

Οι σχέσεις 5.43 είναι πλεονεκτικές όταν χρησιμοποιούνται σε συνδυασμό με μεθόδους βελτιστοποίησης δεύτερης τάξης. Παράλληλα, όμως, αυξάνει ο βαθμός μη-γραμμικότητας της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης.

5.4 Η Επαυξημένη Μέθοδος με Πολλαπλασιαστές Lagrange

Μέχρι τώρα παρουσιάστηκαν οι πιο κλασικές μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς, χρησιμοποιώντας σειριακά (δηλαδή, αρκετές φορές)



Σχήμα 5.8: Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w'_p)$ του προβλήματος 5.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w'_p ($w_p = 0.5, 0.1, 0.01$) και τις αντίστοιχες τιμές του ε ($\varepsilon = -0.106, -0.047, -0.0047$).

μια μέθοδο επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (τεχνικές SUMT). Μέθοδοι SUMT με συναρτήσεις εξωτερικής, εσωτερικής ή διευρυμένης εσωτερικής ποινής χαρακτηρίζονται από εύκολο προγραμματισμό και είναι, γενικά, αρκετά αποδοτικές. Παρόλα αυτά, θα εξασφαλιζόνταν μεγαλύτερη αξιοπιστία και απόδοση, αν οι παράμετροι-συνθήκες βέλτιστης λύσης συμμετείχαν και αυτές στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης. Με άλλα λόγια, θα ήταν επιθυμητό να παύσει να εξαρτάται τόσο πολύ η διαδικασία βελτιστοποίησης από την επιλογή βοηθητικών παραμέτρων (λ.χ. των συντελεστών ποινής).

Αυτό ακριβώς επιτυγχάνουν οι λεγόμενες επαυξημένες μέθοδοι με χρήση πολλαπλασιαστών Lagrange (Augmented Lagrange Multiplier Methods, συντομογραφικά μέθοδοι ALM). Θα παρουσιασθούν χωριστά για περιορισμούς ισότητας και ανισότητας και θα ακολουθήσει γενίκευση στο τέλος του κεφαλαίου αυτού.

5.4.1 Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ισότητας

Αναφερόμαστε αρχικά στην επίλυση του προβλήματος

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{s.t.} \quad c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \quad (5.44)$$

Εδώ, τα πρώτα σχόλια αφορούν τον αριθμό των περιορισμών ισότητας που επιβάλλονται. Ο αριθμός τους πρέπει να είναι μικρότερος του αριθμού N των ελεύθερων μεταβλητών. Είναι προφανές ότι, αν υπήρχαν ακριβώς N περιορισμοί ισότητας, θα αρκούσε η επίλυση του συστήματος των N (γενικά, μη-γραμμικών) εξισώσεων (των περιορισμών) ώστε να υπολογισθούν οι τιμές των ελεύθερων παραμέτρων του προβλήματος. Σε μια τέτοια

περίπτωση, η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης θα καθορίζονταν εκ των υστέρων, χρησιμοποιώντας τις λύσεις του προαναφερθέντος συστήματος. Στην περίπτωση που υπήρχαν περισσότεροι από N περιορισμοί ισότητας, η λύση του συστήματος θα ήταν απλά αδύνατη.

Για να θεμελιωθεί η μέθοδος ALM για το πρόβλημα 5.44, αφετηρία αποτελούν οι αναγκαίες συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker. Έχουμε ήδη δείξει ότι η βέλτιστη λύση \vec{x}^* αποτελεί στάσιμο σημείο της συνάρτησης Lagrange

$$L(\vec{x}, \vec{\lambda}) = F(\vec{x}) - \sum_{i \in E} \lambda_i c_i(\vec{x}) \quad (5.45)$$

ενώ συγχρόνως οφείλουν να ικανοποιούν τους περιορισμούς ισότητας του προβλήματος.

Με δεδομένα παραπάνω, μπορεί λ.χ. να εφαρμοσθεί η μέθοδος της συνάρτησης εξωτερικής ποινής, δημιουργώντας την ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in E} (-\lambda_i c_i(\vec{x}) + w_p [c_i(\vec{x})]^2) \quad (5.46)$$

που θα ονομάζεται επαυξημένη συνάρτηση Lagrange.

Η γραφή της σχέσης 5.46 θα μπορούσε να παραπέμπει απευθείας στη γνωστή μέθοδο της συνάρτησης εξωτερικής ποινής, αλλά δεν είναι υποχρεωτικά έτσι. Μόνο αν $\lambda_i = 0$ για κάθε $i \in E$ θα κατέληγε στην εφαρμογή της μεθόδου της εξωτερικής ποινής και θα προσέγγιζε τη βέλτιστη λύση αρχίζοντας με μικρή τιμή του w_p και αυξάνοντάς την από κύκλο σε κύκλο. Υπενθυμίζεται ότι στην περίπτωση αυτή, η λύση προσεγγίζεται από την περιοχή των μη-αποδεκτών λύσεων και οι περιορισμοί ισότητας ικανοποιούνται οριακά όταν $w_p \rightarrow \infty$.

Στο αντίθετο ακριβώς άκρο θα μπορούσε κάποιος να υποθέσει ότι είναι διαθέσιμες οι βέλτιστες τιμές $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}^*$. Τότε, η ελαχιστοποίηση της $\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}^*, w_p)$ για μια θετική αλλά πεπερασμένη τιμή του w_p που θα επιλεγεί, οδηγεί στο αληθινό ελάχιστο της $F(\vec{x})$ με ένα μόνο κύκλο βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Δηλαδή, είναι η περίπτωση που η μέθοδος ALM μπορεί να βρεί τη βέλτιστη λύση με έναν μόνο κύκλο με πλήρη ικανοποίηση περιορισμών, κάτι που δεν είναι δυνατό με τη μέθοδο της εξωτερικής ποινής.

Πρακτικά, βέβαια, είναι αδύνατο να γνωρίζουμε τις τιμές του διανύσματος $\vec{\lambda}^*$, άρα πρέπει να υιοθετηθεί ένα επαναληπτικό σχήμα που, ξεκινώντας από τυχαίες τιμές λ_i ($\lambda_i = 0$ είναι μια συνηθισμένη επιλογή), να προσεγγίζεται η λύση ανανεώνοντας τις τιμές των λ_i σε κάθε κύκλο. Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να ενσωματώσουμε τα λ_i στους βαθμούς ελευθερίας αλλά έτσι θα αύξανε σημαντικά ο αριθμός των αγνώστων του προβλήματος.

Ο αλγόριθμος ALM για προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς ισότητας παίρνει γενικά την παρακάτω μορφή:

Βήμα 1: Επιλέγεται αρχική τιμή του διανύσματος των ελεύθερων μεταβλητών \vec{x}^0 , αρχική τιμή του διανύσματος των πολλαπλασιαστών λ_i^0 (ενδεχομένως, μηδενική) και αρχική μικρή τιμή του συντελεστή ποινής w_p . Συγχρόνως επιλέγεται τιμή

του πολλαπλασιαστή (έστω γ) με τον οποίο θα πολλαπλασιάζεται η τιμή του w_p σε κάθε νέο κύκλο και ανώτατη επιτρεπόμενη τιμή του w_p^{max} .

Βήμα 2: Ελαχιστοποιείται η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}_i, w_p)$, σχέση 5.46, λύνοντας ένα πρόβλημα χωρίς περιορισμούς με οποιαδήποτε σχετική μέθοδο.

Βήμα 3: Ελέγχεται η σύγκλιση της μεθόδου. Τυπικό κριτήριο είναι η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$ να μεταβάλλεται πολύ λίγο σε σχέση με την τιμή της στον προηγούμενο κύκλο και συγχρόνως να ικανοποιούνται οι περιορισμοί ισότητας, έστω με στην ανοχή που ορίζει ο χρήστης. Αν δεν έχει συγκλίνει η μέθοδος, εκτελείται το επόμενο βήμα.

Βήμα 4: Ανανεώνονται οι τιμές των πολλαπλασιαστών Lagrange χρησιμοποιώντας τη σχέση

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p c_i(\vec{x}), \quad i \in E \quad (5.47)$$

Η σχέση αυτή δίνεται χωρίς απόδειξη και βασίζεται σε θεωρητικές παραδοχές. Στη συνέχεια, ανανεώνεται και η τιμή του συντελεστή ποινής από τη σχέση

$$w_p \leftarrow \min(\gamma w_p, w_p^{max}) \quad (5.48)$$

Βήμα 5: Επιστροφή στο Βήμα 2.

Για την καλύτερη κατανόηση της μεθόδου, αυτή εφαρμόζεται σε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας αναλυτικής συνάρτησης με έναν περιορισμό ισότητας. Το πρόβλημα διατυπώνεται στη μορφή

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 \quad (5.49)$$

$$\models c_1(\vec{x}) = x_1 + x_2 - 1 = 0 \quad (5.50)$$

Ο περιορισμός 5.50 συγκεκριμενοποιεί το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως την ευθεία που διέρχεται από τα σημεία $(1, 0)$ και $(0, 1)$ ενώ η βέλτιστη λύση είναι η $\vec{x}^* = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, με $F(\vec{x}^*) = \frac{1}{2}$. Γραφική παράσταση του προβλήματος δίνεται στο σχήμα 5.9.

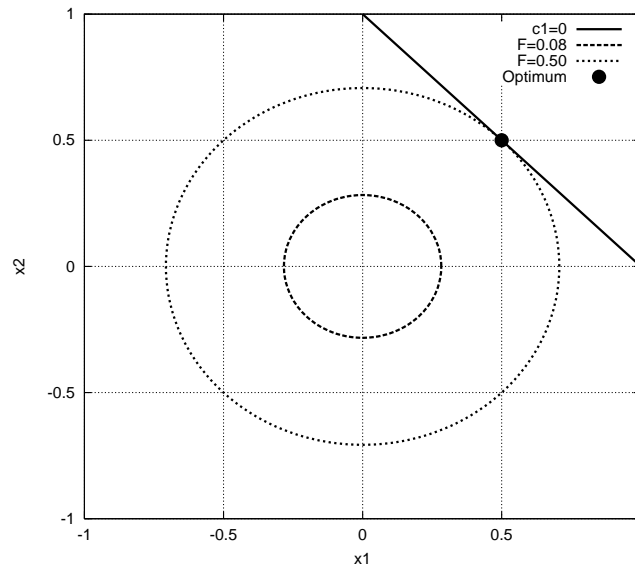
Η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange, της οποίας αναζητούμε τα στάσιμα σημεία, γράφεται

$$\Phi^*(x_1, x_2, \lambda_1, w_p) = x_1^2 + x_2^2 - \lambda_1(x_1 + x_2 - 1) + w_p(x_1 + x_2 - 1)^2 \quad (5.51)$$

και, επιβάλλοντας το μηδενισμό της κλίσης της ως προς τα x_1 και x_2 , διατυπώνεται το σύστημα

$$2x_1 - \lambda_1 + 2w_p(x_1 + x_2 - 1) = 0 \quad (5.52)$$

$$2x_2 - \lambda_1 + 2w_p(x_1 + x_2 - 1) = 0$$



Σχήμα 5.9: Η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί του προβλήματος 5.49 και 5.50. Η βέλτιστη λύση είναι η $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, η περιοχή των αποδεκτών λύσεων είναι η σχεδιαζόμενη ευθεία. Επιπλέον, οι σχεδιαζόμενοι κύκλοι παριστάνουν ισοϋψείς της αντικειμενικής συνάρτησης F .

Στο σημείο αυτό, ο αναγνώστης είναι βέβαιο ότι αντιλαμβάνεται ότι επιλέχθηκε ένα πρόβλημα για το οποίο το επιμέρους πρόβλημα βελτιστοποίησης λύνεται αναλυτικά. Σε οποιαδήποτε άλλη περίπτωση, το βήμα 2 του τελευταίου αλγορίθμου θα απαιτούσε κάποια αριθμητική μέθοδο ελαχιστοποίησης της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης. Εδώ, λοιπόν, αρκεί η αναλυτική λύση της 5.52, από την οποία προκύπτει

$$x_1 = x_2 = \frac{2w_p + \lambda_1}{2 + 4w_p} \quad (5.53)$$

Από τη σχέση 5.53, γνωρίζοντας (κάτι που ασφαλώς δεν γενικεύεται) τη βέλτιστη λύση $(x_1, x_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, υπολογίζεται η αντίστοιχη βέλτιστη τιμή του πολλαπλασιαστή λ_1 , η $\lambda_1^* = 1$. Είναι σημαντικό να γίνει κατανοητό το γιατί η λύση της εξίσωσης

$$\frac{1}{2} = \frac{2w_p + \lambda_1}{2 + 4w_p}$$

δεν εξαρτάται από το w_p (αφού ικανοποιείται ο περιορισμός ισότητας).

Για λόγους κατανόησης της μεθόδου ALM, προχωρούμε στην επίλυση εκτελώντας τους 4 πρώτους κύκλους. Θα υιοθετήσουμε τη σταθερή τιμή $w_p = 1$, σε κάθε κύκλο. Δηλαδή, δεν θα χρησιμοποιηθεί η σχέση 5.48 ανανέωσης της τιμής του w_p ή, αλλιώς, έστω ότι $\gamma = 1$.

Πρώτος Κύκλος: Επιλέγεται, ως αρχικοποίηση, η τιμή $\lambda_1 = 0$, από την οποία

υπολογίζονται οι τρέχουσες λύσεις

$$x_1 = x_2 = \frac{2+0}{2+4} = \frac{1}{3}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} = 0.22222$$

Ο περιορισμός δεν ικανοποιείται και είναι

$$c_1\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} - 1 = -\frac{1}{3}$$

Επομένως, η ανανέωση (σχέση 5.47) της τιμής του λ_1 δίνει

$$\lambda_1 = 0 - 2\left(-\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3}$$

Δεύτερος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{2}{3}$ υπολογίζονται νέες λύσεις, οι

$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{2}{3}}{2 + 4} = \frac{4}{9}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{4}{9}\right)^2 + \left(\frac{4}{9}\right)^2 = \frac{32}{81} = 0.39506$$

Η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{4}{9}, \frac{4}{9}\right) = \frac{4}{9} + \frac{4}{9} - 1 = -\frac{1}{9}$$

και η νέα τιμή του λ_1 είναι

$$\lambda_1 = \frac{2}{3} - 2\left(-\frac{1}{9}\right) = \frac{8}{9}$$

Τρίτος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{8}{9}$ υπολογίζονται νέες λύσεις, οι

$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{8}{9}}{2 + 4} = \frac{13}{27}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{13}{27}\right)^2 + \left(\frac{13}{27}\right)^2 = \frac{338}{729} = 0.46365$$

και η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{13}{27}, \frac{13}{27}\right) = \frac{13}{27} + \frac{13}{27} - 1 = -\frac{1}{27}$$

Η νέα τιμή του λ_1 είναι

$$\lambda_1 = \frac{8}{9} - 2\left(-\frac{1}{27}\right) = \frac{26}{27}$$

Τέταρτος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{26}{27}$ υπολογίζονται νέες λύσεις (τις οποίες θα δεχθούμε ως τελικές, αν αποφασισθεί η διακοπή της σειριακής εκτέλεσης στο σημείο αυτό)

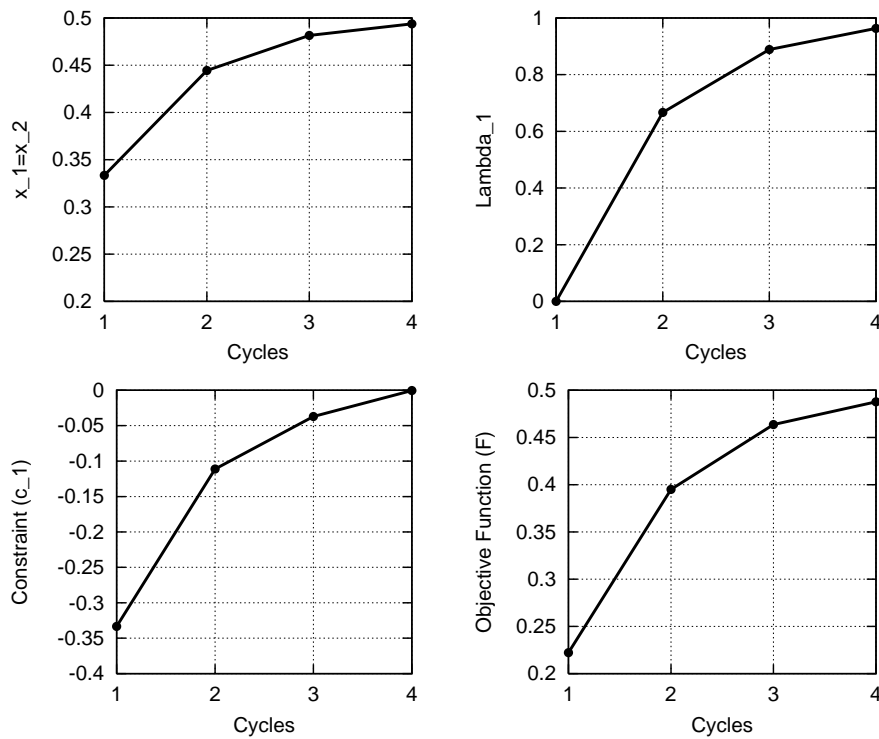
$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{26}{27}}{2 + 4} = \frac{40}{81}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{40}{81}\right)^2 + \left(\frac{40}{81}\right)^2 = \frac{3200}{6561} = 0.48773$$

και η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{40}{81}, \frac{40}{81}\right) = \frac{40}{81} + \frac{40}{81} - 1 = -\frac{1}{81}$$



Σχήμα 5.10: Γραφική αναπαράσταση της εξέλιξης της λύσης και των σχετικών ποσοτήτων στο πρόβλημα 5.49 και 5.50. Πάνω-αριστερά: εξέλιξη των λύσεων $x_1 = x_2$. Πάνω-δεξιά: εξέλιξη του πολλαπλασιαστή Lagrange λ_1 . Κάτω-αριστερά: εξέλιξη της τιμής της συνάρτησης περιορισμού c_1 . Κάτω-δεξιά: εξέλιξη της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης F .

Τα παραπάνω παρουσιάζονται συνολικά και γραφικά στο σχήμα 5.10. Παρατηρήστε ότι το ελάχιστο προσεγγίζεται κινούμενοι στη διχοτόμο του πρώτου τεταρτημόριου από την περιοχή αρνητικών τιμών της συνάρτησης περιορισμού c_1 . Το αν θα προσεγγισθεί

η βέλτιστη λύση από την περιοχή θετικών ή αρνητικών τιμών της συνάρτησης περιορισμού δεν έχει ιδιαίτερη σημασία εφόσον πρόκειται για πρόβλημα με περιορισμό ισότητας. Θα έχει όμως σημασία στη συνέχεια που θα ασχοληθούμε με την περίπτωση των περιορισμών ανισότητας, γιατί αυτό θα καθορίζει αν η προσέγγιση της λύσης γίνεται από την περιοχή των αποδεκτών ή των μη-αποδεκτών λύσεων.

Ο αναγνώστης μπορεί να δοκιμάσει άλλη αρχική τιμή του λ_1 (θετική ή αρνητική, είναι ενδιαφέρον να παρακολουθήσει τη διαφορά στον τρόπο σύγκλισης) αλλά και να ενεργοποιηθεί η σχέση 5.48 ανανέωσης του w_p , λ.χ. με $\gamma = 3$.

Ο αναγνώστης μπορεί ακόμα να παρατηρήσει ότι αν ξεκινούσε από τη 'σωστή' τιμή του λ_1 ($\lambda_1^* = 1$) θα έλυσε, μια φορά μόνο, ένα πρόβλημα χωρίς περιορισμό. Γιατί, με την τιμή $\lambda_1 = 1$ υπολογίζονται οι λύσεις

$$x_1 = x_2 = \frac{2w_p + 1}{2 + 4w_p} = \frac{1}{2}$$

5.4.2 Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ανισότητας

Όταν υπάρχουν μόνο περιορισμοί ανισότητας, δηλαδή το πρόβλημα που πρέπει να επιλυθεί είναι το

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{s.t.} \quad c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \quad (5.54)$$

πρώτη κίνηση είναι να μετατραπεί το πρόβλημα 5.54 σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς ισότητας. Αυτό πραγματοποιείται εισάγοντας επιπλέον μεταβλητές (μια για κάθε περιορισμό ανισότητας) και, αντί της $c_i(\vec{x}) \leq 0$, γράφουμε

$$c_i(\vec{x}) + z_i^2 = 0, \quad i \in I \quad (5.55)$$

Το τετράγωνο στη νέα μεταβλητή z_i δικαιολογείται από το ότι η ποσότητα που προσθέτουμε πρέπει να είναι θετική.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange γράφεται

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, \vec{z}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i [c_i(\vec{x}) + z_i^2] + w_p [c_i(\vec{x}) + z_i^2]^2) \quad (5.56)$$

Το κόστος για να διατυπωθεί η $\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, \vec{z}, w_p)$ είναι ότι εισάγονται επιπλέον ψευδο-μεταβλητές (τα z_i).

Εναλλακτικά διατυπωμένη, η έκφραση 5.56 γράφεται

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i \psi_i + w_p \psi_i^2) \quad (5.57)$$

όπου

$$\psi_i = \max \left[c_i(\vec{x}), \frac{\lambda_i}{2w_p} \right] \quad (5.58)$$

Η σχέση 5.57 χρησιμοποιείται ως ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση όπως ακριβώς γίνεται και με τους περιορισμούς ισότητας. Παρατηρούμε ότι αυτή έχει συνεχείς πρώτες παραγώγους ως προς \vec{x} αλλά ασυνεχείς δεύτερες παραγώγους στο $c_i = \frac{\lambda_i}{2w_p}$. Επομένως, απαιτείται προσοχή όταν χρησιμοποιείται μέθοδος βελτιστοποίησης δεύτερης τάξης.

Αφού ήδη μετατράπηκε το πρόβλημα με περιορισμούς ανισότητας σε ένα αντίστοιχο πρόβλημα με περιορισμούς ισότητας, θα χρησιμοποιηθούν οι τρόποι επίλυσης που ήδη παρουσιάστηκαν, λ.χ. η τεχνική ALM της οποίας δόθηκε ο βασικός αλγόριθμος.

Προσοχή απαιτείται κατά την ανανέωση τιμών των πολλαπλασιαστών Lagrange όπου, αντί της σχέσης 5.47, θα χρησιμοποιείται η

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p \psi_i(\vec{x}), \quad i \in I \quad (5.59)$$

5.4.3 Γενίκευση της Μεθόδου ALM

Ολοκληρώνοντας το κεφάλαιο αυτό θα γενικεύσουμε την επαυξημένη μέθοδο με χρήση πολλαπλασιαστών Lagrange (ALM) για την περίπτωση που υπάρχουν περιορισμοί ισότητας και ανισότητας. Στο γενικό, λοιπόν, πρόβλημα

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{f} \quad c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E, \quad c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \quad (5.60)$$

διατυπώνεται η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange στη μορφή

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in E} (-\lambda_i c_i(\vec{x}) + w_p c_i^2(\vec{x})) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i \psi_i + w_p \psi_i^2) \quad (5.61)$$

σε συνδυασμό με την εξίσωση 5.58 για τον υπολογισμό των ψ_i .

Οι σχέσεις ανανέωσης της τιμής των πολλαπλασιαστών Lagrange είναι, πλέον, οι

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p c_i(\vec{x}), \quad i \in E \quad (5.62)$$

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p \max[c_i(\vec{x}), \frac{\lambda_i}{2w_p}], \quad i \in I \quad (5.63)$$

Είναι περιττό να δοθεί νέος αλγόριθμος επίλυσης. Ισχύει αυτός που δόθηκε για την περίπτωση μόνο των περιορισμών ισότητας με τις νέες σχέσεις 5.62 και 5.63.

Ολοκληρώνοντας, αναφέρονται συγκεντρωμένα τα πλεονεκτήματα της μεθόδου ALM:

- Η μέθοδος ALM είναι αρκετά ανεξάρτητη της τιμής του w_p και δεν απαιτείται η προσεκτική αύξηση της τιμής του w_p από κύκλο σε κύκλο, με το w_p να τείνει θεωρητικά στο άπειρο.
- Παρέχει τη δυνατότητα να εντοπίζονται λύσεις που ικανοποιούν ακριβώς τους περιορισμούς. Η βέλτιστη λύση που εντοπίζεται δίνει $c_i(\vec{x}) = 0$, $i \in E$ και ενδεχομένως $c_i(\vec{x}) = 0$, $i \in I$ (αν πράγματι ισχύει αυτό).

- Μπορεί να εξασφαλισθεί επιτάχυνση της σύγκλισης ανανεώνοντας τις τιμές των πολλαπλασιαστών Lagrange.
- Το σημείο εκκίνησης είναι δυνατό να βρίσκεται στην περιοχή των αποδεκτών ή των μη-αποδεκτών λύσεων.
- Φτάνοντας στη βέλτιστη λύση, η τιμή του πολλαπλασιαστή λ_i , $i \in I$, όταν $\lambda_i \neq 0$, υποδεικνύει άμεσα τους ενεργούς περιορισμούς ανισότητας.

Κεφάλαιο 6

Άλλες Μέθοδοι Βελτιστοποίησης

Μέχρι τώρα παρουσιάστηκαν αρκετές ‘παραδοσιακές’ μέθοδοι βελτιστοποίησης. Όλες είχαν ένα κοινό χαρακτηριστικό, το ότι η ανίχνευση της βέλτιστης λύσης ξεκινούσε από μια αρχική λύση που (με οποιοδήποτε τρόπο) επέλεγε ο χρήστης και, στη συνέχεια, συνεχίζονταν υπολογίζοντας και χρησιμοποιώντας πληροφορίες για την πρώτη ή δεύτερη παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις ελεύθερες μεταβλητές. Η λογική της απότομης καθόδου μπορεί να θεωρηθεί ως ο αντιπροσωπευτικότερος (αλλά όχι ο ταχύτερος) τρόπος βελτίωσης της λύσης, ανάμεσα στα διαδοχικά εκτελούμενα βήματα. Κατά τα βήματα αυτά, η λύση βελτιώνεται συνεχώς, κάνοντας χρήση των καθαρά αιτιοκρατικών (deterministic) διαδικασιών–κριτηρίων που προαναφέραμε. Για το λόγο αυτό, οι μέθοδοι που μέχρι τώρα παρουσιάστηκαν ονομάζονται ‘αιτιοκρατικές’ (deterministic methods). Τέλος, ας συγκρατήσουμε ακόμα ένα χαρακτηριστικό αυτών των μεθόδων, το ότι βασίζονται σε μια λύση ανά επανάληψη, δηλαδή ο αλγόριθμος παρακολουθεί και βελτιώνει μια λύση, από επανάληψη σε επανάληψη. Ο τρόπος αυτός ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης ενέχει τον κίνδυνο εγκλωβισμού της λύσης σε κάποιο τοπικό, αντί του καθολικού βέλτιστου. Είναι αυτονόητο ότι, κατά μεγάλο βαθμό, το αν θα εγκλωβιστεί ή όχι η λύση σε τοπικό ακρότατο, εξαρτάται από την αρχική λύση.

Έχοντας υπόψη τα παραπάνω, ευνόητη ήταν η προσπάθεια να αναπτυχθούν εναλλακτικές μέθοδοι βελτιστοποίησης, με κύριο χαρακτηριστικό τη δυνατότητα να αποφεύγεται παγίδευση σε τοπικά ακρότατα. Υπάρχουν πολλοί τρόποι να κατηγοριοποιηθούν αυτές οι ‘άλλες μέθοδοι βελτιστοποίησης’, ανάλογα με το που επιθυμούμε να δοθεί έμφαση. Στη συνέχεια, θα αναφέρουμε τις δύο βασικές δράσεις που μπορούν να αναληφθούν σε αυτή την κατεύθυνση, άρα θα δοθεί μια πρώτη κατηγοριοποίηση των μεθόδων αυτών:

- Μια πρώτη αντιμετώπιση ‘αποκλειστικά’ του προβλήματος θα ήταν να εγκαταλειφθούν (εν μέρει ή στο σύνολό τους) τα αιτιοκρατικά κριτήρια βελτίωσης της τρέχουσας λύσεις. Ταυτόχρονα με αυτά, μπορούν να χρησιμοποιηθούν και στοχαστικά κριτήρια, δηλαδή να υπεισέλθει τυχαιότητα στη μέθοδο που χρησιμοποιούμε. Η με οποιοδήποτε τρόπο εισαγωγή και χρήση τυχαιότητας σε έναν αλγόριθμο ανίχνευσης βέλτιστων λύσεων αρκεί για να τον κατατάξει στους λεγόμενους **στοχαστικούς αλγόριθμους βελτιστοποίησης** (stochastic optimization algorithms). Η στοχαστικότητα κατά την ανίχνευση του χάρου των λύσεων

είναι η βασική διαδικασία που αποτρέπει την παγίδευση σε τοπικά ακρότατα και δίνει ευκαιρίες ανίχνευσης και άλλων υποπεριοχών του πεδίου ορισμού για την εύρεση της καθολικά βέλτιστης λύσης. Ευνόητο και αναμενόμενο είναι, όμως, και το επιπλέον κόστος αυτού του πλεονεκτήματος: η δυνατότητα καλύτερης ανίχνευσης του πεδίου των λύσεων στοιχίζει περισσότερο σε χρόνο υπολογιστή.

- Μια άλλη αντιμετώπιση του προβλήματος θα ήταν να εγκαταλειφθεί η αρχή του ότι (από επανάληψη σε επανάληψη) ο αλγόριθμος παρακολουθεί και βελτιώνει μια μόνο λύση. Αντί αυτού, προτείνονται σχήματα στα οποία ο αλγόριθμος διαχειρίζεται πολλές λύσεις ανά επανάληψη. Ο πλουραλισμός αυτός αυξάνει μεν το υπολογιστικό κόστος του αλγόριθμου βελτιστοποίησης αλλά παρέχει μεγαλύτερη σιγουριά ότι η λύση που τελικά θα βρεθεί θα είναι και το καθολικό ελάχιστο. Μέθοδοι που διαχειρίζονται πολλές λύσεις κάθε φορά, (ή, κατά κάποια έννοια, έναν πληθυσμό λύσεων ονομάζονται **μέθοδοι βελτιστοποίησης βασισμένες σε πληθυσμούς λύσεων**, population-based optimization methods). Ακριβώς με το ίδιο σκεπτικό, οι μέθοδοι που μέχρι τώρα μας απασχόλησαν θα ονομάζονται **μέθοδοι βελτιστοποίησης βασισμένες σε μεμονωμένα άτομα** (single-individual-based optimization methods). Στη νέα κατηγορία μεθόδων που εδώ προτείνεται, επειδή οι μέθοδοι παρακολουθούν την εξέλιξη πληθυσμών λύσεων και επειδή συνήθως (όπως θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο) εφαρμόζονται τελεστές που θυμίζουν τη βιολογική εξέλιξη των πληθυσμών, ανήκουν και οι λεγόμενοι **εξελικτικοί αλγόριθμοι** (evolutionary algorithms).

Προηγουμένως αναφέρθηκαν δύο συγκεκριμένες διαδικασίες αντιμετώπισης του προβλήματος παγίδευσης σε τοπικά ακρότατα. Είναι λογικό οι δύο παραπάνω τρόποι να μπορούν να συνδυασθούν μεταξύ τους, επομένως δημιουργείται μια κατηγορία στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης βασισμένων σε πληθυσμούς λύσεων. Πολλές φορές, με σκοπό την απεμπλοκή από από τις προηγούμενες κατηγοριοποιήσεις, συνήθίζεται να χρησιμοποιείται ο όρος **μη-αιτιοκρατική μέθοδος** (non-deterministic method) για οποιαδήποτε μέθοδο χρησιμοποιεί στοχαστικότητα.

6.1 Σύνδεση με τα Προηγούμενα—Νέες Διατυπώσεις

Εδώ επιχειρείται μια σύνδεση, όχι τόσο με τις συγκεκριμένες αιτιοκρατικές μεθόδους βελτιστοποίησης που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, όσο κυρίως με τις γενικές αρχές αυτών των αλγορίθμων. Για παράδειγμα, μέθοδοι όπως η ανίχνευση κατά γραμμή ή η ανίχνευση κατά περιοχές εμπιστοσύνης συνδύαζαν την έννοια της γειτονιάς της τρέχουσας λύσης και υποδείξεις για την κατεύθυνση της μέγιστης μεταβολής (από την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης $F()$) και προσπαθούσαν να βελτιώσουν την τρέχουσα λύση. Εδώ, θα απεμπλακούμε προσωρινά από τον τρόπο που ένας αλγόριθμος εντοπίζει την επόμενη λύση προς αξιολόγηση και, θα προσπαθήσουμε να εντάξουμε όλες τις αιτιοκρατικές μεθόδους που παρουσιάσαμε σε γενικότερα αλγοριθμικά σχήματα. Κατά τη μελέτη όσων ακολουθούν, ας εστιάσουμε στην αρχή κάθε μεθόδου

και όχι αναγκαστικά στις τεχνικές λεπτομέρειες. Οποιοσδήποτε αλγόριθμος ακολουθεί, μέχρι την εισαγωγή στοχαστικότητας σε αυτή, δεν είναι νέος αλγόριθμος, αλλά επαναδιατύπωση ήδη γνωστών αλγορίθμων.

Αν θεωρήσουμε ότι η βελτιστοποίηση λαμβάνει τη μορφή προβλήματος **μεγιστοποίησης** της αντικειμενικής συνάρτησης, θα δώσουμε στον αλγόριθμο που ακολουθεί το γενικό τίτλο **μέθοδος αναρρίχησης λόφου** (hill-climbing method). Το ότι αναφερόμαστε σε μεγιστοποίηση δεν είναι περιοριστικό. Μπορούμε εύκολα να τροποποιήσουμε τον αλγόριθμο σε ένα σχήμα κατάβασης λόφου και, με αυτό, να λύσουμε προβλήματα ελαχιστοποίησης. Είναι όμως βασικό να έχουμε υπόψη μας ότι ο αλγόριθμος που ακολουθεί είναι μια **τοπική** μέθοδος ανίχνευσης (local search method).

Ο απλούστερος και γενικότερος **αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου με τοπική ανίχνευση** έχει τη μορφή:

Βήμα 1: Αρχικοποιείται ο μετρητής κύκλων $n = 0$ και επιλέγεται τυχαία η αρχική λύση \vec{x}^n στο χώρο αναζήτησης λύσεων Ω . Υπολογίζεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο \vec{x}^n .

Βήμα 2: Εντοπίζονται όλες οι λύσεις στη γειτονιά της τρέχουσας λύσης \vec{x}^n , για καθεμιά από αυτές υπολογίζεται η αντίστοιχη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και εντοπίζεται η καλύτερη (αυτή, δηλαδή, με τη μεγαλύτερη τιμή της F) από αυτές, έστω η $\vec{x}^\#$.

Βήμα 3: Αν η $\vec{x}^\#$ υπερτερεί της \vec{x}^n , τότε $\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}^\#$, είναι $n \leftarrow n + 1$ και ο αλγόριθμος συνεχίζει από το βήμα 2.

Βήμα 4: Ο αλγόριθμος τερματίζει με βέλτιστη λύση τη \vec{x}^n .

Θέματα όπως είναι ο καθορισμός της γειτονιάς $\Gamma(\vec{x}^n)$ της τρέχουσας λύσης \vec{x}^n , ή το τι σημαίνει ‘όλες’ οι λύσεις στη γειτονιά ενός σημείου αφήνονται σκόπιμα χωρίς περισσότερες διευκρινήσεις. Έτσι κι αλλιώς, ο παραπάνω αλγόριθμος αφήνει μεγάλα περιθώρια αυτοσχεδιασμού. Το μέγεθος της γειτονιάς Γ μπορεί να είναι σταθερό ή επανακαθοριζόμενο κατά τη διάρκεια εκτέλεσης της μεθόδου. Στο κεφάλαιο για τις μεθόδους περιοχής εμπιστοσύνης γνωρίσαμε τέτοιες διαδικασίες. Στοιχεία τους μπορούν εύκολα να εισαχθούν στον παραπάνω αλγόριθμο (αυτό θεωρείται ‘τεχνική λεπτομέρεια’ και δεν θα μας απασχολήσει περαιτέρω). Αντίστοιχα, η εξέταση όλων των λύσεων σε μια γειτονιά, η οποία θεωρητικά είναι ανέφικτη, μπορεί να αντικατασταθεί από μια ‘πιό έξυπνη’ διαδικασία τοπικής ανίχνευσης (βλ. κεφάλαια ανίχνευσης κατά γραμμή και τις μεθόδους περιοχής εμπιστοσύνης), αλλά και αυτό δεν είναι ουσιώδες για όσα θα ακολουθήσουν.

Παρατηρούμε ότι η μοναδική διαδικασία με υπολογιστικό κόστος είναι η εύρεση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης για κάποια λύση \vec{x} και αυτό θα συμβολίζεται πλέον ως **αξιολόγηση**(\vec{x}). Αφού αναφερόμαστε σε προβλήματα μεγιστοποίησης, συγκρίσεις όπως αυτή του βήματος 3 θα συμβολίζονται πλέον ως $\vec{x}^\# > \vec{x}^n$. Για τον ίδιο λόγο, η καλύτερη λύση σε ένα σύνολο λύσεων Γ θα συμβολίζεται ως $\max_\Gamma(\vec{x})$. Την απόδοση τυχαίας τιμής, μέσω μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών, σε μια μεταβλητή,

λ.χ. τη x , θα τη συμβολίζουμε ως $x \leftarrow$ τυχαία επιλογή. Γενικά, η αναγραφή όρων στον αλγόριθμο με πλάγια στοιχεία υπονοεί συγκεκριμένη τέλεση, και σε γλώσσα προγραμματισμού θα μπορούσε να αντιστοιχεί σε διακριτό υποπρόγραμμα του σχετικού κώδικα. Το προς τα αριστερά κατευθυνόμενο βέλος σημαίνει απόδοση τιμής στην ποσότητα που αυτό δείχνει ενώ, κατά τα γνωστά από προηγούμενα κεφάλαια, \vec{x}^* συμβολίζει τη βέλτιστη λύση. Το προς τα δεξιά κατευθυνόμενο βέλος υποδεικνύει το επόμενο για εκτέλεση βήμα. Τέλος, άλλοι δείκτες (όπως λ.χ. στη γραφή $\vec{x}^\#$) συμβολίζουν ειδικές-προσωρινές λύσεις.

Έτσι, επαναμβάνουμε τον παραπάνω αλγόριθμο αναρρίχησης λόφου με το συντομογραφικό τρόπο που θα υιοθετηθεί σε ολόκληρο το κεφάλαιο αυτό:

Βήμα 1: $n \leftarrow 0$, $\vec{x}^n \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση \vec{x}^n .

Βήμα 2: $\Gamma \leftarrow$ γειτονιά (\vec{x}^n), αξιολόγηση ($\vec{x} : \forall \vec{x} \in \Gamma$), $\vec{x}^\# \leftarrow \max_{\Gamma}(\vec{x})$.

Βήμα 3: Αν $\vec{x}^\# > \vec{x}^n$ τότε: [$\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}^\#, n \leftarrow n + 1, \rightarrow$ βήμα 2].

Βήμα 4: $\vec{x}^* \leftarrow \vec{x}^n$.

Με την εισαγωγή ενός εξωτερικού βρόχου στον παραπάνω αλγόριθμο βελτιστοποίησης, ώστε να ξεκινά πολλές φορές από διαφορετικές λύσεις και να καταλήγει καταγράφοντας ως βέλτιστη την καλύτερη από τις 'βέλτιστες' λύσεις που προέκυπταν σε κάθε κύκλο, δημιουργείται ο επαναληπτικός αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου ή αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου με επανεκκίνηση (iterated hill climber), που περιγράφεται αμέσως παρακάτω:

Βήμα 1: $k \leftarrow 0$, $\vec{x}^* \leftarrow$ ακραία κακή επιλογή

Βήμα 2: $n \leftarrow 0$, $\vec{x}^n \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση (\vec{x}^n).

Βήμα 3: $\Gamma \leftarrow$ γειτονιά (\vec{x}^n), αξιολόγηση ($\vec{x} : \forall \vec{x} \in \Gamma$), $\vec{x}^\# \leftarrow \max_{\Gamma}(\vec{x})$.

Βήμα 4: Αν $\vec{x}^\# > \vec{x}^n$ τότε: [$\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}^\#, n \leftarrow n + 1, \rightarrow$ βήμα 3]

Βήμα 5: (αλλιώς) $\vec{x}^{*,k} \leftarrow \vec{x}^n$

Βήμα 6: Αν $\vec{x}^{*,k} > \vec{x}^*$, τότε: [$\vec{x}^* \leftarrow \vec{x}^{*,k}, k \leftarrow k + 1$]. \rightarrow βήμα 2

Εδώ, k είναι ο μετρητής του εξωτερικού βρόχου, δηλαδή των κύκλων. Ο εσωτερικός βρόχος (από το βήμα 2 ως και το βήμα 4 υπολογίζει ένα τοπικό ακρότατο, σε κάθε εκτέλεσή του. Στο βήμα 6 ενεργοποιείται και ένα κριτήριο σύγκλισης (βασισμένο στο μέγιστο αριθμό κύκλων ή το μέγιστο αριθμό των τελέσεων αξιολόγηση που έχει προκαθορίσει ο μηχανικός ή ακόμα και στο αν η βέλτιστη μέχρι του σημείου αυτού λύση παραμένει αμετάβλητη για κάποιο αριθμό κύκλων) που τερματίζει το συνολικό αλγόριθμο ή επιστρέφει στο βήμα 1. Με τον τελεστή ακραία κακή επιλογή προσδίδουμε στην τιμή καταλληλότητας του διανύσματος \vec{x}^* της αναζητούμενης βέλτιστης λύσης μια πολύ μικρή τιμή, στην αρχική φάση του αλγόριθμου μεγιστοποίησης.

Η εισαγωγή στοχαστικότητας στους παραπάνω αλγόριθμους μπορεί να πραγματοποιηθεί εύκολα. Ας σημειωθεί αρχικά ότι ο αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου με επανεκκίνηση που μόλις παρουσιάσαμε ήδη ενέχει στοιχεία στοχαστικότητας αφού κάθε εξωτερικός κύκλος ξεκινά με μιά νέα, τυχαία επιλεγμένη, αρχική λύση. Παρόλα αυτά, δύσκολα μπορεί να καταχθεί ο αλγόριθμος αυτός στους στοχαστικούς.

Έχοντας υπόψη το παραπάνω σχόλιο, στη συνέχεια θα τροποποιηθεί ο αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου (χωρίς επανεκκίνηση, θα σχολιασθεί αργότερα το γιατί) και θα αποκτήσει στοιχεία στοχαστικότητας κατά την επιλογή της βέλτιστης λύσης. Ο αλγόριθμος που ακολουθεί μπορεί να ονομασθεί **στοχαστικός αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου** (stochastic hill climber, πάλι για πρόβλημα μεγιστοποίησης).

Βήμα 1: $n \leftarrow 0$, $\vec{x}^n \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση(\vec{x}^n).

Βήμα 2: $\vec{x} \in \Gamma(\vec{x}^n) \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση(\vec{x}),
 $p \leftarrow \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{F(\vec{x}^n) - F(\vec{x})}{T}}} \right)$, $\tau \leftarrow$ τυχαίος[0, 1)

Βήμα 3: Αν $\tau < p$ τότε: [$\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}$]

Βήμα 4: $\vec{x}^* \leftarrow \max(\vec{x}^*, \vec{x})$, $n \leftarrow n + 1$, \rightarrow βήμα 2.

Η τέλεση τυχαίος[0, 1) εκφράζει την τυχαία επιλογή ενός πραγματικού αριθμού στο διάστημα [0, 1), μέσω μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών. Η ποσότητα p που ορίζεται στο βήμα 2 αποτελεί μια πιθανότητα της οποίας η τιμή εξαρτάται από την απόκλιση του βαθμού καταλληλότητας μεταξύ των δύο τελευταίων διαθέσιμων λύσεων \vec{x}^n και \vec{x} . Η ποσότητα T , στον παρονομαστή της σχέσης παραμένει σταθερή και ρυθμίζει τα επίπεδα τιμής της πιθανότητας p . Ο ρόλος της θα μπορούσε να είναι δευτερεύων, αντίθετα όμως αξίζει να προσέξουμε αυτήν την παράμετρο αφού θα αποτελέσει βασικό στοιχείο δόμησης της μεθόδου της προσομοιούμενης ανόπτησης που ακολουθεί.

Παρατηρούμε ότι ο στοχαστικός αλγόριθμος αναρρίχησης λόφου δεν χρειάζεται εξωτερικό βρόχο, δηλαδή επανεκκίνηση από νέα, τυχαία επιλεγμένη, αρχική τιμή. Εδώ, το ρόλο της επανεκκίνησης διαδραματίζει η δυνατότητα αποδοχής ως νέου επίκεντρου ανίχνευσης \vec{x}^n της νέας λύσης \vec{x} ακόμη κι αν η τελευταία δεν είναι καλύτερη της \vec{x}^n . Παρατηρούμε ακόμη ότι δεν ανιχνεύεται όλη η γειτονιά $\Gamma(\vec{x}^n)$ αλλά, στο βήμα 2 επιλέγεται τυχαία ένα στοιχείο της για αξιολόγηση και σύγκριση με το \vec{x}^n .

Βέβαια, το βασικότερο στοιχείο του παραπάνω αλγόριθμου είναι η επιλογή του βήματος 3. Έχοντας το παλιό επίκεντρο ανίχνευσης \vec{x}^n και την τυχαία επιλεγμένη γειτονική του λύση \vec{x} , υπάρχουν δύο περιπτώσεις στις οποίες το \vec{x} διαδέχεται το \vec{x}^n ως νέο επίκεντρο ανίχνευσης: (α) οποτεδήποτε το \vec{x} υπερτερεί του \vec{x}^n ή (β) με μια μικρή πιθανότητα, έστω και αν το \vec{x} υστερεί. Η πιθανότητα αυτή είναι ανάλογη της διαφοράς καταλληλότητας μεταξύ \vec{x}^n και \vec{x} , σε τρόπο ώστε η πιθανότητα αυτή να μειώνεται όσο χειρότερη είναι η λύση \vec{x} συγκριτικά με το \vec{x}^n .

Το να επιτρέπεται το νέο επίκεντρο \vec{x}^n να μην ταυτίζεται με τη μέχρι τώρα βέλτιστη λύση είναι μια 'έξυπνη' τεχνική ώστε η λύση να ξεφεύγει από τοπικά ακρότατα. Από την άλλη πλευρά, απαιτεί τη χρήση διακριτού διανύσματος για την αποθήκευση της

T	$e^{\frac{-15}{T}}$	p
1	3.059023×10^{-7}	≈ 1
10	0.2231	0.817
50	0.7418	0.574
100	0.8607	0.537
1000	0.9851	0.504
10^{10}	0.9999	0.500

Πίνακας 6.1: Η πιθανότητα p αποδοχής της νέας λύσης ως νέο επίκεντρο ανίχνευσης, πινακοποιημένη ως συνάρτηση ενδεικτικών τιμών της παραμέτρου T . Η νέα λύση θεωρείται ότι υπερτερεί κατά 15 μονάδες τιμής αντικειμενικής συνάρτησης από την τρέχουσα βέλτιστη λύση.

καλύτερης (σε κάθε κύκλο) λύσης (\vec{x}^* , βήμα 4), ώστε να είναι πάντοτε διαθέσιμη η βέλτιστη λύση.

Ας εξετάσουμε ποσοτικά τη σχέση

$$p = \frac{1}{1 + e^{\frac{F(\vec{x}^n) - F(\vec{x}^*)}{T}}} \quad (6.1)$$

με την οποία υπολογίζεται η πιθανότητα να γίνει δεκτή ως νέο επίκεντρο ανίχνευσης μια νέα λύση \vec{x} στη γειτονιά του τρέχοντος επίκεντρου \vec{x}^n . Η κατανόηση του τρόπου που λειτουργεί αυτή η σχέση είναι εύκολη με ένα αριθμητικό παράδειγμα όπου θα φανεί ο ρόλος της ρυθμιστικής παραμέτρου T . Έστω ότι το νέο σημείο \vec{x} υπερτερεί του \vec{x}^n κατά 15 μονάδες. Η σύγκριση γίνεται ως προς την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, είναι δηλαδή $F(\vec{x}) = F(\vec{x}^n) + 15$. Η σχέση 6.1 γράφεται

$$p = \frac{1}{1 + e^{\frac{-15}{T}}} \quad (6.2)$$

Για τη σχέση 6.2, πινακοποιούμε την τιμή της πιθανότητας p , για διάφορες τιμές της παραμέτρου T στον πίνακα 6.1. Για μικρές τιμές του T , η πιθανότητα να υιοθετηθεί η νέα λύση πλησιάζει το 100%. Επειδή η νέα λύση είναι καλύτερη της τρέχουσας βέλτιστης και η αποδοχή της είναι απόλυτη, ο αλγόριθμος με μικρές τιμές του T μοιάζει με την κλασική μέθοδο αναρρίχησης λόφου. Από την άλλη πλευρά, για μεγάλες τιμές του T , η πιθανότητα να γίνει αποδεκτή η νέα λύση είναι όση και η πιθανότητα να παραμείνουμε με την τρέχουσα βέλτιστη λύση (50%). Επομένως, η επιλογή της μιας ή της άλλης είναι τυχαία και η ανίχνευση καταλήγει να είναι μια τυχαία αναζήτηση. Άρα, ο ρόλος του T είναι να ρυθμίζει την αναλογία μεταξύ τυχαίας αναζήτησης και μεθόδου αναρρίχησης λόφου που θα υιοθετήσουμε. Επιλέγοντας μια 'ενδιάμεση' τιμή T , ουσιαστικά υιοθετούμε ένα σχήμα με ενδιάμεσα χαρακτηριστικά. Δύο είναι οι ερωτήσεις που εύλογα προκύπτουν (και που οδηγούν ουσιαστικά στη θεμελίωση της μεθόδου της προσομοιούμενης ανόπτησης). Αφορούν:

- Το θέμα της επιλογής τιμής του T , το αν θα επιλέγεται από το χρήστη ή αν θα υπολογίζεται αυτόματα από αναλυτική σχέση.

$F(\vec{x}^n) - F(\vec{x})$	$e^{\frac{F(\vec{x}^n) - F(\vec{x})}{10}}$	p
-30	0.0498	0.952
-10	0.3678	0.731
0	1.0000	0.500
10	2.7182	0.269
30	20.085	0.047

Πίνακας 6.2: Η πιθανότητα p αποδοχής της νέας λύσης ως νέο επίκεντρο ανίχνευσης, πινακοποιημένη ως συνάρτηση ενδεικτικών τιμών της διαφοράς τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Αρνητικές διαφορές σημαίνουν υπεροχή της νέας λύσης (πρόβλημα μεγιστοποίησης).

- Το θέμα του αν η τιμή του T παραμένει σταθερή αν αυτή μεταβάλλεται (και πως) κατά τη διάρκεια εκτέλεσης του αλγορίθμου.

Προηγουμένως, όμως, αξίζει να παρουσιάσουμε ένα δεύτερο πίνακα ο οποίος, για δεδομένη τιμή του T ($T = 10$) θα ερευνήσει ποσοτικά τη συμπεριφορά της πιθανότητας p για διάφορες τιμές, θετικές και αρνητικές, της διαφοράς $F(\vec{x}^n) - F(\vec{x})$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 6.2. Από τον πίνακα συμπεραίνουμε εύκολα ότι όσο περισσότερο υπερτερεί η νέα λύση \vec{x}^n (μεγαλύτερου μέτρου, αρνητική διαφορά) τόσο μεγαλύτερες είναι οι πιθανότητες αποδοχής της. Από την άλλη πλευρά, φαίνεται η έστω μικρή πιθανότητα να γίνει αποδεκτή η νέα λύση έστω και αν υστερεί της τρέχουσας βέλτιστης. Τέλος, το προφανές είναι ότι όταν $F(\vec{x}^n) = F(\vec{x})$ η πιθανότητα γίνεται 50%, αφού ισοβαθμούν οι δύο ισοδύναμες λύσεις.

6.2 Προσομοιούμενη Ανόπτηση(Simulated Annealing)

Τα όσα προηγήθηκαν στην προηγούμενη ενότητα προετοίμασαν το έδαφος για την εύκολη παρουσίαση της μεθόδου της προσομοιούμενης ανόπτησης, ως εργαλείο βελτιστοποίησης στα μαθηματικά αλλά και τη μηχανολογία. Η αεροδυναμική, ως ένας ειδικός κλάδος της μηχανολογίας, μπορεί και αυτή να επωφεληθεί από μια τέτοια μέθοδο βελτιστοποίησης. Παρόλα αυτά, μια βιβλιογραφική ανασκόπηση θα αποκάλυπτε εύκολα ότι για προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική θα συναντήσουμε μάλλον λίγες εργασίες που χρησιμοποιούν τη μέθοδο της προσομοιούμενης ανόπτησης. Όμως, αποφασίστηκε να συμπεριληφθεί στην ύλη του μαθήματος, όχι ως μια 'εξωτική' μέθοδος βελτιστοποίησης αλλά κυρίως για να πεισθεί, σιγά-σιγά, ο αναγνώστης ότι όλες οι στοχαστικές μέθοδοι βελτιστοποίησης (ανεξάρτητα με το όνομα που έλαβαν και την ορολογία που χρησιμοποιούν) βασίζονται σε αντίστοιχες αρχές. Περισσότερα σχετικά σχόλια θα ακολουθήσουν αργότερα.

Αρχικά, θα αναφερθούμε και θα δικαιολογήσουμε την ονομασία και ορολογία της μεθόδου. Η ανόπτηση, ως μορφή κατεργασίας, είναι γνωστή από τη μεταλλουργία. Πρόκειται για μια θερμική κατεργασία στην οποία υποβάλλεται ένα μεταλλικό αν-

τικείμενο ώστε να αποκτήσει ορισμένες ιδιότητες, όπως είναι η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας ή, συνήθως, η σκλήρυνσή του. Με την ανόπτηση, το μέταλλο προσεγγίζει την κατάσταση ισορροπίας του σε επίπεδο δομής ενώ μειώνονται (ελαχιστοποιούνται, ιδού η σύνδεση με την έννοια της βελτιστοποίησης) οι τάσεις στο εσωτερικό του. Η ανόπτηση εφαρμόζεται συνήθως σε ελατά μέταλλα και κράματα τα οποία έχουν υποστεί σκλήρυνση με ψυχρή κατεργασία, ώστε αυτά να επανέλθουν στην αρχική τους κατάσταση. Όσο διαρκεί η ανόπτηση, η συσσωρευμένη (ως μηχανικό έργο, λόγω της παραμόρφωσης) ενέργεια στο εσωτερικό του μετάλλου ελευθερώνεται και τα σωματίδια του μετάλλου φθάνουν σε μια κατάσταση χαμηλής ενέργειας.

Στη μεταλλουργία, η ανόπτηση (ισοθερμοκρασιακή ανόπτηση) ακολουθεί την επαναφορά του μετάλλου από την πολύ υψηλή θερμοκρασία T_{high} , σε χαμηλή θερμοκρασία T_{low} μετά λ.χ. τη βαφή του. Για την ανόπτηση, το μέταλλο επαναθερμαίνεται σε υψηλή θερμοκρασία T_{ann} , $T_{low} < T_{ann} < T_{high}$, εκεί παραμένει για το αναγκαίο χρονικό διάστημα ώστε να συντελεστεί μεταβολή της δομής του και, όταν η δομή του μετασχηματισθεί πλήρως, ψύχεται και επανέρχεται στη χαμηλή θερμοκρασία T_{low} . Εναλλακτικά, αντί της ψύξης σε T_{low} και της αναθέρμανσης σε T_{ann} , εφαρμόζεται και το παρακάτω σχήμα: από την T_{high} , το μέταλλο ψύχεται μόνο μέχρι την T_{ann} , εκεί παραμένει για το απαιτούμενο χρονικό διάστημα και στη συνέχεια ψύχεται στην τελική θερμοκρασία T_{low} .

Μετά από τις διευκρινήσεις σε θέματα ορολογίας και με αφετηρία τη μέθοδο της στοχαστικής αναρρίχησης λόφου που προηγουμένως αναφέραμε, μπορούμε να παρουσιάσουμε τη μέθοδο της προσομοιούμενης ανόπτησης. Βασική της διαφορά από τη στοχαστική αναρρίχηση λόφου είναι ότι η παράμετρος T μεταβάλλεται (ρυθμίζεται) αυτόματα κατά την εξέλιξη του αλγορίθμου. Πλέον, την παράμετρο T μπορούμε να αποκαλούμε και **θερμοκρασία**, σε ευθεία αναλογία με τη φυσική της ανόπτησης στις κατεργασίες μετάλλων.

Μια κλασική διατύπωση του αλγορίθμου της προσομοιούμενης ανόπτησης για προβλήματα βελτιστοποίησης είναι:

Βήμα 1: $n \leftarrow 0$, $T \leftarrow$ αρχικοποίηση, $\vec{x}^n \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση(\vec{x}^n).

Βήμα 2: $\vec{x} \in \Gamma(\vec{x}^n) \leftarrow$ τυχαία επιλογή, αξιολόγηση(\vec{x}),
 $p \leftarrow \frac{(e^{F(\vec{x}^n)} - F(\vec{x}))}{T}$, $\tau \leftarrow$ τυχαίος[0, 1)

Βήμα 3: Αν $\vec{x} > \vec{x}^n$ τότε: [$\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}$]
 Αλλιώς αν $\tau < p$ τότε: [$\vec{x}^n \leftarrow \vec{x}$]

Βήμα 4: $\vec{x}^* \leftarrow \max(\vec{x}^*, \vec{x})$, $n \leftarrow n + 1$

Βήμα 5: Αν Κριτήριο 1 τότε: [\rightarrow βήμα 2]
 Αλλιώς: [$T \leftarrow f(T, n)$]

Βήμα 6: Αν Κριτήριο 2 τότε: [\rightarrow βήμα 2]

Τα δύο κριτήρια τα οποία εμφανίζονται στον αλγόριθμο σχετίζονται με το πότε γίνεται ανανέωση της τιμής της θερμοκρασίας T (Κριτήριο 1) και με το πότε η μέθοδος

θεωρείται ότι έχει συγκλίνει ή έστω πρέπει να τερματισθεί γιατί ξεπέρασε το μέγιστο αριθμό αποτιμήσεων ή το μέγιστο υπολογιστικό κόστος που όρισε ο χρήστης (Κριτήριο 2).

Με βάση τα όσα πρέπει να έγιναν αντιληπτά από την περίπτωση που αναλύθηκε στον πίνακα 6.1, ο επανακαθορισμός νέας τιμής θερμοκρασίας T , στο βήμα 5, πρακτικά σημαίνει μείωση της τιμής της θερμοκρασίας. Η συνάρτηση $f(T, n)$, στην οποία δεν κρίνεται σκόπιμο να επεκταθούμε είναι μια συνάρτηση ψύξης. Στη βιβλιογραφία θα συναντήσουμε διάφορους τρόπους ψύξης, άρα διάφορες μορφές συνάρτησης $f(T, n)$. Γενικά, το πόσο μειώνεται η θερμοκρασία εξαρτάται από την προηγούμενη τιμή θερμοκρασίας και το πόσες αξιολογήσεις υποψηφίων λύσεων προηγήθηκαν (μετρητής n). Ας σημειωθεί ότι ο υπολογισμός αρχίζει με υψηλή τιμή T και ότι κάθε φορά που μεταβάλλεται η τιμή του T αυτή χρησιμοποιείται για έναν αριθμό κύκλων που ακολουθούν, πριν την επόμενη μεταβολή. Με βάση όσα έχουμε ήδη αναφέρει, η αρχικοποίηση με υψηλή θερμοκρασία και η διαδικασία της ψύξης στη μέθοδο της προσομοιούμενης απόπτωσης σημαίνει ότι στους πρώτους κύκλους διατηρούμε υψηλά επίπεδα στοχαστικότητας και, καθώς η μέθοδος συγκλίνει (και άρα προσεγγίζεται η βέλτιστη λύση) ο αλγόριθμος αποκτά κατά το πλείστο χαρακτηριστικά μεθόδου αναρρίχησης λόφου.

Η τελευταία παρατήρηση είναι πολύ σημαντική και χαρακτηρίζει τους περισσότερους (ίσως και όλους) στοχαστικούς αλγόριθμους αναζήτησης της βέλτιστης λύσης. Κάθε τέτοιος αλγόριθμος πρέπει να έχει (στη σωστή 'αναλογία') δύο ικανότητες:

Ικανότητα Εξερεύνησης (Exploration), ώστε να εξερευνά με τον καλύτερο, και συγχρόνως οικονομικότερο, τρόπο το χώρο των υποψηφίων λύσεων, χωρίς να εγκλωβίζεται εύκολα σε τοποκά βέλτιστες λύσεις.

Ικανότητα Εκμετάλλευσης (Exploitation), ώστε να εκμεταλλεύεται με τον καλύτερο τρόπο κάθε πληροφορία που έχει αποκτήσει μέχρι τώρα και, με τη βοήθειά της, να προσπαθήσει να προσεγγίσει αποδοτικά τη βέλτιστη λύση.

Η αρχική υψηλή θερμοκρασία ενισχύει την ικανότητα εξερεύνησης στα πρώτα στάδια ώστε να εντοπισθεί η γειτονιά του καθολικού ακρότατου και να μην παγιδευθεί ο αλγόριθμος σε τοπικά ακρότατα. Στη συνέχεια, η ψύξη αυξάνει την ικανότητα εκμετάλλευσης ώστε να εντοπισθεί γρήγορα η βέλτιστη λύση.

6.3 Ανίχνευση με Απαγορεύσεις (Tabu Search)

Η μέθοδος της ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης με απαγορεύσεις (tabu search) χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη μνήμης η οποία καταγράφει πληροφορίες για τα βήματα που έγιναν πρόσφατα και τις χρησιμοποιεί κατά τα επόμενα βήματα. Η απαγόρευση (που αναφέρει και ο τίτλος της μεθόδου) σχετίζεται με την αποτροπή επανάληψης των πιο πρόσφατων βημάτων, δίνοντας έτσι στη δυνατότητα να ανιχνευθεί με μεγαλύτερη ευελιξία ο χώρος των υποψηφίων λύσεων.

Η μέθοδος της ανίχνευσης με απαγορεύσεις είναι ουσιαστικά μια αιτιοκρατική μέθοδος. Όμως, είναι εύκολο να αποκτήσει και στοιχεία στοχαστικής ανίχνευσης και τέτοιες παραλλαγές της συναντώνται στη βιβλιογραφία.

Πριν την παρουσίαση της μεθόδου, θα παρουσιασθεί σε συντομία το θέμα της κωδικοποίησης των υποψηφίων λύσεων. Είναι ένα σοβαρότατο θέμα σε κάθε πρόβλημα βελτιστοποίησης για αρκετές σύγχρονες μεθόδους βελτιστοποίησης. Αφορά το πως κωδικοποιούνται-αναπαριστώνται τα στοιχεία του διανύσματος \vec{x} και οι δύο εναλλακτικές μέθοδοι είναι η **πραγματική** (real coding) και η **δυναδική** κωδικοποίηση (binary coding). Σε ένα πρόβλημα όπου οι βαθμοί ελευθερίας είναι πραγματικοί αριθμοί, κατά την πραγματική κωδικοποίηση η διαχείριση από τη μέθοδο βελτιστοποίησης κάθε βαθμού ελευθερίας γίνεται διατηρώντας τον αναλλοίωτο σε γραφή πραγματικού αριθμού. Αντίθετα, στη δυναδική κωδικοποίηση, οι πραγματικές μεταβλητές του προβλήματος διατυπώνονται σε δυναδική γραφή, ως συστοιχίες δυναδικών ψηφίων (0 και 1) τις οποίες χειρίζεται ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης. Μια περισσότερο λεπτομερής γνωριμία με το θέμα θα δοθεί κατά την παρουσίαση των εξελικτικών αλγορίθμων, όπου θέματα κωδικοποίησης είναι περισσότερο σημαντικά.

Η πρώτη γνωριμία με τη μέθοδο της ανίχνευσης με απαγορεύσεις είναι ευκολότερη όταν χρησιμοποιείται δυναδική κωδικοποίηση. Η μέθοδος θα παρουσιασθεί με τη βοήθεια αριθμητικού παραδείγματος. Ας υποθέσουμε, λοιπόν, ότι το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού κωδικοποιείται σε μια συστοιχία οκτώ δυναδικών ψηφίων (bit), και στην n -ιοστή επανάληψη ή κύκλο, η τρέχουσα λύση είναι η

$$\vec{x}^n = (1, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1) \quad (6.3)$$

Με κάθε συστοιχία ή διάνυσμα \vec{x} συνδέεται μια αντικειμενική συνάρτηση $F(\vec{x})$.

Η μνήμη στη μέθοδο της ανίχνευσης με απαγορεύσεις μπορεί (κατά ένα τρόπο, που δεν είναι αναγκαστικά ο μοναδικός) να περιληφθεί σε ένα διάνυσμα οκτώ (όσοι και οι βαθμοί ελευθερίας) ακεραίων. Κάθε ακεραίο στοιχείο του διανύσματος ποσοτικοποιεί τη διαθεσιμότητα κάθε δυναδικού ψηφίου για ενδεχόμενη αλλαγή κατά την επόμενη επανάληψη. Στο παράδειγμα μας, ας είναι M^n η εικόνα της μνήμης κατά την τρέχουσα επανάληψη και ας έχει τις τιμές

$$M^n = (3, 0, 1, 5, 0, 4, 2, 0) \quad (6.4)$$

Πριν ερμηνεύσουμε τη σημασία των στοιχείων του M^n , ας κάνουμε σαφές ότι η μνήμη δεν αφορά όλο το παρελθόν της μεθόδου ανίχνευσης αλλά ο χρήστης προσδιορίζει το βάθος ή ορίζοντα της μνήμης. Ας υποθέσουμε ότι εδώ ο χρήστης διάλεξε ως βάθος μνήμης τους πέντε τελευταίους κύκλους, κάθε φορά. Μια λεπτομέρεια, η οποία θα φανεί στη συνέχεια, είναι ότι το βάθος μνήμης πρέπει να είναι μικρότερο του αριθμού των μεταβλητών (εδώ $5 < 8$, γιατί;). Αν ο κάτω δείκτης συμβολίζει τη συνιστώσα ενός διανύσματος (εδώ, λ.χ. $x_3^n = 0$ με $M_3^n = 1$), τότε η τιμή $M_i^n = j$ σημαίνει ότι το i -ιοστό bit του \vec{x} τροποποιήθηκε για τελευταία φορά πριν από $5 - j$ επαναλήψεις. Παρατηρήστε ότι όλοι οι αριθμοί από 1 ως 5 εμφανίζονται μόνο μια φορά στο M^n , η τιμή 5 συμβολίζει το bit που άλλαξε τιμή κατά τον τελευταίο κύκλο και ότι όλα τα bits με μηδενική τιμή στην αντίστοιχη θέση του πίνακα μνήμης είναι εκείνα τα οποία δεν

έχουν αλλάξει τιμή κατά τους τελευταίους 5 κύκλους και, άρα, είναι άμεσα διαθέσιμα για να αλλάξουν τιμή. Με άλλα λόγια, η τιμή $M_1^n = 3$ σημαίνει ότι για τις επόμενες 3 επαναλήψεις το πρώτο bit δεν είναι διαθέσιμο για αλλαγή, κοκ.

Με την παραπάνω εικόνα του διανύσματος μνήμης, η επόμενη επανάληψη που θα διαμορφώσει το \vec{x}^{n+1} και η οποία επιτρέπεται να προκύψει με αλλαγή (απο 0 σε 1 ή από 1 σε 0), θα μπορούσε να οδηγήσει σε ένα από τα οκτώ γειτονικά διανύσματα

$$\begin{aligned}\vec{x}^{n+1} &= (0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0)\end{aligned}$$

Όμως, με βάση το διάνυσμα της μνήμης 6.4, μόνο το δεύτερο, το πέμπτο και το όγδοο από αυτό επιτρέπονται να χρησιμοποιηθούν. Όλα τα άλλα είναι απαγορευμένα (tabu) για χρήση σε αυτήν την επανάληψη. Θα επιλεγεί, λοιπόν, το \vec{x}^{n+1} ως εκείνο απο τα

$$\begin{aligned}\vec{x}^{n+1} &= (1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1) , \\ \vec{x}^{n+1} &= (1, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0)\end{aligned}$$

που δίνει την καλύτερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Ας είναι αυτό το δεύτερο από τα τρία επιτρεπόμενα, το οποίο θα αποτελέσει το \vec{x}^{n+1} ακόμα και αν η τιμή καταλληλότητάς του τυχαίνει να είναι μικρότερη από την τιμή $F(\vec{x}^n)$. Συγχρόνως, αναπροσαρμόζονται τα στοιχεία του διανύσματος της μνήμης: από όλα τα μη-μηδενικά στοιχεία αφαιρείται η μονάδα, τα μηδενικά παραμένουν ως έχουν και για το \vec{x}^{n+1} που διαλέχθηκε η τιμή μνήμης τίθεται ίση με 5 και έτσι απομακρύνεται η πιθανότητα να χρησιμοποιηθεί ξανά κατά τους επόμενους 5 κύκλους.

Το νέο διάνυσμα μνήμης γίνεται

$$M^{n+1} = (2, 0, 0, 4, 5, 3, 1, 0) \quad (6.5)$$

Η μέθοδος στη μορφή που μόλις παρουσιάστηκε είναι αρκετά περιοριστική και ο καθένας εύκολα σκέφτεται περιπτώσεις όπου αυτή η συμπεριφορά οδηγεί σε σπατάλη κύκλων. Χαρακτηριστικό τέτοιο παράδειγμα θα ήταν η περίπτωση όπου κάποιο από τα απαγορευμένα γειτονικά διανύσματα του τρέχοντος έδινε μια πολύ καλύτερη λύση και παρόλα αυτά ο αλγόριθμος δεν επιτρέπεται να το επιλέξει αφού πρόσφατα είχε ξαναχρησιμοποιηθεί. Βεβαίως, μια τέτοια αλγοριθμική παραλλαγή θα σήμαινε ότι έχει πραγματοποιηθεί αξιολόγηση και των οκτώ γειτονικών διανυσμάτων του \vec{x}^n αντί των

τριών που τώρα χρειάζεται να αξιολογηθούν. Θα αύξανε δηλαδή το υπολογιστικό κόστος ανά κύκλο. Καλύτερη αλγοριθμική διατύπωση θα μπορούσε να είναι μια 'ενδιάμεση' όπου, εισάγοντας στοχαστικότητα, η επιλογή θα μπορούσε να καθορίζεται με κάποια τυχαιότητα και αυτό θα δρούσε ως τρόπος αντιμετώπισης της παγίδευσης της λύσης σε τοπικά ακρότατα.

Τέλος, ως επισημάνουμε ότι πολύ συχνά ο αλγόριθμος της ανίχνευσης με απαγορεύσεις χρησιμοποιεί και μια δεύτερη μνήμη, έστω τη N^n . Εκεί αποθηκεύεται η συχνότητα αλλαγών κάθε bit σε ένα μεγαλύτερο από ότι πριν βάθος κύκλων. Για παράδειγμα, αν ο χρήστης επιλέξει βάθος 50 κύκλων, τότε το διάνυσμα αυτό θα μπορούσε να είναι το

$$N^n = (5, 7, 11, 3, 9, 8, 1, 6) \quad (6.6)$$

και να σημαίνει ότι το πρώτο bit μεταβλήθηκε 5 φορές στους τελευταίους 50 κύκλους, κοκ. Η χρήση του διανύσματος N^n περιορίζεται συνήθως σε ειδικές περιπτώσεις. Για παράδειγμα, όταν από όλες οι μη-tabu λύσεις οδηγούν σε χειρότερη από την τρέχουσα λύση, αξίζει να επιλεγεί αυτή που έχει χρησιμοποιηθεί λιγότερο κατά τις τελευταίες 50 λ.χ. επαναλήψεις.

6.4 Μέθοδος του Πολυτόπου (Simplex)

Η μέθοδος Simplex αποτελεί μια γνωστή μέθοδο βελτιστοποίησης η οποία μπορεί να εφαρμοσθεί σε προβλήματα δύο ή περισσότερων μεταβλητών. Το ότι η σύντομη παρουσίαση της μεθόδου που θα ακολουθήσει αναφέρεται σε προβλήματα στο διδιάστατο χώρο $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ είναι μόνο για λόγους εποπτείας. Η μέθοδος του πολυτόπου ή Simplex οφείλεται στους Nelder και Mead και συχνά αναφέρεται με το όνομά τους. Βασικό της χαρακτηριστικό είναι ότι απαιτεί μόνο τιμές αντικειμενικής συνάρτησης και όχι παραγώγους αυτής. Η ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου εξαρτάται πολύ από τη μορφή της αντικειμενικής συνάρτησης και, στην κλασική της μορφή, η μέθοδος δεν θεωρείται ιδιαίτερα γρήγορη. Στον καθαρά αιτιοκρατικό και με καλή γεωμετρική ερμηνεία τρόπο που λειτουργεί η μέθοδος μπορούμε να εισάγουμε στοιχεία στοχαστικότητας, με τρόπο ανάλογο με αυτόν που χρησιμοποιείται σε άλλες μεθόδους που γνωρίσαμε ή θα γνωρίσουμε.

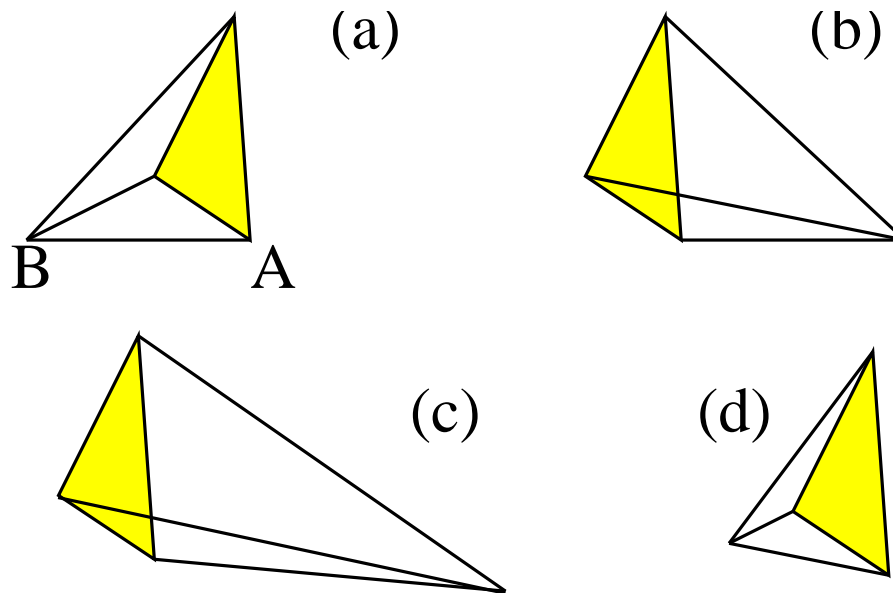
Με τον όρο simplex αναφερόμαστε σε ένα γεωμετρικό σχηματισμό που αποτελείται από $N + 1$ κορυφές στο χώρο των λύσεων (\mathbb{R}^N). Αν λ.χ. $N = 2$, το simplex του διδιάστατου χώρου είναι ένα τρίγωνο. Στο \mathbb{R}^3 είναι ένα τετράεδρο, βλ. σχήμα 6.1. Εδώ θα αναφερθούμε μόνο στη γενική περίπτωση που το simplex δεν είναι εκφυλισμένο, όταν δηλαδή στο N -διάστατο παραμετρικό πρόβλημα το 6.1 έναν πραγματικό και πεπερασμένο N -διάστατο όγκο.

Ο αλγόριθμος Simplex, για το N -διάστατο πρόβλημα ξεκινά επιλέγοντας $N + 1$ αρχικά σημεία-υποψήφιος λύσεις. Η επιλογή αυτή είναι συνήθως τυχαία, αλλά ελέγχοντας την 'ποιότητα' του simplex, με βάση όσα προαναφέρθηκαν. Για $N = 3$, η αρχική επιλογή θα μπορούσε να είναι το τετράεδρο του σχήματος 6.1. Επιλέγοντας τον αρχικό αυτό σχηματισμό, το πρώτο βήμα είναι να γίνει η αξιολόγηση των κορυφών του

simplex, ο υπολογισμός δηλαδή της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης για τις λύσεις της αρχικοποίησης. Γενικά, αν σε κάθε simplex μια κορυφή ορισθεί ως το σημείο αναφοράς, τότε το simplex είναι απλά τα N διανύσματα θέσης που, με αφετηρία την κορυφή αναφοράς, καθορίζουν τις άλλες κορυφές του simplex.

Κάθε επόμενο βήμα, καταχωρούμενο ως ένας νέος κύκλος ή μια νέα επανάληψη στο επαναληπτικό σχήμα που χαρακτηρίζει τη μέθοδο Simplex, χρησιμοποιεί την αντικατάσταση της χειρότερης (ως προς την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης) από τις κορυφές του simplex με μια νέα κορυφή-πιθανή λύση. Η τελευταία κατασκευάζεται με γεωμετρικά ερμηνευόμενους τρόπους, όπως αυτοί που φαίνονται στο σχήμα 6.1. Στον τρόπο εύρεσης του νέου σημείου, η τάση είναι να αντικαθίσταται το χειρότερο σημείο με το 'είδωλο' του ως προς την επιφάνεια που ορίζουν οι υπόλοιπες κορυφές του simplex. Η εύρεση του 'είδωλου' είναι ο απλούστερος μηχανισμός και μπορεί να συνοδεύεται με διάφορες παραμορφωτικές, διορθωτικές ή ακόμα και στοχαστικές παρεμβάσεις με στόχο (α) την αύξηση της πιθανότητας να έχει το νέο σημείο καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης και (β) τον απεγκλωβισμό από καταστάσεις όπου το simplex έχει παγιδευθεί σε τοπικά ακρότατα ή στην ατέλειωτη επανάληψη ατελέσφορων κατοπτρισμών.

Δεν είναι σκοπός αυτών των σημειώσεων να υπεισέλθουν σε τεχνικά θέματα για τον τρόπο που εξελίσσεται ένα simplex. Ο αναγνώστης που ενδιαφέρεται για περισσότερες λεπτομέρειες παραπέμπεται σε σχετικά βιβλία ή δημοσιεύσεις. Οι βασικότερες ιδέες και τεχνικές φαίνονται, πάντως, στο σχήμα 6.1 και εξηγούνται στη λεζάντα του.



Σχήμα 6.1: Σχηματισμός simplex για ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με $N = 3$. Είναι η περίπτωση που το simplex είναι τετράεδρο και απεικονίζεται και εξελίσσεται στον τριδιάστατο χώρο. Το αρχικό τετράεδρο ή το τετράεδρο της τρέχουσας επανάληψης (κατά περίπτωση) παρουσιάζεται ως (a). Η κορυφή που σημειώνεται με B είναι αυτή με τη χειρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης από τις 4 κορυφές του τετραέδρου. Κάθε κύκλος ή επανάληψη έχει σκοπό να αντικαταστήσει την κορυφή B με μια άλλη. Έτσι, στο (b) φαίνεται η περίπτωση του απλού κατοπτρισμού (reflection) ως προς τη σκιασμένη βάση (τις τρεις δηλαδή κορυφές εκτός από τη B). Η περίπτωση (c) είναι ο κατοπτρισμός με επέκταση (reflection and expansion), η οποία συνήθως ενεργοποιείται για λόγους επιτάχυνσης της διαδικασίας σύγκλισης, υπό προϋποθέσεις. Η περίπτωση της συρρίκνωσης (contraction), που απεικονίζεται στο (d), ενεργοποιείται όταν με βάση σχετικά κριτήρια ο κατοπτρισμός με ή χωρίς επέκταση αποτυγχάνει. Στην περίπτωση αυτή, η τάση είναι να ανιχνευθεί ο υποχώρος από την πλευρά της λύσης B , σε μικρότερη όμως απόσταση από τη σκιασμένη βάση.

Κεφάλαιο 7

Εξελικτικοί Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης

Από τη δεκαετία του 1990 και έκτοτε, η γεωμετρική αύξηση της υπολογιστικής ισχύος και το προσιτό κόστος των μεγάλων και γρήγορων υπολογιστών συνετέλεσαν στην ευρεία αποδοχή και χρήση στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης με έναν από τους βασικότερους εκπροσώπους τους εξελικτικούς αλγόριθμους βελτιστοποίησης (evolutionary algorithms, *EA*). Βασικό στοιχείο που οδήγησε στη γρήγορη και ευρεία επικράτησή τους ήταν αφενός το ενδιαφέρον, μη-μαθηματικό υπόβαθρό τους, η ευκολία με την οποία προσαρμόζονται σε κάθε νέο πρόβλημα αρκεί να υπάρχει προγραμματισμένο λογισμικό αξιολόγησης κάθε υποψήφιας λύσης και, κυρίως, η δυνατότητά τους (ως στοχαστική μέθοδος) να μην εγκλωβίζονται σε τοπικά ακρότατα. Το μεγαλύτερο πλεονέκτημά των *EA* είναι ότι, πρακτικά, σε ένα νέο πρόβλημα η χρήση τους είναι γενικά άμεση χωρίς τις παρεμβάσεις στη διαδικασία βελτιστοποίησης που απαιτούν οι αιτιοκρατικές μέθοδοι, αν και αναμφισβήτητα η γνώση του προβλήματος και η χρήση πληροφορίας από αυτό μέσω ειδικών τελεστών επιταχύνει το ρυθμό σύγκλισης. Παρόλα αυτά, βασικό τους μειονέκτημα είναι ότι ο εντοπισμός της βέλτιστης λύσης απαιτεί συνήθως μεγάλο αριθμό αξιολογήσεων, γεγονός που φαίνεται κυρίως όταν κάθε αξιολόγηση (λ.χ. κάθε ανάλυση μιας υποψήφιας αεροτομής γίνεται με χρονοβόρο λογισμικό όπως είναι κώδικες Navier–Stokes). Οι *EA* δεν είναι νέες μέθοδοι. Είχαν προταθεί από τη δεκαετία του 1960, αλλά την τελευταία δεκαετία η χρήση τους εξαπλώθηκε πολύ περισσότερο.

Βασικό γνώρισμα των *EA* είναι ότι χειρίζονται πληθυσμούς υποψηφίων λύσεων (population-based methods) και όχι μια μεμονωμένη λύση σε κάθε επανάληψη, όπως άλλες στοχαστικές μέθοδοι (λ.χ. η μέθοδος της προσομοιούμενης απόπτησης). Οι *EA*, ενώ αρχικά αναπτύχθηκαν για την επίλυση προβλημάτων ενός στόχου, με κατάλληλες μετατροπές μπορούν να αντιμετωπίσουν προβλήματα πολλών στόχων και μάλιστα υπερτερούν ως προς αυτό το θέμα σε σχέση με άλλες μεθόδους λόγω του γεγονότος ότι χειρίζονται έναν πληθυσμό ατόμων και, με την ολοκλήρωσή τους, αποδίδουν ένα σύνολο λύσεων.

Με τον όρο 'εξέλιξη' χαρακτηρίζουμε την αυτόματη διαδικασία της προσαρμογής κάθε συστήματος στο περιβάλλον. Ο όρος 'περιβάλλον' περιλαμβάνει το σύνολο των εξωτερικών συνθηκών που επηρεάζουν το σύστημα. Οι *EA* είναι υπολογιστικά μοντέλα

τα οποία με χρήση αντίστοιχης με τη φύση διαδικασίας προσαρμογής στο περιβάλλον, επιλύουν προβλήματα. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούν στοχαστικούς μηχανισμούς εξέλιξης προερχόμενους από τη φύση και βασίζονται στις αρχές εξέλιξης των ειδών όπως αυτές διατυπώθηκαν αρχικά από το Δαρβίνο, περί το 1960. Οι *EA* προσομοιώνουν μερικώς και με απλουστευμένο τρόπο την εξέλιξη των φυσικών πληθυσμών. Σύμφωνα με τη θεωρία του Δαρβίνου, τα άτομα ενός πληθυσμού συναγωνίζονται για την απόκτηση πόρων όπως στέγη, τροφή και για την προσέλκυση συντρόφου. Τα επιτυχημένα άτομα έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να οδηγηθούν σε αναπαραγωγή και να διαιωνισθούν. Αυτή η φυσική επιλογή, σημαίνει ότι τα γονίδια των επιτυχημένων ατόμων ή των ατόμων που έχουν προσαρμοσθεί καλύτερα στο περιβάλλον επιβιώνουν και με την πάροδο των γενεών τα χαρακτηριστικά τους μεταφέρονται σε μεγαλύτερο αριθμό απογόνων. Ο συνδυασμός καλών χαρακτηριστικών από διαφορετικούς επιτυχημένους γονείς ενδεχόμενα να παράγει απογόνους με χαρακτηριστικά καλύτερα από αυτά των γονέων. Με τον τρόπο αυτό οι φυσικοί πληθυσμοί εξελίσσονται και προσαρμόζονται στο εκάστοτε περιβάλλον.

Οι **γενετικοί αλγόριθμοι** (genetic algorithms, *GA*) είναι μάλλον η πιό διαδεδομένη κατηγορία εξελικτικών αλγορίθμων, ιδίως στην περιοχή της αεροδυναμικής και των στροβιλομηχανών. Οι **εξελικτικές στρατηγικές** (evolution strategies, *SE*) είναι μια λιγότερο χρησιμοποιούμενη τεχνική. Ως τρίτη κατηγορία, αρκετά διαφορετική από τις δύο προηγούμενες, αναφέρεται ο **γενετικός προγραμματισμός** (*GP*). Αναπτύχθηκε στις αρχές τις δεκαετίας το 1990 και αποτελεί μια σημαντική παραλλαγή των *GA* όπου ως άτομα του πληθυσμού χρησιμοποιούνται προγράμματα υπολογιστή. Πρόκειται για μια μέθοδο δημιουργίας προγραμμάτων που λύνουν ή προσεγγίζουν ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Ο *GP* γράφεται συνήθως σε μια απλοποιημένη εκδοχή της LISP με την οποία είναι δυνατή η εφαρμογή κατάλληλων γενετικών τελεστών ώστε να παραχθούν προγράμματα με ορθή σύνταξη. Επειδή οι λύσεις του *GP* είναι προγράμματα, δεν είναι άμεση η εφαρμογή του σε πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης και δεν θα ασχοληθούμε περισσότερο με αυτόν.

Αν και κάθε κατηγορία των *EA* (*GA*, *SE*, *GP*) έχει η καθεμία τα δικά της διακριτικά γνωρίσματα, η αυστηρή ταξινόμησή τους μοιάζει πλέον να στερείται νοήματος. Ο λόγος είναι ότι οι σύγχρονοι *EA* αλληλοδανείζονται στοιχεία όπως τρόπο κωδικοποίησης ή τελεστές εξέλιξης, ανάλογα με την εμπειρία ή την καταλληλότητα τους στο κάθε πρόβλημα.

Ολοκληρώνοντας, μπορούμε να συνοψίσουμε τα χαρακτηριστικά που πρέπει να έχει ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης ώστε να χαρακτηριστεί εξελικτικός:

- Να χρησιμοποιεί πληθυσμούς ατόμων τα οποία εξελίσσονται συγχρόνως, αντί μεμονωμένων ατόμων.
- Η εξέλιξη του πληθυσμού από γενιά σε γενιά (ορολογία αντίστοιχη των κύκλων ή των επαναλήψεων που χρησιμοποιήσουμε μέχρι τώρα) να καθορίζεται από την τιμή καταλληλότητας (μεγιστοποίηση) ή τιμή κόστους ατόμων (ελαχιστοποίηση), με βάση κατάλληλη αντικειμενική συνάρτηση.
- Να λαμβάνει χώρα δυναμική διαδοχή πληθυσμών, με τη δημιουργία νέων ατόμων

και εξαφάνιση άλλων με βάση την τιμή καταλληλότητάς τους.

- Κατά την εξέλιξη από γενιά σε γενιά, να υπάρχει κληρονομικότητα χαρακτηριστικών από τους γονείς στους απογόνους, αλλά και στοχαστική εμφάνιση νέων χαρακτηριστικών.

7.1 Περιγραφή ενός Εξελικτικού Αλγορίθμου

Στην ενότητα αυτή περιγράφεται ένας Γενικευμένος Εξελικτικός Αλγόριθμος, με σύμμεικτα χαρακτηριστικά που έχουν ληφθεί από τους ΓΑ και τις ΣΕ. Προφανώς, με επιλογή κατάλληλων τιμών των εμπλεκόμενων παραμέτρων και άλλες απλές αλγοριθμικές παρεμβάσεις, ο αλγόριθμος που θα περιγράψουμε μεταπίπτει στη μία ή την άλλη κατηγορία. Στην περιγραφή δεν θα υπεισέλθουμε σε πολλές λεπτομέρειες, αφού σκοπός είναι απλά να παρατεθούν οι βασικοί αλγόριθμοι.

Όπως προαναφέραμε, οι ΕΑ χειρίζονται πληθυσμούς λύσεων. Κατά την εξέλιξη, που είναι η βασική διαδικασία αναζήτησης της βέλτιστης λύσης, ένας πληθυσμός μ υποψηφίων λύσεων (γονείς, κατά τη γενετική ορολογία) εξελίσσεται στον πληθυσμό των λ απογόνων. Αυτοί οι απόγονοι είναι νέες λύσεις, που προκύπτουν από τους μ γονείς, έχοντας ενδεχομένως καλύτερα χαρακτηριστικά. Από τους λ απογόνους, με κριτήριο την καταλληλότητά τους, επιλέγονται οι μ γονείς της επόμενης γενιάς. Αυτό συνεχίζεται, γενιά με γενιά, μέχρι την ικανοποίηση κάποιου κριτηρίου σύγκλισης. Τέτοια κριτήρια υπάρχουν αρκετά και ένας ΕΑ μπορεί να έχει σε ισχύ περισσότερα του ενός από αυτά. Μεταξύ αυτών είναι : (α) το να μην βελτιώνεται περαιτέρω η λύση για έναν αριθμό αξιολογήσεων ή γενεών, (β) το να έχει ομογενοποιηθεί ο πληθυσμός ή/και (γ) η ανάλωση του υπολογιστικού χρόνου που επέτρεπε ο χρήστης.

Η παραπάνω παρουσίαση του τι συμβαίνει σε έναν ΕΑ μπορεί να θεμελιωθεί αυστηρότερα. Πιο συγκεκριμένα, σε κάθε γενιά g ενός ΕΑ μπορούμε να θεωρήσουμε ότι συνυπάρχουν τρία διακριτά σύνολα ατόμων. Η ορολογία προέρχεται από την αντίστοιχη της βιολογίας. Έτσι, υπάρχει το σύνολο των γονιών $S^{g,\mu}$ με μ μέλη, των απογόνων $S^{g,\lambda}$ με λ μέλη και των επίλεκτων ή ελίτ ατόμων $S^{g,e}$. Μπορεί εύκολα να γίνει αντιληπτό το γιατί, σε έναν αλγόριθμο που βασίζεται στην εξέλιξη, υπάρχουν σύνολα γονιών και απογόνων, σε κάθε γενιά. Το σύνολο $S^{g,e}$ αποθηκεύει τα επίλεκτα-καλύτερα άτομα (δηλαδή, υποψήφιας λύσεις) που έχουν προκύψει από τη διαδικασία εξέλιξης μέχρι τη γενιά. Ο σκοπός ύπαρξης του συνόλου είναι διπλός. Ένας λόγος είναι ότι, οποτεδήποτε σταματήσει η εξέλιξη, το $S^{g,e}$ περιέχει την ή τις βέλτιστες λύσεις. Ένας άλλος λόγος είναι ότι κατά την εξέλιξη, χρησιμοποιείται πληροφορία από το σύνολο $S^{g,e}$ για την ενίσχυση των καλών χαρακτηριστικών των μελών της νέας γενιάς που θα προκύψει. Αυτή η ενίσχυση αποτελεί το λεγόμενο 'ελιτισμό' στους ΕΑ.

Ας παρακολουθήσουμε, βήμα-βήμα το τι συμβαίνει σε κάθε γενιά ενός ΕΑ. Ουσιαστικά, η απλή εισαγωγική περιγραφή ενός ΕΑ που προηγήθηκε, εδώ θα αποκτήσει μορφή διακριτών βημάτων, εμπλέκοντας επιπλέον και το σύνολο των επίλεκτων ατόμων. Υποθέστε πρόβλημα ενός στόχου.

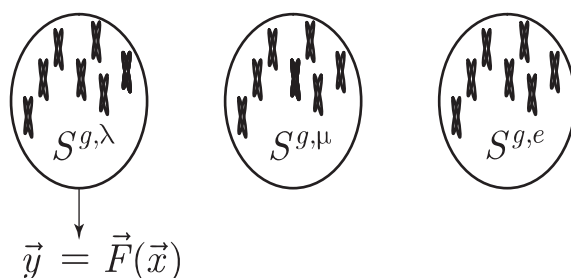
Βήμα 1: Επιλέγονται βασικές παράμετροι της μεθόδου, όπως το μέγεθος των δύο

βασικών πληθυσμών $S^{g,\mu}$ και $S^{g,\lambda}$, δηλαδή οι τιμές των μ και λ . Θέτουμε $g = 0$ συμβολίζοντας έτσι την αρχικοποίηση, τη λεγόμενη και μηδενική γενιά. Επιλέγονται **τυχαία** τα μέλη του αρχικού πληθυσμού $S^{0,\lambda}$.

Βήμα 2: Αξιολογούνται τα λ άτομα του συνόλου $S^{g,\lambda}$. Σχηματικά, το βήμα αυτό περιγράφεται από τη διαδικασία (βλ. και σχήμα 7.1)

$$y(\vec{x}) = F(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in S^{g,\lambda} \quad (7.1)$$

Αν πρόκειται για πρόβλημα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, και για την αξιολόγηση απαιτούνται αριθμητικές αναλύσεις του πεδίου ροής, το βήμα αυτό πρακτικά απαιτεί λ κλήσεις του κώδικα ανάλυσης της ροής (λογισμικό αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων Navier–Stokes). Είναι δηλαδή το τμήμα του αλγορίθμου που φέρει το μεγαλύτερο (πρακτικά, ολόκληρο) το υπολογιστικό κόστος

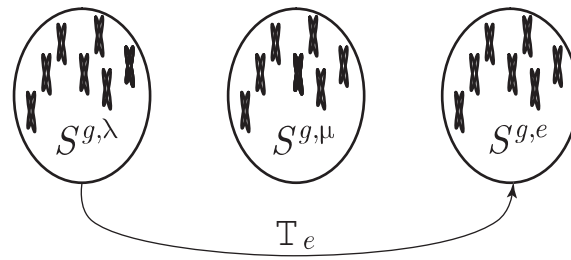


Σχήμα 7.1: Αξιολόγηση των μελών του $S^{g,\lambda}$.

Βήμα 3: Ανανεώνεται το σύνολο των επιλέκτων $S^{g,e}$ με όσο μέλη του $S^{g,\lambda}$ αξίζουν, με κριτήριο την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, να ενταχθούν σε αυτό. Κατά την παρούσα φάση, είναι εξίσου πιθανό να διαγραφούν κάποια μέλη του $S^{g,e}$, αν προκύψουν άτομα του $S^{g,\lambda}$ αποκτήσουν καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης. Σχηματικά

$$S^{g+1,e} = T_e(S^{g,\lambda} \cup S^{g,e}) \quad (7.2)$$

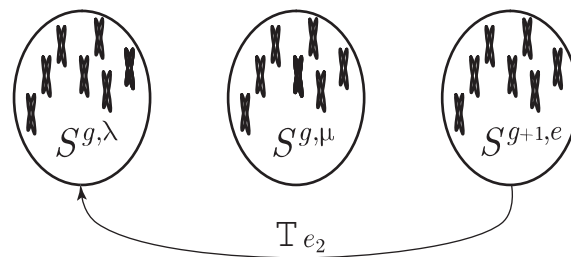
όπου με T_e συμβολίζεται ο τελεστής εντοπισμού των επίλεκτων μελών, βλ. και σχήμα 7.2. Αν αναφερόμαστε σε πρόβλημα ενός στόχου, η πιό απλή εκδοχή του τελεστή T_e είναι να εντοπίζει το (ένα) καλύτερο άτομο από τα δύο σύνολα που επεξεργάζεται ($S^{g,\lambda}$ και $S^{g,e}$). Εδώ, υπάρχει πάντα η περίπτωση κανένας από τους λ να μην υπερτερεί της τρέχουσας βέλτιστης λύσης, δηλαδή του μοναδικού στοιχείου του $S^{g,e}$. Τότε, πρακτικά, το $S^{g,e}$ παραμένει ως έχει και αυτό είναι ένδειξη ότι ο EA δεν κατάφερε να βελτιώσει τη λύση κατά την τελευταία γενιά. Τονίζεται ότι ο EA δεν είναι υποχρεωτικό να βελτιώνει τη λύση σε κάθε γενιά. Σε προβλήματα πολλών στόχων (αλλά ακόμη και σε προβλήματα ενός στόχου αν έτσι αποφασισθεί) το σύνολο $S^{g,e}$ μπορεί να περιέχει περισσότερα του ενός (πλήθος e) στοιχεία.

Σχήμα 7.2: Ανανέωση των μελών του $S^{g,e}$.

Βήμα 4: Εφαρμόζεται ο τελεστής επιλεκτικότητας ή ελιτισμού, με τον οποίο (συνήθως τυχαία επιλεγόμενα) άτομα από το σύνολο των επιλέκτων $S^{g,e}$ αντικαθιστούν άτομα του $S^{g,\lambda}$. Το ποιά θα αντικατασταθούν εξαρτάται από την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης (συνήθως τα χειρότερα) αν και μέρος αυτών μπορεί να επιλέγεται τυχαία. Σχηματικά

$$S^{g,\lambda} = T_{e2}(S^{g,\lambda} \cup S^{g+1,e}) \quad (7.3)$$

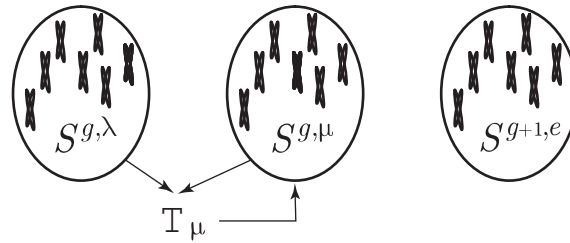
όπου με T_{e2} συμβολίζεται ο τελεστής ελιτισμού, βλ. και σχήμα 7.3. Με τον ελιτισμό αποφεύγεται μια νέα γενιά να δώσει βέλτιστη λύση χειρότερη από αυτήν της προηγούμενης γενιάς (θα έχει τουλάχιστον ίδια τιμή αντικειμενικής συνάρτησης) αν και τα ωφέλη είναι αρκετά περισσότερα και πιο σύνθετα από αυτό που μόλις αναφέρθηκε.

Σχήμα 7.3: Ανανέωση των μελών του $S^{g,e}$.

Βήμα 5: Εφαρμόζεται ο τελεστής επιλογής γονέων T_μ με τη βοήθεια του οποίου επιλέγεται το σύνολο των μελών του νέου πληθυσμού γονέων $S^{g+1,\mu}$. Για το σχηματισμό του, χρησιμοποιούνται οι τρέχοντες πληθυσμοί γονέων $S^{g,\mu}$ και απογόνων $S^{g,\lambda}$, αν και υπάρχουν ορισμένες κλασικές διατυπώσεις όπου οι μ γονείς επιλέγονται μόνο από τους πρόσφατους λ απογόνους. Σχηματικά

$$S^{g+1,\mu} = T_\mu(S^{g,\mu} \cup S^{g,\lambda}) \quad (7.4)$$

όπου με T_μ συμβολίζεται ο τελεστής επιλογής γονέων, βλ. και σχήμα 7.4.

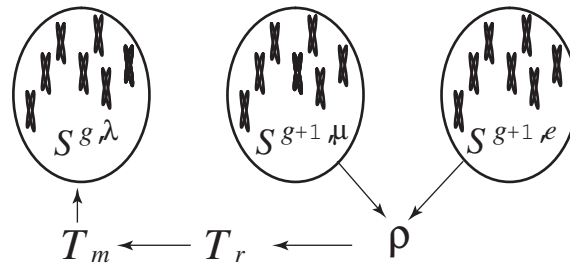


Σχήμα 7.4: Επιλογή μελών του νέου συνόλου γονέων $S^{g+1,\mu}$.

Βήμα 5: Ακολουθεί η διαδικασία αναπαραγωγής για τη δημιουργία του συνόλου απογόνων της επόμενης γενεάς $S^{g+1,\lambda}$. Για τη δημιουργία καθενός από τα λ άτομα του, επιλέγονται τυχαία ρ (συνήθως $\rho = 2$, αλλά δεν αποκλείεται η περίπτωση $\rho > 2$, όπως λ.χ. τρεις γονείς να δημιουργούν τρεις απογόνους, κλπ) γονείς από το σύνολο των γονέων $S^{g+1,\mu}$. Σε διάφορες αλγοριθμικές παραλλαγές, επιτρέπεται ενίοτε κάποιο ή κάποια από τα ρ άτομα να προέρχονται από το σύνολο $S^{g+1,e}$, επιλεγόμενα συνήθως με μικρή πιθανότητα, οπότε ο αλγόριθμος εμφανίζει ισχυρότερα χαρακτηριστικά ελιτισμού. Για κάθε σύνολο ρ γονέων που επιλέχθηκαν, εφαρμόζονται διαδοχικά διάφοροι τελεστές, μεταξύ των οποίων οι πιο γνωστοί είναι ο τελεστής διασταύρωσης ή επανασυνδυασμού (T_r , crossover ή recombination operator) και ο τελεστής μετάλλαξης (T_m , mutation operator). Σχηματικά

$$S^{g+1,\lambda} = T_m(T_r(S^{g+1,\mu} \cup S^{g+1,e})) \quad (7.5)$$

βλ. και σχήμα 7.5.



Σχήμα 7.5: Επιλογή μελών του νέου συνόλου γονέων $S^{g+1,\mu}$.

Βήμα 6: Εφαρμόζεται το κριτήριο σύγκλισης και αν η μέθοδος θεωρείται ότι δεν έχει συγκλίνει αρχίζει μια νέα γενιά, δηλαδή επαναλαμβάνονται τα βήματα 2 ως 6, θέτοντας $g \leftarrow g + 1$.

7.1.1 Κωδικοποίηση Ελεύθερων Μεταβλητών

Όπως έχει ήδη αναφερθεί κατά την περιγραφή της μεθόδου της ανίχνευσης με απαγορεύσεις, μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε *δυναμική* ή *πραγματική κωδικοποίηση*

των μεταβλητών του προβλήματος. Η πρώτη είναι ουσιαστικά χαρακτηριστικό των (κλασικών) ΓΑ ενώ η δεύτερη χαρακτηρίζει κυρίως τις ΣΕ. Εδώ θα αναφέρουμε σύντομα τα βασικά χαρακτηριστικά της δυαδικής κωδικοποίησης.

Αν \vec{x} το διάνυσμα των ελεύθερων μεταβλητών με N συνιστώσες (x_1, x_2, \dots, x_N) , η δυαδική κωδικοποίηση, με τον τρόπο που χρησιμοποιείται στους ΓΑ, απαιτεί τον καθορισμό ενός κατώτατου ορίου $x_{i,L}$ (L=lower), ενός ανώτατου ορίου $x_{i,U}$ (U=upper) αλλά και του πλήθους n_i δυαδικών ψηφίων ανά μεταβλητή i , $i \in N$. Το πλήθος n_i καθορίζει την ακρίβεια διακριτοποίησης της i -οστής μεταβλητής, που δίνεται από τη σχέση

$$\delta x_i = \frac{x_{i,U} - x_{i,L}}{2^{n_i} - 1} \quad (7.6)$$

Η συνένωση των δυαδικών συστοιχιών όλων των μεταβλητών δημιουργεί την ενιαία δυαδική συστοιχία (χρωμόσωμα) που περιγράφει συνολικά κάθε υποψήφια λύση. Για παράδειγμα, αν $N = 3$, $n_1 = 5$, $n_2 = 7$, $n_3 = 6$, ένα χρωμόσωμα θα μπορούσε να είναι το

$$\underbrace{10010}_{x_1} \underbrace{1100111}_{x_2} \underbrace{010010}_{x_3} \quad (7.7)$$

όπου λ.χ. η τιμή που αντιστοιχεί στο x_1 είναι η

$$x_1 = x_{1,L} + \frac{x_{1,U} - x_{1,L}}{2^{n_1} - 1} \text{int}(10010)$$

όπου $\text{int}(10010)$ είναι ο ακέραιος που αντιστοιχεί στη δυαδική συστοιχία 10010.

7.1.2 Τελεστές Επιλογής Γονέων

Αναφέρθηκε ήδη ότι ο τελεστής επιλογής γονέων T_μ δημιουργεί το σύνολο γονέων $S^{g+1,\mu}$ της επόμενης γενιάς επιλέγοντας άτομα από τα σύνολα απογόνων $S^{g,\lambda}$ και γονέων $S^{g,\mu}$ της τρέχουσας γενιάς. Αναφέρθηκε επίσης ότι η συμμετοχή του $S^{g,\mu}$ στην επιλογή γονέων δεν είναι υποχρεωτική και, για το λόγο αυτό, στη σύντομη παρουσίαση που ακολουθεί θα θεωρήσουμε ότι

$$S^{g+1,\mu} = T_\mu(S^{g,\lambda}) \quad (7.8)$$

Η διαδικασία επιλογής γονέων αναλαμβάνει να δώσει μεγαλύτερες πιθανότητες στα άτομα του $S^{g,\lambda}$ με καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης να συμμετάσχουν στη δημιουργία απογόνων. Αντίθετα, οι χειρότερες από τις τρέχουσες λύσεις έχουν μικρότερες πιθανότητες να συμμετάσχουν στο σύνολο $S^{g+1,\mu}$. Άρα, η επιλογή βασίζεται στις (σχετικές, κυρίως) τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης. Στη βιβλιογραφία προτείνονται σχήματα όπως η **αναλογική επιλογή** (proportional selection), η **γραμμική κατάταξη** (linear ranking), η **πιθανοτική επιλογή με διαγωνισμό** (probabilistic tournament selection), κ.α.

Στην αναλογική επιλογή, στο j -οστό από τα λ άτομα αντιστοιχεί πιθανότητα ίση με $F(\vec{x}_j) / \sum_{i=1}^{\lambda} F(\vec{x}_i)$ (αναφερόμαστε σε προβλήματα μεγιστοποίησης). Οι γονείς επιλέγονται με τη βοήθεια μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών, λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω πιθανότητες. Έτσι, καλύτερα άτομα έχουν μεγαλύτερες πιθανότητες να επιλεγούν. Παρόλα αυτά, εγκυμονεί ο κίνδυνος, η παρουσία μιας συγκριτικά καλής λύσης στις αρχικές γενιές να οδηγήσει στην πρόωρη επικράτησή της και άρα στην παγίδευση σε ένα τοπικό ακρότατο. Στη γραμμική κατάταξη, τα λ άτομα κατατάσσονται ως προς την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και επιλέγονται μ από αυτά, όπου τα καλύτερα εμφανίζονται με περισσότερα αντίτυπα στο $S^{g+1,\mu}$ ενώ απουσιάζουν τα χειρότερα. Στην πιθανοτική επιλογή με διαγωνισμό, επιλέγονται τυχαία k άτομα τη φορά, συμμετέχουν σε διαγωνισμό μεταξύ τους με βάση την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και επιλέγεται ο καλύτερος ως ένα ακόμη μέλος του $S^{g+1,\mu}$. Πολλές φορές, ο διαγωνισμός αποκτά και στοιχεία στοχαστικότητας, επιτρέποντας και στο χειρότερο διαγωνιζόμενο να επιλεγεί με μικρή πιθανότητα.

7.1.3 Τελεστές Διασταύρωσης

Για τη δυαδική κωδικοποίηση, η διασταύρωση συνδυάζει δύο τυχαία επιλεγμένους γονείς για να δημιουργήσει ισόποσους απογόνους. Στη βιβλιογραφία μπορούμε να συναντήσουμε και διασταύρωση στην οποία συμμετέχουν περισσότεροι από δύο γονείς.

Στη δυαδική κωδικοποίηση, η λεγόμενη **διασταύρωση απλού σημείου** (single-point crossover) αρχικά επιλέγει τυχαία μια θέση μεταξύ δύο διαδοχικών δυαδικών ψηφίων του χρωμοσώματος. Στη συνέχεια, επιλέγει τυχαία δύο γονείς από τη δεξαμενή των επιλεγέντων γονέων με χρήση των τελεστών επιλογής που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο. Τους δύο αυτούς γονείς διασταυρώνει, δηλαδή εναλλάσσει τα δύο μέρη εκατέρωθεν της θέσης διασταύρωσης, παράγοντας έτσι δύο απογόνους.

Ως παράδειγμα, παρουσιάζεται η διαταύρωση ενός σημείου για δύο επιλεγέντες γονείς, τους

```
10110001011001
00101101110101
```

όπου έστω ότι έτυχε ως θέση διασταύρωσης το τέλος του πέμπτου δυαδικού ψηφίου, δηλαδή

```
10110 | 001011001
00101 | 101110101
```

άρα, οι δύο απόγονοι που θα προκύψουν από τη διασταύρωση είναι οι

```
10110101110101
00101001011001
```

Στη βιβλιογραφία θα συναντήσουμε ποικιλία σχημάτων διασταύρωσης. Εύκολα, με βάση τα παραπάνω, κατανοούμε τη **διασταύρωση δύο σημείων** (δύο τυχαίες θέσεις διασταύρωσης, ο πρώτος απόγονος σχηματίζεται από το πρώτο και τρίτο τμήμα του πρώτου γονέα και το δεύτερο τμήμα του δεύτερου γονέα, κοκ) ή τη διασταύρωση ενός σημείου ανά μεταβλητή (επιλέγεται τυχαία ένα σημείο διασταύρωσης ανά μεταβλητή, η υπόλοιπη διαδικασία είναι όμοια). Η περιγραφή άλλων σχημάτων διασταύρωσης, όπως είναι η **διακριτή και η ομοιόμορφη διασταύρωση** ξεφεύγουν από το πλαίσιο ενός γενικού μαθήματος βελτιστοποίησης.

Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι, στο πλαίσιο ενός στοχαστικού αλγορίθμου, όπως είναι ο εξελικτικός αλγόριθμος, η διασταύρωση πραγματοποιείται με πιθανότητα P_r (συνήθως, κοντά στη μονάδα, λ.χ. $P_r = 0.90$). Ο ρόλος της μη-μοναδιαίας πιθανότητας διασταύρωσης είναι να επιτρέπει με μικρή πιθανότητα (ίση με $1 - P_r$) τη μεταφορά αναλλοίωτων χαρακτηριστικών των γονέων στους απογόνους. Ενεργοποιείται, δηλαδή, και αυτή με μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών: με πιθανότητα P_r γίνεται κανονικά η διασταύρωση ενώ με πιθανότητα $1 - P_r$ οι απόγονοι ταυτίζονται με τους γονείς.

7.1.4 Τελεστές Μετάλλαξης

Ο τελεστής μετάλλαξης εφαρμόζεται σε κάθε νέο απόγονο που προέκυψε από την εφαρμογή του τελεστή διασταύρωσης. Η μετάλλαξη στοχεύει στην εισαγωγή νέου γενετικού υλικού στον πληθυσμό των απογόνων, με πιθανότητα P_m (συνήθως πολύ μικρή, ενδεικτικά $P_m = 0.01$).

Στη δυαδική κωδικοποίηση, η μετάλλαξη επιτρέπει (με την παραπάνω μικρή πιθανότητα) να αντιστραφεί το δυαδικό ψηφίο που θα επιλεγεί (αν ήταν 0 να γίνει 1 και αντιστρόφως). Πρακτικά, για όλα τα δυαδικά ψηφία κάθε απογόνου που προήλθε από τη διασταύρωση γεννιέται ένας τυχαίος αριθμός (στο διάστημα $[0, 1]$) και η μετάλλαξη γίνεται μόνο αν ο τυχαίος αριθμός είναι μικρότερος του P_m . Ενδεικτικά, αν το κριτήριο για τη μετάλλαξη ενεργοποιηθεί για το έβδομο ψηφίο του πρώτου από τους δύο απογόνους που σχηματίστηκαν στο παράδειγμα της διασταύρωσης, δηλαδή του

10110101110101

ο μεταλλαγμένος απόγονος γίνεται

10110111110101

7.1.5 Το θεώρημα των Σχημάτων

Το ότι οι εξελικτικοί αλγόριθμοι λειτουργούν και υπολογίζουν τη βέλτιστη λύση δεν έχει μαθηματική απόδειξη και, για το λόγο αυτό, χαρακτηρίζονται ως **ευριστικές** (heuristic) μέθοδοι. Παρόλα αυτά, οι γενετικοί αλγόριθμοι, που αποτελούν την ευρύτερα διαδεδομένη παραλλαγή των εξελικτικών αλγορίθμων (EA με βασικό χαρακτηριστικό ότι $\mu = \lambda$ και με συγκεκριμένους τελεστές εξέλιξης) υποστηρίζονται από μια

σχετικά απλή θεωρία, το θεώρημα των σχημάτων (schema theorem). Η θεωρία αυτή οφείλεται στο Holland (1968), ο οποίος είναι ουσιαστικά ο θεμελιωτής της θεωρίας των γενετικών αλγορίθμων. Παρακάτω, θα παρουσιασθεί συνοπτικά, αφού πρώτα ορισθεί αυτό που ονομάζεται **σχήμα** (schema).

Για τη δυαδική κωδικοποίηση με την οποία αποκλειστικά ασχολούμαστε εδώ βασικό στοιχείο είναι το χρωμόσωμα ή συστοιχία δυαδικών ψηφίων (bits). Στη γενική του μορφή, αυτό γράφεται

$$a_1 a_2 a_3 a_4 \cdots a_M$$

όπου M είναι το πλήθος των δυαδικών ψηφίων. Με βάση το δυαδικό αλφάβητο που διέπει τη δυαδική κωδικοποίηση, κάθε στοιχείο a_i μπορεί να είναι 0 ή 1. Για τη θεμελίωση του θεωρήματος των σχημάτων, επιτρέπουμε στο στοιχείο a_i να λάβει τρεις, αντί δύο, τιμές και αυτές είναι το 0 το 1 και το *. Ο χαρακτήρας * έχει την έννοια ελεύθερου στοιχείου (don't care or wild card symbol), δηλαδή επιτρέπεται να λαμβάνει τις τιμές 0 ή 1. Η γραφή ενός χρωμοσώματος που περιλαμβάνει και ελεύθερα στοιχεία (ή αστερίσκους *) αποτελεί ένα σχήμα S . Για παράδειγμα, το σχήμα

$$S = 011 * 0 * 1 \quad (7.9)$$

με $M = 7$ δυαδικά ψηφία αντιπροσωπεύει τέσσερα συγκεκριμένα χρωμοσώματα, τα 0110001, 0110011, 0111001 και 0111011.

Βασικοί είναι και η επόμενοι δύο ορισμοί για ένα σχήμα S . Έτσι, ονομάζουμε **μήκος ορισμού** (defining length, $d(S)$) του σχήματος S την απόσταση, μετρούμενη σε θέσεις δυαδικών ψηφίων ανάμεσα στο πρώτο και στο τελευταίο δυαδικό ψηφίο που δεν είναι ελεύθερο (είναι, δηλαδή, 0 ή 1). Στο σχήμα 7.9, το αριστερότερο τέτοιο ψηφίο είναι το υπ' αριθμόν 1, το τελευταίο είναι το υπ' αριθμόν 7, άρα

$$d(S) = 7 - 1 = 6$$

Αντίστοιχα, αν $H = *10 * 1$, τότε $d(S) = 5 - 2 = 3$.

Επίσης, ονομάζουμε **τάξη** (order, $o(S)$) του σχήματος S το πλήθος των σταθερών (όχι *, δηλαδή) χαρακτήρων του. Στο σχήμα 7.9, υπάρχουν 5 θέσεις με 0 ή 1, άρα $o(S) = 5$.

Εύκολα καταλαβαίνουμε γιατί ένα σχήμα S με M δυαδικά ψηφία μπορεί να ανήκει σε 2^M σχήματα. Αντίστοιχα, αν ένα σχήμα έχει r αστερίσκους, αυτό αντιπροσωπεύει 2^r διαφορετικά χρωμοσώματα.

Είναι ενδιαφέρον να κατανοήσουμε το λόγο για τον οποίο ορίστηκαν οι δύο τελευταίες ποσότητες. Το μήκος ορισμού $d(S)$ ενός σχήματος καθορίζει την πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος S κατά τη διασταύρωση. Η τάξη $o(S)$ καθορίζει την πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος S κατά τη μετάλλαξη. Εξηγήσεις (αν όχι αποδείξεις) για τα παραπάνω ακολουθούν, που αφορούν διαδοχικά τη φάση επιλογής γονέων, τη φάση της διασταύρωσης και αυτή της μετάλλαξης.

- (α) Έστω ότι στη φάση επιλογής γονέων, στη γενιά g , το σχήμα S εμφανίζεται σε m_g αντίγραφα. Ας είναι $F_{mean,g}$ η μέση τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης ολόκληρου του πληθυσμού της γενιάς (αναφερόμαστε σε πρόβλημα μεγιστοποίησης, άρα πρόκειται για τη μέση τιμή καταλληλότητας) και ας είναι $F(S)$ η μέση τιμή καταλληλότητας των χρωμοσωμάτων του πληθυσμού που αντιστοιχούν στο σχήμα S . Τότε, μια εκτίμηση του πλήθους χρωμοσωμάτων που αναμένεται να αντιστοιχούν στο σχήμα S , στην επόμενη γενιά $g + 1$, είναι η

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \quad (7.10)$$

Είναι εμφανές ότι πρόκειται για μια γραμμική εκτίμηση. Η εξίσωση 7.10 ονομάζεται εξίσωση αναπαραγωγής σχήματος (reproductive schema growth equation). Από την εξίσωση 7.10 γίνεται φανερό ότι, αν $F(S) > F_{mean,g}$ τότε αναμένεται $m_{g+1} > m_g$ ενώ αν $F(S) < F_{mean,g}$ η παρουσία του σχήματος S στην επόμενη γενιά θα είναι φθίνουσα ($m_{g+1} < m_g$). Με την πολύ απλοϊκή, αλλά βολική παραδοχή ότι η παράμετρος $1 + k = \frac{F(S)}{F_{mean,g}}$ παραμένει σταθερή από γενιά σε γενιά, διατυπώνουμε ότι μεταξύ δύο διαδοχικών γενιών ισχύει η σχέση

$$m_{g+1} = m_g(1 + k) \quad (7.11)$$

ή, σχετικά με την παρουσία m_0 του σχήματος στην αρχική γενιά, ότι

$$m_{g+1} = m_0(1 + k)^{(g+1)} \quad (7.12)$$

Η εξίσωση 7.12 εκφράζει σε βάθος χρόνου τη μακροπρόθεσμη επίδραση του τελεστή επιλογής γονέων στην ύπαρξη και εξέλιξη ενός σχήματος από γενιά σε γενιά.

- (β) Η μελέτη της επίδρασης της διασταύρωσης στην ύπαρξη και εξέλιξη του σχήματος S από γενιά σε γενιά, σχετίζεται με το μήκος ορισμού $d(S)$ αυτού. Η εξήγηση, υπό παραδοχές, είναι απλή: Αν το πλήθος δυαδικών ψηφίων ενός χρωμοσώματος είναι M , τότε η διασταύρωση ενός σημείου μπορεί να λειτουργήσει με $M - 1$ διαφορετικούς τρόπους, δηλαδή υπάρχουν $M - 1$ πιθανές τομές. Η επιβίωση του σχήματος εξαρτάται από την απόσταση του πρώτου και τελευταίου σταθερού του ψηφίου, ποσότητα που ονομάστηκε ήδη μήκος ορισμού $d(S)$. Έτσι, υπάρχουν $d(S)$ από τις $M - 1$ πιθανές διασταυρώσεις οι οποίες θα καταστρέψουν το σχήμα. Άρα, αν δεχθούμε επιπλέον ότι η διασταύρωση γίνεται με πιθανότητα P_r , η πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος στην επόμενη γενιά είναι ίση με

$$P_{survive,S} = 1 - P_r \frac{d(S)}{M - 1} \quad (7.13)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις 7.10 και 7.13, η εξίσωση αναπαραγωγής του σχήματος μετά τις φάσεις επιλογής γονέων και διασταύρωσης γράφεται

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \left(1 - P_r \frac{d(S)}{M-1}\right) \quad (7.14)$$

(γ) Η μελέτη της επίδρασης της μετάλλαξης (που γίνεται με πιθανότητα P_m) στην ύπαρξη και εξέλιξη του σχήματος S από γενιά σε γενιά, σχετίζεται με την τάξη $o(S)$ αυτού. Και αυτή η εξήγηση, υπό παραδοχές, είναι απλή: Ο κίνδυνος να καταστραφεί το χρωμόσωμα υπάρχει αν η μετάλλαξη τύχει να συμβεί σε σταθερό του ψηφίο. Τα σταθερά ψηφία είναι ίσα με $o(S)$. Έτσι, η πιθανότητα επιβίωσης του S μετά τη μετάλλαξη (λογιζόμενη ως η μοναδική τέλεση) είναι

$$P_{survive,S} = (1 - P_m)^{o(S)} \approx 1 - P_m o(S) \quad (7.15)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις 7.10, 7.13 και 7.15, η εξίσωση αναπαραγωγής του σχήματος μετά τις φάσεις επιλογής γονέων, διασταύρωσης και μετάλλαξης γράφεται

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \left(1 - P_r \frac{d(S)}{M-1} - o(S)P_m\right) \quad (7.16)$$

Τα συμπεράσματα από τη σχέση 7.16 είναι άμεσα: σχήματα με μικρό μήκος ορισμού και με χαμηλή τάξη που η μέση τιμή καταλληλότητάς του υπερβαίνει το μέσο όρο της γενιάς έχουν μεγαλύτερες πιθανότητες να αυξήσουν την παρουσία τους στην επόμενη γενιά. Το ίδιο συμπέρασμα, διατυπωμένο διαφορετικά, καταλήγει στο ότι οι γενετικοί αλγόριθμοι ανιχνεύουν το χώρο των πιθανών λύσεων μέσω σχημάτων τα οποία έχουν μικρό μήκος ορισμού και χαμηλή τάξη (building block hypothesis).

7.2 Εξελικτικοί Αλγόριθμοι σε Προβλήματα Πολ- λών Στόχων

Οι *EA* αποτελούν ιδιαίτερα χρήσιμο εργαλείο για την επίλυση προβλημάτων ελαχιστοποίησης με περισσότερους από ένα στόχους. Στη συνέχεια, θα παραθέσουμε τη βασική αρχή με βάση την οποία μπορεί εύκολα να μετασχηματισθεί υπάρχων *EA* που λειτουργεί με ένα στόχο ($\min F(\vec{x})$, $F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$), ώστε να επιλύει προβλήματα της μορφής

$$\min \vec{F}(\vec{x}), \quad \vec{F}: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M \quad (7.17)$$

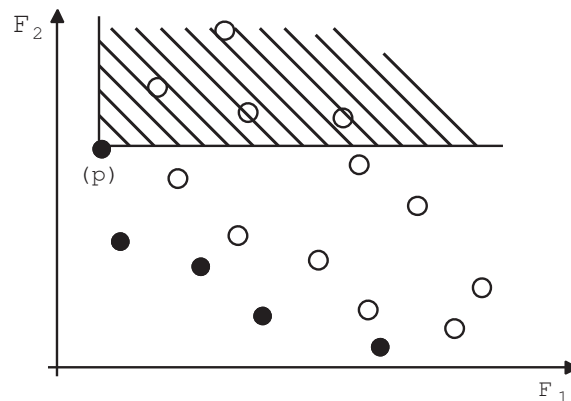
όπου M ας είναι το πλήθος των στόχων. Γνωρίζουμε πλέον ότι το γεγονός ότι η διατύπωση γίνεται για προβλήματα ελαχιστοποίησης δεν είναι περιοριστικό και αμελούμε προς το παρόν προβλήματα που διέπονται από περιορισμούς. Τους τελευταίους, μπορούμε να τους εντάξουμε στη διαδικασία βελτιστοποίησης με τρόπο που παρουσιάσθηκε σε άλλη ενότητα.

Η βασική ιδέα με την οποία προσαρμόζεται ένας *EA* ενός στόχου ώστε να επιλύει προβλήματα M στόχων είναι η έννοια της κυριαρχίας κατά Pareto και η συναφής έννοια του μέτρου Pareto. Σχετικοί ορισμοί υπάρχουν στο κεφάλαιο 1.

Για το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της σχέσης 7.17, υπενθυμίζουμε τους ορισμούς 2.10, 2.11 και 2.12. Για λόγους πληρότητας, επαναλαμβάνουμε και εδώ ότι το διάνυσμα $\vec{x}^{(i)}$ (ο πάνω δείκτης σε παρένθεση προσδιορίζει μια λύση, ως γίνι προσεκτική διάκριση από τον πάνω δείκτη, συνήθως n αλλά χωρίς παρένθεση, που αποτελεί το μετρητή των επαναλήψεων) κυριαρχεί του $\vec{x}^{(j)}$, συμβολικά

$$\vec{x}^{(i)} \prec \vec{x}^{(j)} \quad (7.18)$$

όταν ισχύει $F_m(\vec{x}^{(i)}) \leq F_m(\vec{x}^{(j)})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και, συγχρόνως, υπάρχει ένας τουλάχιστον στόχος από αυτούς (έστω ο k) για τον οποίο η τελευταία σχέση ισχύει ως ανισότητα μόνο ($F_m(\vec{x}^{(i)}) < F_m(\vec{x}^{(j)})$). Τα όσα απεικονίζονται στο σχήμα 7.6 επεξηγούν σχηματικά την έννοια της κυριαρχίας. Βασικό είναι να κατανοηθεί ότι η κυριαρχία γίνεται ευκολότερα αντιληπτή στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων, δηλαδή το χώρο των στόχων. Με βάση την έννοια της κυριαρχίας, σε ένα σύνολο διαθέσιμων λύσεων ενός προβλήματος, μπορούμε να ορίσουμε ως **μέτωπο Pareto** ή **μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων** (optimal Pareto front ή, απλά, Pareto front) το υποσύνολο των λύσεων εκείνων στις οποίες δεν κυριαρχεί καμιά άλλη.



Σχήμα 7.6: Παράδειγμα κυριαρχίας λύσεων σε έναν πληθυσμό εξελικτικού αλγορίθμου. Θεωρείται πρόβλημα δύο στόχων ($M = 2$) ενώ το διάγραμμα σχεδιάζεται στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων (δηλαδή, το επίπεδο των στόχων). Η λύση που σημειώνεται με p κυριαρχεί των λύσεων που περιλαμβάνονται στη διαγραμμισμένη ορθή γωνία, με κορυφή το σημείο p .

Δύο μέλη του μετώπου Pareto είναι αδύνατο να συγκριθούν μεταξύ τους. Σε ένα πρόβλημα δύο στόχων, γενικά αναμένεται μια λύση να υπερτερεί ως προς τον ένα στόχο και να υστερεί ως προς τον άλλο, συγκριτικά με την άλλη που συμπεριφέρεται αντιστρόφως. Για αυτό το λόγο, μια οικογένεια μεθόδων βελτιστοποίησης η οποία έχει αρχίσει να βρίσκει μεγάλη εφαρμογή (και μάλιστα σε προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική) είναι αυτές που στηρίζονται στην ιδέα του μετώπου Pareto. Οι μέθοδοι αυτές δεν υπολογίζουν τελικά μια λύση αλλά υπολογίζουν ένα σύνολο λύσεων που σχηματίζουν ένα μέτωπο Pareto. Επειδή, σύμφωνα με τον ορισμό που προηγήθηκε,

όλες αυτές οι λύσεις δεν κυριαρχούνται από καμιά άλλη ‘γνωστή’ λύση, οι λύσεις του μέτωπου Pareto ονομάζονται και **μη-κυριαρχούμενες** λύσεις (nondominated solutions).

Σε προβλήματα αεροδυναμικής ή στροβιλομηχανών, ο υπολογισμός του μέτωπου Pareto λύνει μεν το πρόβλημα, προκαλεί όμως και το έναυσμα για την επόμενη φάση όπου πρέπει να επιλεγεί μια από τις πολλές λύσεις του μετώπου. Αυτή η απόφαση γίνεται εκ των υστέρων, αποφασίζοντας τη σχετική βαρύτητα των στόχων. Σημειώστε, ότι διαθέτουμε τις λύσεις Pareto όταν λαμβάνεται απόφαση για την ιεράρχηση των στόχων και γίνεται η σχετική επιλογή, σε αντίθεση με την περίπτωση όπου ένα πρόβλημα πολλών στόχων λύνεται ως πρόβλημα ενός στόχου με αντικειμενική συνάρτηση τη

$$F_{total} = \sum_{m=1}^M w_m F_m \quad (7.19)$$

όπου η ιεράρχηση των στόχων προηγείται, αφού αυτή καθορίζει την τιμή των συντελεστών βαρύτητας w_m .

Οι περισσότερες από τις σύγχρονες παραλλαγές των *EA* που αντιμετωπίζουν προβλήματα πολλών στόχων με τη λογική του μέτωπου Pareto στηρίζονται στη διατύπωση των *EA* που χρησιμοποιείται για ένα στόχο, αλλά ορίζουν και χρησιμοποιούν κατάλληλη αντικειμενική συνάρτηση βασισμένη στην έννοια της κυριαρχίας μεταξύ των λύσεων. Υπάρχουν πολλές εκφράσεις για την αντικειμενική συνάρτηση η οποία οδηγεί τον *EA* στον υπολογισμό ενός μέτωπου βέλτιστων λύσεων κατά Pareto (σε αντίθεση με τη σχέση 7.19 η οποία υπολογίζει μια μόνο βέλτιστη λύση, εξαρτώμενη όμως από τις επιλογές των συντελεστών w_m που προηγήθηκε).

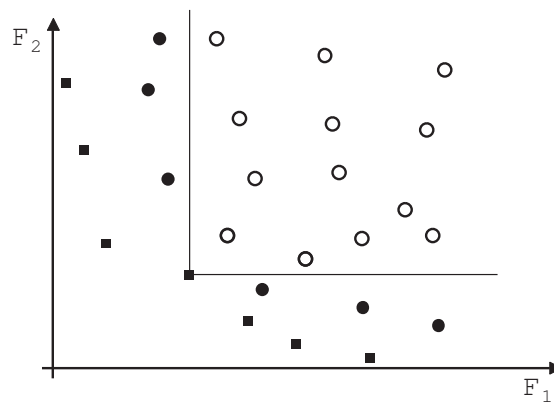
Για να γνωρίσουμε τις μεθόδους συγκρότησης ενιαίας αντικειμενικής συνάρτησης, πρέπει πρώτα να καταγράψουμε τις απαιτήσεις μας από ένα μέτωπο Pareto. Διακρίνοντας το πραγματικό μέτωπο Pareto του προβλήματός μας από το μέτωπο Pareto που θα υπολογίσει η μέθοδος βελτιστοποίησης, οι απαιτήσεις μας είναι: (α) το υπολογιζόμενο μέτωπο να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα στο πραγματικό και (β) με το πεπερασμένο πλήθος λύσεων που προφανώς θα περιέχει, να καλύπτει το μέγιστο εύρος του πραγματικού μετώπου με ικανή παρουσίαση σημείων-λύσεων σε κάθε τμήμα του. Η τελευταία απαίτηση θα μπορούσε να αντιστοιχεί σε ισοκατανομή των σημείων στο μέτωπο Pareto, με την επιφύλαξη όμως ότι η απεικόνιση γίνεται στο χώρο των στόχων όπου γίνεται και η μέτρηση της απόστασης δύο σημείων.

Σκοπός των σημειώσεων αυτών δεν είναι να εστιάσει σε κάποια από τις πολλές (ανταγωνιστικές) μεθόδους υπολογισμού της ενιαίας τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης σε προβλήματα πολλών στόχων. Απλά, σε συντομία, θα προσπαθήσουμε να δώσουμε ιδέες για το πως αυτό μπορεί να υλοποιηθεί. Για παράδειγμα, βλ. σχήμα 7.7, ένας τρόπος βαθμολόγησης (πρόσδοσης τιμής κόστους, αν πρόκειται για πρόβλημα ελαχιστοποίησης) στα μέλη μιας γενιάς του *EA* θα μπορούσε να είναι ο εξής: για κάθε μέλος του μετώπου Pareto (συμβολικά F_{Pareto_member}) η τιμή κόστους είναι ανάλογη του αριθμού $k_{dominated}$ των λύσεων της τρέχουσας γενιάς στα οποία κυριαρχεί η υπόψη λύση. Επομένως, οι ακραίες λύσεις του μέτωπου Pareto πριμοδοτούνται (τους ανατίθεται μικρότερη τιμή κόστους) αφού κυριαρχούν σε μικρότερο αριθμό άλλων λύσεων.

Αντίθετα, λύσεις που βρίσκονται στο κέντρο του μέτωπου έχουν μεγαλύτερη τιμή κόστους. Με τον τρόπο αυτό, ενισχύεται η τάση να εξαπλωθεί περισσότερο το μέτωπο. Ενδεικτικά, δίνεται μια σχέση που δίνει αδιάστατη τιμή, στο διάστημα $(0, 1)$, στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση ενός μέλους του μέτωπου Pareto

$$F_{Pareto_member} = \frac{k_{dominated}}{\lambda + \mu + 1} \quad (7.20)$$

Η τιμή F_{Pareto_member} φέρεται και ως **ισχύς** (strength) κάθε βέλτιστης κατά Pareto λύσης.



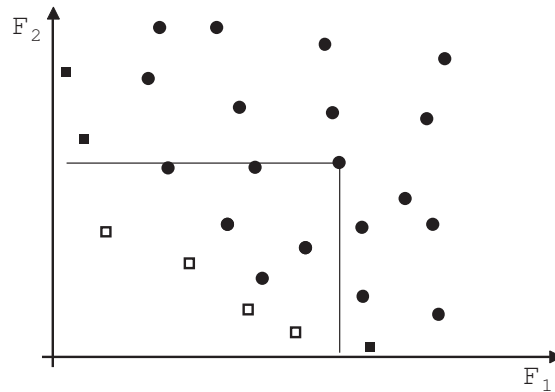
Σχήμα 7.7: Ένας τρόπος να δοθεί τιμή στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση (τιμή κόστους για το πρόβλημα ελαχιστοποίησης) ενός μέλους του μέτωπου Pareto, σε μιά γενιά του EA, είναι ανάλογη του αριθμού των λύσεων της τρέχουσας γενιάς στα οποία κυριαρχεί η λύση αυτή. Στη λύση λ.χ. που σημειώνεται στο σχήμα με ορθή γωνία, η ενιαία τιμή κόστους θα ήταν ανάλογη του 13.

Έχοντας ορίσει τιμή της ποσότητας F_{Pareto_member} για κάθε μέλος του μέτωπου Pareto, στα κάθε άλλο μέλος της γενιάς, η ενιαία τιμή κόστους είναι ανάλογη του αθροίσματος των τιμών F_{Pareto_member} όλων των λύσεων Pareto (σύνολο C) που κυριαρχούν σε αυτό. Με σκοπό κάθε λύση Pareto να είναι πάντα καλύτερη (να έχει μικρότερη τιμή κόστους) από κάθε άλλη λύση που δεν ανήκει στο μέτωπο Pareto, προστίθεται και μια σταθερή ποσότητα, συνήθως η μονάδα (το γιατί φαίνεται από τη σχέση 7.20). Έτσι, η ενιαία τιμή κόστους $F_{nonPareto_member}$ θα είναι

$$F_{nonPareto_member} = 1 + \sum_{i \in C} F_{Pareto_member,i} \quad (7.21)$$

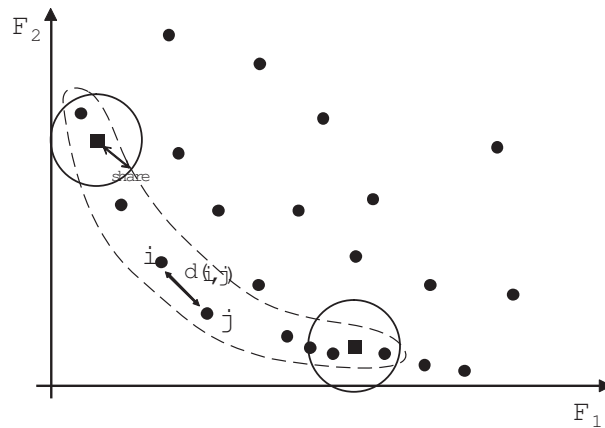
Η περίπτωση απεικονίζεται στο σχήμα 7.8.

Εξετάζοντας τον τρόπο που υπολογίσθηκε μέχρι τώρα η ενιαία τιμή κόστους στις λύσεις μιας γενιάς του EA, γίνεται εμφανής η διάθεση να δοθεί προτεραιότητα στις ακραίες λύσης ώστε να αποτραπεί η συρρίκνωση του μετώπου. Συνήθως αυτό δεν επαρκεί και η τιμή κόστους που μέχρι τώρα υπολογίσθηκε διορθώνεται σε τρόπο ώστε οι συνωστισμένες λύσεις να τιμωρούνται (να χειροτερεύει η τιμή κόστους). Έτσι, πριμοδοτούνται οι απομακρυσμένες λύσεις από τις άλλες και ενισχύεται η τάση του



Σχήμα 7.8: Ένας τρόπος να δοθεί τιμή στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση σε μια λύση που δεν ανήκει στο μέτωπο Pareto, σε μία γενιά του EA , είναι αθροίζοντας τις τιμές κόστους των λύσεων Pareto που κυριαρχούν σε αυτή.

EA να ανιχνεύει άλλες περιοχές στο χώρο των λύσεων. Ενδεικτικά, παρουσιάζεται το σχήμα 7.9.



Σχήμα 7.9: Διαδικασία διόρθωσης της τιμής κόστους των λύσεων Pareto με κριτήριο τη μεταξύ τους απόσταση. Η τιμή κόστους των κοντινών μελών του Pareto χειροτερεύει τεχνητά, και η επαύξηση αυτή εξαρτάται από την απόσταση d .

Κεφάλαιο 8

Υπολογισμός Παραγώγων Αντικειμενικής Συνάρτησης - Η Συζυγής Μέθοδος

Μέχρι τώρα, παρουσιάστηκαν οι περισσότερο γνωστές και ευρύτερα χρησιμοποιούμενες μέθοδοι βελτιστοποίησης. Ως προς τις μονοκριτηριακές μεθόδους βελτιστοποίησης, γνωρίσαμε μεθόδους οι οποίες προϋποθέτουν τη διαθεσιμότητα ενός τρόπου υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης ή, ενδεχομένως, και τρόπου υπολογισμού του μητρώου Hess. Με άλλα λόγια, οι μέθοδοι αυτές απαιτούν υποστήριξη από μια μέθοδο ικανή να υπολογίσει πρώτες (συχνά και δεύτερες) παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης. Ο χαρακτηρισμός τους ως **μέθοδοι βασισμένες στην κλίση** (gradient-based optimization methods) εκφράζει αυτό ακριβώς. Από την άλλη πλευρά, παρουσιάστηκαν ανταγωνιστικές μέθοδοι οι οποίες δεν απαιτούν οποιαδήποτε άλλη πληροφορία πέραν της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης σε κάθε (ενδιάμεση) υποψήφια λύση. Συγχρόνως, τονίσθηκαν τα συγκριτικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των παραπάνω μεθόδων. Τέλος, φάνηκε η διέξοδος του μηχανικού, οποτεδήποτε αδυνατεί να υπολογίσει κάποια πληροφορία με ακρίβεια, να την υποκαθιστά με μοντέλα μικρότερης ακρίβειας ή διαδικασίες παρεμβολής που χρησιμοποιούν υπάρχουσες παρόμοιες πληροφορίες.

Είναι σίγουρο ότι όλα τα προηγούμενα θα αποτελούσαν διδαχτέα ύλη σε οποιοδήποτε μάθημα βελτιστοποίησης, άσχετα με την επιστημονική περιοχή εφαρμογής της (αεροδυναμική, κατασκευές, διοίκηση επιχειρήσεων, κλπ). Ούτως ή άλλως, οι βασικές -κλασικές μέθοδοι βελτιστοποίησης είναι οι ίδιες σε οποιαδήποτε επιστήμη. Κατά την ενασχόληση με θέματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, η ιδιαιτερότητα έγκειται στη χρήση κωδίκων ΥΡΔ για την αξιολόγηση υποψηφίων λύσεων και τον υπολογισμό συναφών με τα πεδία ροής πληροφοριών (όπως λ.χ. της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης, σχετικά θα αναφερθούμε στις λεγόμενες συζυγείς μεθόδους, οι οποίες αποτελούν το αντικείμενο του παρόντος κεφαλαίου).

Έτσι, στο κεφάλαιο αυτό, θα περιορισθούμε σε προβλήματα **βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική** και συγκεκριμένα θα ασχοληθούμε με τις λεγόμενες **συζυγείς μεθόδους βελτιστοποίησης και αντίστροφου σχεδιασμού αεροδυναμικών**

μορφών (adjoint shape optimization and inverse design methods).

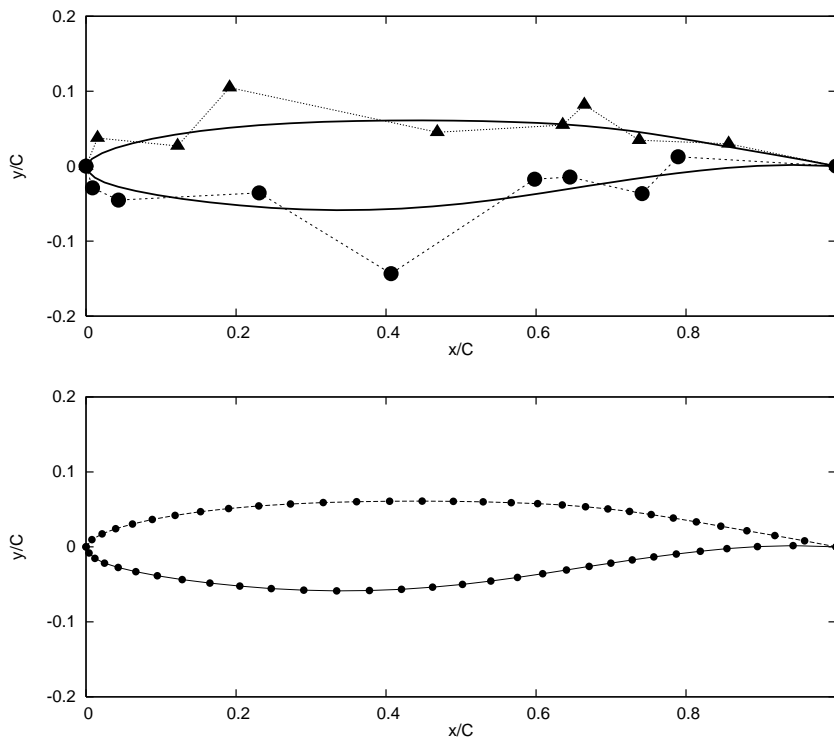
Ο παραπάνω τίτλος είναι πλέον δόκιμος στην περιοχή της αεροδυναμικής, αν και έτσι όπως συνήθως χρησιμοποιείται, μοιάζει να συμπεριλαμβάνει περισσότερα από όσα καλύπτει η μαθηματική έννοια της συζυγίας. Ας τονίσουμε, από την αρχή του κεφαλαίου, ότι οι συζυγείς διατυπώσεις είναι μαθηματικά-υπολογιστικά εργαλεία υπολογισμού της κλίσης μιας (αντικειμενικής) συνάρτησης, εξασφαλίζοντας ταυτόχρονα την ικανοποίηση των βασικών εξισώσεων του προβλήματος (εδώ εξισώσεις ροής, εξισώσεις Euler ή Navier–Stokes). Ο όρος και οι σχετικές διατυπώσεις πρωτοξεκίνησαν από τη θεωρία ελέγχου. Στα μαθηματικά, συναφής ‘ύλη’ είναι αυτή των πολλαπλασιαστών Lagrange. Επειδή, σε μια μέθοδο βελτιστοποίησης, η κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιείται συνήθως για να την οδηγήσει (λ.χ. με τη μέθοδο της απότομης καθόδου) στη λύση που εξασφαλίζει ελάχιστη τιμή αυτής, πολλές φορές όταν αναφερόμαστε σε συζυγείς μεθόδους στην αεροδυναμική εννοούμε, πέραν της διαδικασίας υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης, και τη διαδικασία ελαχιστοποίησης της τελευταίας, δηλαδή το σύνολο του προβλήματος βελτιστοποίησης ή αντίστροφου σχεδιασμού.

8.1 Εισαγωγή–Σχόλια

Με βάση τις προηγούμενες διευκρινήσεις, οτιδήποτε ακολουθεί έχει σκοπό την υλοποίηση αιτιοκρατικών μεθόδων βελτιστοποίησης βασισμένων στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης (gradient-based optimization methods) και απαιτούν τον υπολογισμό παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης. Πεδίο εφαρμογής θα είναι προβλήματα βελτιστοποίησης και αντίστροφου σχεδιασμού στην αεροδυναμική, εξωτερική ή εσωτερική (συμπεριλαμβανομένων εφαρμογών στροβιλομηχανών).

Ως τυπικό παράδειγμα αναφέρεται το πρόβλημα σχεδιασμού μιας αεροτομής. Το αν θα είναι μεμονωμένη αεροτομή ή αεροτομή πτερυγίου συμπίεστη ή στροβίλου είναι, επί του παρόντος, δευτερεύουσας σημασίας και σχετίζεται μόνο με το στόχο της βελτιστοποίησης και το λογισμικό ΥΡΔ που υποστηρίζει τη μέθοδο. Θα αναφερόμαστε σε πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού (λ.χ. αναζήτηση της μορφής αεροτομής που στο περίγραμμά της να δίνει προκαθορισμένη κατανομή πίεσης, ταχύτητας κλπ) ή αναζήτησης της αεροτομής με βέλτιστη άνωση, ελάχιστη οπισθέλκουσα, ή συνδιασμό τους για δεδομένες συνθήκες ροής. Θα τονίσουμε εξ αρχής ότι, σε αντίθεση με ορισμένες άλλες μεθόδους (όπως οι εξελικτικοί αλγόριθμοι), οποιαδήποτε αλλαγή στόχου-αντικειμενικής συνάρτησης απαιτεί πάντα μαθηματική επαναδιατύπωση της μεθόδου και, ασφαλώς, μερικό επαναπρογραμματισμό σε επίπεδο λογισμικού. Ακόμα ‘χειρότερα’, η μαθηματική διατύπωση δείχνει ότι δεν είναι εφικτοί όλοι οι στόχοι, δηλαδή με τις συζυγείς μεθόδους δεν είναι δυνατό να επιλυθεί εκ προοιμίου οποιοδήποτε πρόβλημα βελτιστοποίησης ή αντίστροφου σχεδιασμού.

Συγκριτικά με τις άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης, στις συζυγείς μεθόδους η παραμετροποίηση της μορφής της αεροτομής είναι περισσότερο σημαντική, αφού αυτή εκτός του να καθορίζει την ευελιξία ως προς τα γεωμετρικά σχήματα που μπορούν



Σχήμα 8.1: Ενδεικτική παραμετροποίηση μεμονωμένης αεροτομής με δύο πολυώνυμα Bézier–Bernstein. Για κάθε πλευρά της αεροτομής χρησιμοποιείται διαφορετικό πολυώνυμο Bézier–Bernstein, με τα δικά του σημεία ελέγχου. Στο πάνω σχήμα φαίνονται τα 10 σημεία ελέγχου της πλευράς υποπίεσης (μαύροι κύκλοι) και τα 10 σημεία ελέγχου της πλευράς υποπίεσης (μαύρα τρίγωνα). Η ισότητα στο πλήθος τους αποτελεί επιλογή του σχεδιαστή και δεν είναι υποχρεωτική. Η μορφή της παραγόμενης αεροτομής φαίνεται και στο πάνω και στο κάτω σχήμα. Η διαφορά είναι ότι, στο κάτω σχήμα, φαίνονται και οι κόμβοι (εδώ 31 ανά πλευρά) που περιγράφουν το περίγραμμα της αεροτομής. Έχουν παραχθεί από την ίδια κατανομή της παραμέτρου t , η οποία ήταν, απλά, ισοκατανομημένη στο διάστημα $[0, 1]$. Παρατηρήστε ότι τα κομβικά σημεία του περιγράμματος δεν ισαπέχουν (ούτε κατά μήκος τόξου, ούτε κατά x) έστω και αν ισαπέχουν ως προς t . Όπως είναι γνωστό από τη σχετική θεωρία, η μεταξύ τους απόσταση ‘ρυθμίζεται’ (και) από τις θέσεις των σημείων ελέγχου.

να προκύψουν (αυτό ισχύει και για οποιαδήποτε άλλη μέθοδο), εμπλέκεται ουσιαστικά στη μαθηματική διατύπωση.

Χωρίς να είναι δεσμευτικό, για τις ανάγκες του κεφαλαίου, θα υποθέσουμε ότι οι δύο πλευρές μιας αεροτομής παραμετροποιούνται με πολυώνυμο Bézier–Bernstein (σχήμα 8.1). Κάθε τέτοιο πολυώνυμο αντιστοιχεί σε καμπύλη η οποία ξεκινά από την ακμή προσβολής και καταλήγει στην ακμή εκφυγής. Οι βαθμοί ελευθερίας ή μεταβλητές σχεδιασμού, δηλαδή οι συνιστώσες του διανύσματος $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$, θα είναι οι συντεταγμένες των σημείων ελέγχου Bézier–Bernstein. Το \vec{b} συνοψίζει βαθμούς ελευθερίας και για τις δύο πλευρές της αεροτομής, δηλαδή για το σύνολο του προβλήματος. Σε

σχέση με τα προηγούμενα κεφάλαια, επισημαίνεται η αλλαγή συμβόλου των μεταβλητών σχεδιασμού από \vec{x} σε \vec{b} , αφού το σύμβολο x δεσμεύεται τυπικά για την καρτεσιανή συντεταγμένη.

Με τη χρήση της συζυγούς μεθόδου, για οποιαδήποτε αντικειμενική συνάρτηση F που καθορίζει το πρόβλημα βελτιστοποίησης και για την τρέχουσα λύση-μορφή που μονοσήμαντα καθορίζει το διάνυσμα τιμών \vec{b}^n (ο δείκτης συμβολίζει τη n -ιοστή επανάληψη ενός επαναληπτικού αλγορίθμου), πρέπει να υπολογισθούν οι μερικές παράγωγοι

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}(\vec{b}^n) = \left(\frac{\partial F}{\partial b_1}, \frac{\partial F}{\partial b_2}, \dots, \frac{\partial F}{\partial b_N} \right) \quad (8.1)$$

υπό την προϋπόθεση ότι ικανοποιούνται ταυτόχρονα και οι εξισώσεις Euler ή Navier–Stokes.

Ο τρόπος υπολογισμού των παραγώγων είναι θέμα των επόμενων ενοτήτων του κεφαλαίου αυτού και παρουσιάζεται για συγκεκριμένες μορφές αντικειμενικής συνάρτησης. Στο πλαίσιο μιας πρώτης γνωριμίας, θα ασχοληθούμε με μονοδιάστατα και διδιάστατα προβλήματα (τα οποία έχουν μια πολύ ενδιαφέρουσα διαφορά στη μαθηματική διατύπωση) και μόνο με ατριβείς ροές συμπίεστου ρευστού (εξισώσεις Euler). Συμπληρωματικά, πρόκειται να υποδειχθεί ο τρόπος εργασίας για την περίπτωση που η ροή διέπεται από τις εξισώσεις Navier–Stokes. Επιγραμματικά, για το συνεκτικό ρευστό, οι διαφορές εντοπίζονται κυρίως στις οριακές συνθήκες και στην ύπαρξη όρων διάχυσης (παραγώγων δεύτερης τάξης) στις εξισώσεις ροής.

Πριν παρουσιασθούν τα βασικά στοιχεία της μεθόδου, ένα βασικό σχόλιο αφορά στο υπολογιστικό κόστος. Παρακάτω θα αναφερόμαστε στο κόστος υπολογισμού των παραγώγων 8.1 μια φορά (για μια υποψήφια λύση) και όχι στο κόστος επίλυσης του προβλήματος βελτιστοποίησης. Το τελευταίο εξαρτάται από τη μέθοδο βελτιστοποίησης που θα χρησιμοποιηθεί και την πολυπλοκότητα του προβλήματος, που μαζί θα καθορίσουν πόσες ενδιάμεσες αεροδυναμικές μορφές θα χρειασθούν αξιολόγηση (υπολογισμό τιμής αντικειμενικής συνάρτησης) και υπολογισμό των κλίσεων της αντικειμενικής συνάρτησης.

8.1.1 Περί Υπολογιστικού Κόστους

Θα φανεί στην ενότητα 8.3 που ακολουθεί ότι, χρησιμοποιώντας τη συζυγή μέθοδο, το κόστος υπολογισμού των παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις N μεταβλητές σχεδιασμού είναι περίπου ίσο με το κόστος για την επίλυση των εξισώσεων ροής. Στην πραγματικότητα είναι συνήθως λίγο μικρότερο, αλλά αυτή τη στιγμή μας ενδιαφέρει να καταγραφούν τάξεις μεγέθους. Ιδιαίτερα σημαντικό είναι ότι **το κόστος είναι ανεξάρτητο του πλήθους N** . Πρόκειται για σημαντικότατο πλεονέκτημα της συζυγούς μεθόδου, σε σχέση λ.χ. με τους εξελικτικούς αλγορίθμους, όπου η αύξηση του πλήθους N αυξάνει κατά πολύ το υπολογιστικό κόστος. Το πλεονέκτημα αυτό εξισορροπεί το μειονέκτημα των συζυγών μεθόδων να απαιτούν επαναδιατύπωση των εξισώσεων και των οριακών συνθηκών τους αλλά και μερικό επαναπρογραμματισμό

του λογισμικού κάθε φορά που αλλάζει η αντικειμενική συνάρτηση (κάτι που δεν υπάρχει στους εξελικτικούς αλγορίθμους, όπου το λογισμικό αξιολόγησης χρησιμοποιείται απλά στη λογική 'μαύρου κουτιού', χωρίς άλλες παρεμβάσεις).

Τα σχόλια της προηγούμενης παραγράφου έχουν μεγάλη πρακτική σημασία στο μηχανικό που εμπλέκεται για πρώτη φορά σε θέματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική. Είναι πιθανό αυτός να κληθεί να επιλέξει σε ποια από τις δύο κατηγορίες (μεθόδους βασισμένες στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή συζυγείς μεθόδους στην περίπτωση μας, ή στοχαστικές μεθόδους) πρέπει να 'επενδύσει'. Το ερώτημα δεν είναι ρητορικό, είναι ουσιαστικό και ενσωματώνει αρκετή δημοσιευμένη ερευνητική προσπάθεια ώστε να δειχθεί το ποια από τις δύο μεθόδους υπερτερεί.

Η απάντηση στο παραπάνω δίλημμα δεν μπορεί να είναι μονολεκτική. Τα επόμενα σχόλια δίνουν ένα πλαίσιο σύγκρισης, λαμβάνοντας ως δεδομένο ότι το λογισμικό αξιολόγησης των υποψηφίων λύσεων, δηλαδή ο επιλύτης ροής, είναι διαθέσιμος και στις δύο περιπτώσεις.

Επιλέγοντας τις συζυγείς μεθόδους, αναμένεται υπολογιστικά γρήγορη εύρεση της βέλτιστης λύσης, αρκεί να υπάρχει το σχετικό λογισμικό. Υπάρχει όμως ο κίνδυνος να απαιτηθεί μεγάλη προεργασία (σε μαθηματικές διατυπώσεις, προγραμματισμό) αν δεν προϋπάρχει η μέθοδος ή χρειάζεται να αλλάξει (α) το μοντέλο της ροής, (β) ο στόχος ή/και (γ) η παραμετροποίηση. Η απόφαση ενός μηχανικού στο τμήμα σχεδιασμού μιας βιομηχανίας ή ενός ερευνητή σε θέματα αεροδυναμικού σχεδιασμού να επενδύσει στη συζυγή μέθοδο προϋποθέτει διαθεσιμότητα του λογισμικού αξιολόγησης στην πηγαία μορφή του (source code, ανοικτό κώδικα). Τέλος, επαναλαμβάνεται ότι η χρήση συζυγών μεθόδων για οποιονδήποτε στόχο δεν είναι πάντα εφικτή και ότι αυτές, όπως κάθε αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης, μπορεί εύκολα να παγιωθούν σε τοπικό ακρότατο. Το τελευταίο εξαρτάται, κατά πολύ, από την αρχική λύση που θα επιλεγεί.

Επιλέγοντας 'κλασικές' στοχαστικές μεθόδους (λ.χ. έναν 'κλασικό' εξελικτικό αλγόριθμο), το υπολογιστικό κόστος αναμένεται να είναι μεγαλύτερο (ίσως και κατά μια τάξη μεγέθους - δεν αποτελεί αντικείμενο αυτού του συγγράμματος το πως μπορεί αυτό το κόστος να μειωθεί, αυτό εξάλλου υπονοεί ο προσδιορισμός 'κλασικές'). Όμως, καθεμιά από τις προαναφερθείσες αλλαγές ενσωματώνεται με μικρή, πρακτικά αμελητέα, περαιτέρω επένδυση. Θεωρητικά, οδεύοντας προς τη σύγκλιση του αλγορίθμου (δηλαδή, πρακτικά, μετά από την αξιολόγηση 'επαρκούς' πλήθους υποψηφίων λύσεων) αναμένεται να έχει εντοπισθεί το καθολικό ακρότατο.

Θα υπενθυμίσουμε, εδώ, τον τυπικό τρόπο μέτρησης του υπολογιστικού κόστους σε μια μέθοδο αεροδυναμικής βελτιστοποίησης. Έτσι, τυπική μονάδα μέτρησης είναι το υπολογιστικό κόστος μιας αξιολόγησης, της κλήσης δηλαδή του λογισμικού ΥΡΔ που υπολογίζει το $F(\vec{b})$. Η τελική αναγωγή σε χρόνο CPU είναι εύκολη αρκεί να είναι γνωστό το μέσο κόστος μιας αξιολόγησης. Η αναφορά σε 'μέσο κόστος' γίνεται επειδή η αριθμητική επίλυση του πεδίου ροής γύρω από δύο διαφορετικού σχήματος αεροτομές, με ίδιας διάστασης πλέγμα και το ίδιο λογισμικό ΥΡΔ, δεν είναι απαραίτητο να έχει το ίδιο κόστος. Στην επίλυση ενός συνεκτικού πεδίου ροής, για παράδειγμα, το κόστος αυξάνεται με την πολυπλοκότητα των ροϊκών φαινομένων (λ.χ. την ύπαρξη αποκόλλησης της ροής).

Το πόσο χαμηλό είναι το υπολογιστικό κόστος των συζυγών μεθόδων μπορεί

να γίνει κατανοητό συγκρίνοντάς το με τον πιο απλό τρόπο υπολογισμού τέτοιων παραγώγων. Η μερική παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τον i -οστό βαθμό ελευθερίας μπορεί να προσεγγισθεί με σχήμα πρόσω πεπερασμένων διαφορών, ακρίβειας πρώτης τάξης, ως

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i, \dots, b_N)}{\epsilon} \quad (8.2)$$

όπου ϵ σταθερά, πολύ μικρής τιμής, που καθορίζει ο χρήστης. Η εξίσωση 8.2 πρέπει να εφαρμοστεί N φορές (για τις N τιμές του δείκτη i) στην τρέχουσα λύση \vec{b}^n . Έτσι, το υπολογιστικό κόστος ώστε να βρεθούν (και, μάλιστα, με ακρίβεια πρώτης τάξης) οι συνιστώσες της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης στην τρέχουσα λύση είναι N κλήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης. Αν σε αυτούς προσθέσουμε και την αξιολόγηση ώστε να υπολογισθεί η $F(\vec{b}^n)$, τότε το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη μιας μεθόδου βελτιστοποίησης βασισμένης στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης είναι $N + 1$ αξιολογήσεις $F(\vec{b})$. Στα μειονεκτήματα της χρήσης της σχέσης 8.2 καταγράφεται και η ευαισθησία του υπολογισμού ως προς την τιμή της ποσότητας ϵ . Αν, βέβαια, χρησιμοποιηθούν δεύτερης τάξης κεντρικές πεπερασμένες διαφορές, δηλαδή το ακριβέστερο σχήμα

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i - \epsilon, \dots, b_N)}{2\epsilon} \quad (8.3)$$

τότε χρειάζονται $2N$ υπολογισμοί (κλήσεις) της αντικειμενικής συνάρτησης (αντί των μόνο δύο που απαιτεί η συζυγής μέθοδος).

Η παραπάνω συζήτηση ανέδειξε τον κρίσιμο ρόλο της τιμής του N στο υπολογιστικό κόστος. Υπάρχουν, πραγματικά, περιπτώσεις στις οποίες ο αριθμός N των βαθμών ελευθερίας ενός προβλήματος είναι προκαθορισμένος και ο μηχανικός δεν έχει δυνατότητες παρέμβασης σε αυτό. Σε άλλα όμως προβλήματα, η επιλογή του N εναπόκειται, σε μεγάλο βαθμό, στην κρίση του σχεδιαστή-μηχανικού. Μια αεροτομή μπορεί λ.χ. να σχεδιασθεί με N σημεία ελέγχου, σύμφωνα με τη θεωρία Bézier-Bernstein, αλλά και με πολύ περισσότερα (ενδεικτικά $2N$ ή $3N$, κλπ). Αυξάνοντας την τιμή του N , πέραν της μεταβολής σε υπολογιστικό κόστος που προαναφέραμε, αυξάνεται και η ευελιξία της παραμετροποίησης. Με απλά λόγια, αυξάνοντας τον αριθμό των σημείων ελέγχου μπορούν να υπολογισθούν μορφές αεροτομής που αδυνατεί να εντοπίσει η ίδια παραμετροποίηση με λιγότερα σημεία ελέγχου.

8.1.2 Υπολογισμός Κλίσης με Θεωρία Μιγαδικών Συναρτήσεων

Στα προηγούμενα παρουσιάστηκαν και συγκρίθηκαν σχήματα πρόσω ή κεντρικής διαφόρισης ως εναλλακτικά της συζυγούς τεχνικής, της οποίας η παρουσίαση ακολουθεί. Ένας διαφορετικός τρόπος υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης είναι αυτός που βασίζεται στη θεωρία των μιγαδικών συναρτήσεων. Παρουσιάζε-

ται σύντομα, όχι μόνο για λόγους πληρότητας αλλά και επειδή μπορεί να υποστηρίξει βοηθητικούς υπολογισμούς κλίσης για άλλες συναρτήσεις πέραν της ίδιας της αντικειμενικής συνάρτησης. Στο κάτω-κάτω, από μαθηματικής σκοπιάς, είναι ένας πολύ ενδιαφέρον και ουσιαστικά απλός τρόπος υπολογισμού. Επίσης, είναι εύκολο να υλοποιηθεί προγραμματιστικά (ακολουθεί απλό παράδειγμα).

Έστω η μιγαδική συνάρτηση $F(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, όπου $z = x + iy$. Για να είναι η $F(z)$ διαφορίσιμη πρέπει οι παράγωγοι των u και v ως προς x και y να είναι συνεχείς και να ικανοποιούνται οι εξισώσεις Cauchy-Riemann

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial v}{\partial x}\end{aligned}\quad (8.4)$$

Από την εξίσωση 8.4, προκύπτει ότι

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{v(x + i(y + \epsilon)) - v(x + iy)}{\epsilon} \quad (8.5)$$

Έστω $y = 0$, δηλαδή η συνάρτηση δέχεται αποκλειστικά πραγματικό όρισμα άρα και η τιμή της θα είναι ένας πραγματικός αριθμός. Από την εξίσωση 8.5

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{v(x + i\epsilon) - v(x)}{\epsilon} \quad (8.6)$$

οπότε, αν $imag$ είναι το φανταστικό μέρος ενός μιγαδικού αριθμού, θα ισχύει

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{imag(F(x + i\epsilon))}{\epsilon}$$

ή, σύμφωνα με την ορολογία του κεφαλαίου,

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{imag(F(b_i + i\epsilon))}{\epsilon} \quad (8.7)$$

Η σχέση 8.7 είναι ικανή να υπολογίσει τη μερική παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης F ως προς κάθε μεταβλητή σχεδιασμού b_i . Παρατηρήστε ότι απαιτεί μόνο μια κλήση της αντικειμενικής συνάρτησης ανά μερική παράγωγο. Για το λόγο αυτό (και όχι μόνο, βλ. παρακάτω) πλεονεκτεί των σχέσεων πεπερασμένων διαφορών 8.2 και 8.3, όπως θα φανεί από το παρακάτω απλό μαθηματικό παράδειγμα.

Έστω η συνάρτηση $F(b_1, b_2) = b_1^2 + 3b_2^4 - 4b_1b_2$. Οι μερικές παράγωγοι της υπολογίζονται αναλυτικά ως

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial b_1} &= 2b_1 - 4b_2 \\ \frac{\partial F}{\partial b_2} &= 12b_2^3 - 4b_1\end{aligned}$$

Ακολουθεί υπόδειγμα κώδικα σε γλώσσα Fortran 77, το οποίο εξηγεί, στο παραπάνω παράδειγμα, τη χρήση της εξίσωσης 8.7 για τον υπολογισμό των τιμών των παραγώγων για $(b_1, b_2) = (1, 2)$. Οι προς υπολογισμό παράγωγοι είναι γνωστές και ίσες με $\frac{\partial F}{\partial b_1}(1, 2) = -6$ και $\frac{\partial F}{\partial b_2}(1, 2) = 92$. Αξίζει να αντιληφθούμε την απλή αυτή μαθηματική άσκηση παραγωγίσης ως προσομοίωση ενός προβλήματος αεροδυναμικής βελτιστοποίησης. Στη θέση της συνάρτησης $F(\vec{b})$ νοείται λ.χ. η αλληλουχία υπολογισμών που αρχίζει με τη δημιουργία του περιγράμματος της αεροτομής και ολοκληρώνεται με την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής ενώ στη θέση των b_1 και b_2 , ή γενικότερα του \vec{b} , νοείται το σύνολο των μεταβλητών σχεδιασμού που παραμετροποιούν την υπόψη αεροτομή. Δοκιμάστε να προγραμματίσετε και να τρέξετε τον παρακάτω κώδικα, όπου η κρίσιμη ποσότητα ϵ λαμβάνει την τιμή $\epsilon = 1^{-30}$ (μια πολύ μικρή ποσότητα, ώστε να συμβαδίζει με το όριο της σχέσης 8.7, για αυτό και απαιτείται υποχρεωτικά ακρίβεια δεύτερης τάξης):

```

program demo_complex_variables
implicit double precision (a-h,o-z)
double complex F,x,y
F(x,y) = x**2 + 3.d0*y**4 -4.d0*x*y
epsilon = 1.d-30
b1 = 1.d0
b2 = 2.d0
x=b1*(1.d0,0.d0)+epsilon*(0.d0,1.d0)
y=b2*(1.d0,0.d0)
dFdb1 = imag(F(x,y))/epsilon
x=b1*(1.d0,0.d0)
y=b2*(1.d0,0.d0)+epsilon*(0.d0,1.d0)
dFdb2 = imag(F(x,y))/epsilon
write(*,*) ' Computed    dF/db1 = ',dFdb1
write(*,*) ' Computed    dF/db2 = ',dFdb2
end

```

Τα αποτελέσματα από την εκτέλεση του κώδικα αυτού είναι:

```

Computed    dF/db1 =          -6.000000000000000
Computed    dF/db2 =          92.000000000000000

```

και πιστοποιούν την εξαιρετική ακρίβεια με την οποία υπολογίζονται οι παράγωγοι με τη βοήθεια της σχέσης 8.7, για την επιλεγείσα τιμή του ϵ .

Ας προσπαθήσουμε να υπολογίσουμε τις ίδιες παραγώγους με σχήματα κεντρικής διαφοράς και συγκεκριμένα με τη σχέση 8.3, προγραμματίζοντας και τρέχοντας τον κώδικα:

```

program demo_central_diff
implicit double precision (a-h,o-z)
F(x,y) = x**2 + 3.d0*y**4 -4.d0*x*y

```

```

epsilon = 1.d-30
b1 = 1.d0
b2 = 2.d0
dFdb1 = (F(b1+epsilon,b2)-F(b1-epsilon,b2))*0.5d0/epsilon
dFdb2 = (F(b1,b2+epsilon)-F(b1,b2-epsilon))*0.5d0/epsilon
write(*,*) ' Computed   dF/db1 = ',dFdb1
write(*,*) ' Computed   dF/db2 = ',dFdb2
end

```

Αυτή τη φορά, τα αποτελέσματα είναι:

```

Computed   dF/db1 =      0.0000000000000000E+000
Computed   dF/db2 =      0.0000000000000000E+000

```

όπου φαίνεται η απόλυτη αστοχία του υπολογισμού! Οι τιμές των παραγώγων είναι τραγικά λάθος! Η αστοχία αυτή αποδίδεται προφανώς στην επιλογή τιμής της ποσότητας ϵ . Για το λόγο αυτό, πραγματοποιείται σχετική παραμετρική μελέτη και πινακοποιούνται τα αντίστοιχα αποτελέσματα των δύο προηγούμενων κωδίκων για διάφορες μικρές τιμές του ϵ . Έτσι, με τη μέθοδο υπολογισμού που βασίζεται στη θεωρία των μιγαδικών συναρτήσεων προκύπτουν οι τιμές (διατηρείται το σύνολο των δεκαδικών ψηφίων που έδωσε ο υπολογισμός με μεταβλητές διπλής ακρίβειας)

ϵ	$\partial F/\partial b_1$	$\partial F/\partial b_2$
10^{-30}	-6.0000000000000000	92.0000000000000000
10^{-20}	-6.0000000000000000	92.0000000000000000
10^{-15}	-6.0000000000000000	91.999999999999986
10^{-10}	-6.0000000000000000	92.0000000000000000
10^{-5}	-6.0000000000000000	91.999999997600000

Παρατηρήστε τη σταθερότητα τις τιμές των παραγώγων που υπολογίζονται ως αποτέλεσμα της ασήμαντης ευαισθησίας της σχέσης 8.7 ως προς την τιμή του ϵ . Επαναλαμβάνοντας τους ίδιους υπολογισμούς με το λογισμικό που υλοποιεί το σχήμα κεντρικής διαφύρισης, για τις ίδιες τιμές του ϵ , τα αποτελέσματα είναι αρκετά διαφορετικά όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα:

ϵ	$\partial F/\partial b_1$	$\partial F/\partial b_2$
10^{-30}	0.0000000000000000	0.0000000000000000
10^{-20}	0.0000000000000000	0.0000000000000000
10^{-15}	-7.105427357601001	92.370555648813010
10^{-10}	-5.999964969305438	92.000007612114132
10^{-5}	-6.000000000128124	92.000000003267232

Σε αντίθεση με πριν, συγκρατήστε την ενοχλητικά μεγάλη ευαισθησία στην τιμή του ϵ , άρα και την ανάγκη πολύ προσεκτικής επιλογής αυτής. Αυτή οφείλεται στο ότι ο υπολογισμός οφείλεται στην αφαίρεση δύο 'σχεδόν ίσων' ποσοτήτων.

Με την ολοκλήρωση της σύντομης αυτής παρουσίασης της χρήσης της θεωρίας μιγαδικών συναρτήσεων για τον υπολογισμό παραγώγων, αξίζει να υπενθυμίσουμε ακόμα ένα πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής. Ο υπολογισμός κάθε παραγώγου στοιχίζει μια μόνο κλήση της αντικειμενικής συνάρτησης αντί των δύο που απαιτεί το σχήμα κεντρικής διαφόρισης.

8.2 Γενική Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων

Ως εισαγωγή, η διατύπωση των συζυγών εξισώσεων, ή του **δυναμικού προβλήματος** όπως αυτό συχνά ονομάζεται, θα παρουσιασθεί γενικά, άσχετα με το ποιο μοντέλο ροής ή στόχος χρησιμοποιείται. Θα θεωρήσουμε ότι επιλύουμε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης μορφής (έστω αεροτομής), δηλαδή στόχος είναι ο σχεδιασμός της βέλτιστης αεροτομής σύμφωνα με ένα κριτήριο. Το κριτήριο αυτό λαμβάνει τη μορφή μιας αντικειμενικής συνάρτησης F η οποία πρέπει να ελαχιστοποιηθεί. Η συνάρτηση F είναι βαθμωτή, δηλαδή υπάρχει μόνο ένας στόχος (ή, αν είναι περισσότεροι, έχουν όλοι συνδυασθεί στη μορφή μιας συνάρτησης F , συνήθως ως γραμμικός τους συνδυασμός με χρήση συντελεστών βαρύτητας). Η αεροτομή που σχεδιάζεται παραμετροποιείται με πολυώνυμα Bézier–Bernstein και αυτή η επιλογή καθορίζει και τις μεταβλητές σχεδιασμού \vec{b} .

Η αντικειμενική συνάρτηση διατυπώνεται, γενικά, στη μορφή

$$F = F(\vec{U}, \vec{b}) \quad (8.8)$$

όπου \vec{U} είναι το διάνυσμα των μεταβλητών ροής. Η εξίσωση 8.8 εκφράζει την εξάρτηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης αφενός μεν από τη μορφή της αεροτομής (διάνυσμα \vec{b}), αφετέρου δε από το διαμορφούμενο πεδίο ροής (διάνυσμα \vec{U}). Πρακτικά, δηλαδή, κάθε αλλαγή τιμής των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} , τροποποιεί τη γεωμετρία της αεροτομής, διαμορφώνει διαφορετικό πεδίο ροής \vec{U} γύρω από αυτή και, με την μετεπεξεργασία (λ.χ. ολοκλήρωση, κλπ) στοιχείων του πεδίου ροής υπολογίζεται νέα τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Είναι σωστή, λοιπόν, και η διατύπωση $F = F(\vec{U}(\vec{b}), \vec{b})$. Τα \vec{b} και \vec{U} θα θεωρούνται διανύσματα στήλης.

Ας διατυπώσουμε μαθηματικά την προηγούμενη αλληλουχία αλλαγών: κάθε μεταβολή $\delta \vec{b}$ στο διάνυσμα \vec{b} , που αντιστοιχεί σε μικρή αλλαγή της μορφής της αεροτομής, προκαλεί μεταβολή δF της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης ίση με

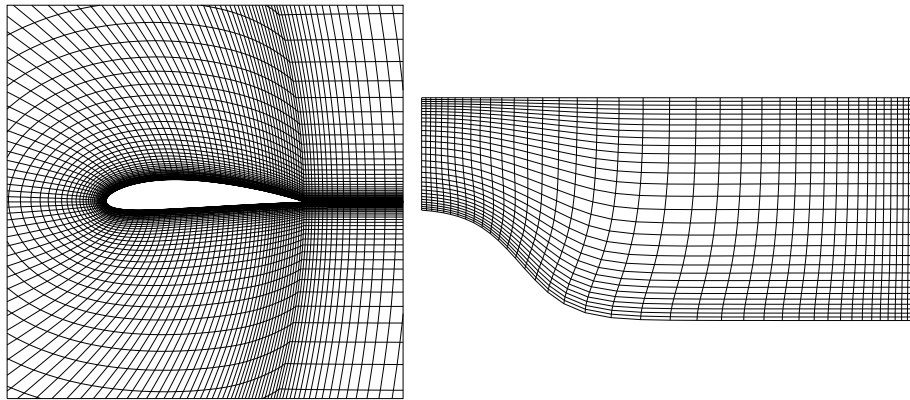
$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \quad (8.9)$$

όπου το διάνυσμα γραμμής $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}$ ακολουθεί τη γραφή 8.1 ενώ αντίστοιχο διάνυσμα γραμμής (γενικά διαφορετικής διάστασης) είναι και το $\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}$.

Η επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης, εύρεσης δηλαδή του ακρότατου της αντικειμενικής συνάρτησης F , ισοδυναμεί με εύρεση εκείνου του διανύσματος \vec{b} για το

οποίο $\delta F = \vec{0}$, τη γνωστή αναγκαία συνθήκη ύπαρξης ακρότατου (αν δεν επιβάλλονται περιορισμοί και ο χώρος αντίχνευσης το περιλαμβάνει).

Χωρίς να υπεισέλθουμε σε θέματα ΥΡΔ, μπορούμε να δώσουμε ορισμένα σχόλια για τις παραγώγους $\frac{\partial F}{\partial b}$ και $\frac{\partial F}{\partial U}$. Η διάσταση της πρώτης είναι N , όσες δηλαδή και οι μεταβλητές σχεδιασμού. Για τη διάσταση της δεύτερης χρειάζεται να γίνει σύντομη αναφορά στον τρόπο που χωρικά μοντελοποιείται το πεδίο ροής. Αυτό γίνεται με χρήση πλεγμάτων (λ.χ. δομημένων όπως αυτά που παρουσιάζονται στο σχήμα 8.2) όπου σε κάθε κόμβο (αυτό δεν είναι υποχρεωτικό σε όλες τις μεθόδους ΥΡΔ αλλά είναι το πιο απλό και γι' αυτό θα το υιοθετήσουμε) αποθηκεύονται οι τιμές των μεγεθών του πεδίου ροής. Έτσι, σε ένα πρόβλημα όπου το πλέγμα έχει 10000 κόμβους, οι άγνωστες ποσότητες ποσότητες για το πρόβλημα ροής είναι το γινόμενο του πλήθους αυτού με τον αριθμό των ανεξάρτητων ποσοτήτων ροής ανά κόμβο. Αυτές, για ένα διδιάστατο πρόβλημα συμπιεστού ρευστού είναι τέσσερις (η πυκνότητα, οι δύο συνιστώσες της ταχύτητας και μια ενεργειακή ποσότητα—κάθε άλλη ποσότητα, όπως η στατική πίεση υπολογίζεται από αυτές) όσες δηλαδή και οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που ικανοποιούνται (εξίσωση συνέχειας, οι δύο συνιστώσες της διανυσματικής εξίσωσης της ορμής και η εξίσωση της ενέργειας). Άρα, στο παράδειγμά μας, το διάνυσμα $\left[\frac{\partial F}{\partial U} \right]$ έχει $\kappa = 40000$ στοιχεία (ή, ορθότερα, 1000 blocks των 4 στοιχείων έκαστο).



Σχήμα 8.2: Ενδεικτικά πλέγματα, για την αριθμητική επίλυση διδιάστατων πεδίων ροής. Πρόκειται για πλέγματα δομημένου τύπου (structured grids). Τα συγκεκριμένα χρησιμοποιούνται για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής γύρω από μεμονωμένη αεροτομή (αριστερά, φαίνεται μόνο τμήμα του πλέγματος κοντά στην αεροτομή) και μέσα σε συμμετρικό διαχύτη (δεξιά, λόγω συμμετρίας της γεωμετρίας αλλά και της ροής, μελετάται μόνο το μισό χωρίο, αυτό που βρίσκεται κάτω της γραμμής συμμετρίας).

Στην εξίσωση 8.9 αναγνωρίζουμε τις δύο συμμετοχές στη μεταβολή τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη μεταβολή που οφείλεται στην αλλαγή του ροϊκού πεδίου που προκάλεσε η αλλαγή γεωμετρίας της αεροτομής. Ο δεύτερος όρος εκφράζει την απευθείας επίδραση της αλλαγής της γεωμετρίας στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης.

Οι εξισώσεις που διέπουν το πεδίο ροής (εξισώσεις Euler ή Navier–Stokes, ανάλογα

με το μοντέλο ροής που θα επιλεγεί) γράφονται, με τη συμβολική χρήση του τελεστή ροής \vec{R} , στη μορφή

$$\vec{R} = \vec{R}(\vec{U}, \vec{b}) = 0 \quad (8.10)$$

με το \vec{R} να αντιστοιχεί σε διάνυσμα στήλης με κ συνιστώσες. Όπως δείχθηκε με το προηγούμενο αριθμητικό παράδειγμα, σε ένα διακριτοποιημένο σε πλέγμα πεδίο ροής, το κ ισούται με το γινόμενο των κόμβων του πλέγματος επί τον αριθμό των μερικών διαφορικών εξισώσεων που διέπουν τη ροή. Γραμμικοποιώντας την 8.10 (για δεδομένη αεροτομή, άρα για δεδομένες τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b}) στη μορφή

$$\vec{R}(\vec{U}) + \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \delta \vec{U} = 0$$

προκύπτει η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης της ροής η οποία πρέπει να επιλυθεί

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \delta \vec{U} = -\vec{R}(\vec{U}) \quad (8.11)$$

Το μητρώο συντελεστών $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι συνάρτηση του \vec{U} .

Κάθε μεταβολή $\delta \vec{b}$ της μορφής της αεροτομής μεταβάλλει το πεδίο ροής γύρω της αλλά, αφού συνεχίζουν να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, ισχύει ότι

$$\delta \vec{R} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = 0 \quad (8.12)$$

όπου

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial b_1} & \frac{\partial R_1}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_1}{\partial b_N} \\ \frac{\partial R_2}{\partial b_1} & \frac{\partial R_2}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_2}{\partial b_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_1} & \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_N} \end{bmatrix} \quad (8.13)$$

και αντίστοιχα για το μητρώο $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]$.

Το διάνυσμα της μεταβολής $\delta \vec{R}$, διάστασης κ , πολλαπλασιάζεται με ένα διάνυσμα γραμμής $\vec{\Psi}^T$, ίσης διάστασης, και η βαθμωτή ποσότητα που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό αφαιρείται από τη μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης (εξίσωση 8.9). Το αν θα γίνει αφαίρεση ή πρόσθεση είναι αδιάφορο, αρκεί οι υπόλοιπες ενέργειες να είναι συμβατές. Η αφαίρεση (ή πρόσθεση) αυτή δεν αλλοιώνει το στόχο μας ο οποίος είναι η εύρεση του διανύσματος \vec{b} που μηδενίζει την κλίση δF (αναγκαία συνθήκη για ακρότατο της αντικειμενικής συνάρτησης), αφού η μεταβολή $\delta \vec{R}$ είναι μηδενική.

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

$$\delta F_{aug} = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} - \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \right) \quad (8.14)$$

ή

$$\delta F_{aug} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \delta \vec{U} + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (8.15)$$

Η κεντρική ιδέα της συζυγούς μεθόδου είναι να επιλεγεί το διάνυσμα $\vec{\Psi}$ έτσι ώστε να μηδενισθεί ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος της 8.15, να είναι δηλαδή

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (8.16)$$

Με την απαίτηση αυτή, η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης συναρτάται μόνο της μεταβολής του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού $\delta \vec{b}$ και όχι των επαγόμενων μεταβολών $\delta \vec{U}$ του πεδίου ροής.

Το πεδίο των $\vec{\Psi}$, το οποίο ονομάζεται πλέον των **συζυγών μεταβλητών**, (adjoint variables) προκύπτει από τη λύση της **συζυγούς εξίσωσης** (adjoint equation, προσέξτε είναι σύστημα εξισώσεων όπως σύστημα αποτελούσαν και οι εξισώσεις ροής)

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T \quad (8.17)$$

Παρατηρήστε ότι η εξίσωση 8.17 είναι γραμμική ως προς $\vec{\Psi}$, αφού το μητρώο-συντελεστής $\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \end{bmatrix}^T$ δεν συναρτάται του $\vec{\Psi}$.

Τέλος, από την εξίσωση 8.15 απομένει μόνο η ευθεία συσχέτιση της μεταβολής τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης με τη μεταβολή γεωμετρίας του ορίου $\delta \vec{b}$. Είναι, δηλαδή

$$\delta F_{aug} = \vec{G}^T \delta \vec{b} \quad (8.18)$$

με

$$\vec{G}^T = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (8.19)$$

Οι εξισώσεις 8.17 ως 8.19 είναι πλέον εύκολο να ενταχθούν σε μια διαδικασία σχεδιασμού βέλτιστης αεροδυναμικής μορφής η οποία βασίζεται στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης. Η επίλυση του συστήματος 8.17 υπολογίζει το πεδίο των συζυγών μεταβλητών $\vec{\Psi}$, το οποίο στη συνέχεια χρησιμοποιείται στις σχέσεις 8.18 και 8.19 ώστε να υπολογισθεί η παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις

μεταβλητές ελέγχου της μορφής της γεωμετρίας. Οι συζυγείς μεταβλητές $\vec{\Psi}$ ονομάζονται συχνά και **δυναμικές μεταβλητές** (dual variables), τονίζοντας έτσι τη δυναμικότητα που παρουσιάζουν ως προς τις μεταβλητές \vec{U} του πεδίου ροής.

Η παραπάνω διαδικασία διατύπωσης του προβλήματος, η οποία βασίσθηκε στον ορισμό της επαυξημένης αντικειμενικής συνάρτησης (που σχηματίσθηκε από τη διακριτή γραφή της αντικειμενικής συνάρτησης, τις διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής και τις κομβικές τιμές της συζυγούς μεταβλητής) και σε μαθηματικές πράξεις και εξισώσεις ώστε η μεταβολή αυτή να γίνει ανεξάρτητη κάθε μεταβολής ροϊκού μεγέθους και να συναρτάται μόνο μεταβολών της ίδιας της γεωμετρίας, προσδιορίζει τη λεγόμενη **διακριτή συζυγή μέθοδο** (discrete adjoint method).

Οι λόγοι που η συζυγής αυτή διατύπωση προσδιορίζεται επιπλέον ως διακριτή είναι (α) για να ξεχωρίσει από τη συνεχή συζυγή διατύπωση που θα ορίσουμε και θα χρησιμοποιήσουμε ιδιαίτερα στη συνέχεια και (β) για να τονίσει το ότι η βάση της όλης ανάπτυξης είναι διακριτοποιημένες εξισώσεις. Για παράδειγμα, η εξίσωση 8.11 είναι η διακριτή μορφή της 8.10, δηλαδή η εξίσωση 8.10 γραμμένη στους κόμβους. Το ίδιο ισχύει και για την εξίσωση 8.12. Εργαζόμενοι, δηλαδή με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, πρακτικά χειριζόμαστε τα αριθμητικά στοιχεία μητρώων συντελεστών, όπως το $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$ και διανύσματα κομβικών τιμών ποσοτήτων, όπως τα $\delta \vec{U}$ και $\delta \vec{b}$.

Με αφετηρία τις εξισώσεις 8.9 και 8.12 και απαλείφοντας το $\delta \vec{U}$, γράφουμε τη μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης ως

$$\delta F = \left(-\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (8.20)$$

Παρατηρούμε ότι η 8.20 είναι επαρκής ώστε να υπολογισθεί η μεταβολή δF για κάθε συνιστώσα μεταβολής $\delta \vec{b}$. Στην περίπτωση αυτή, η συζυγής μεταβλητή $\vec{\Psi}$ εμπλέκεται και πάλι με σκοπό να αποφύγουμε την αντιστροφή μητρώου της σχέσης 8.20. Ορίζοντας τις συζυγείς μεταβλητές με τη σχέση 8.17, η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης λαμβάνει και πάλι τη μορφή

$$\delta F_{aug} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (8.21)$$

δηλαδή τις ήδη γνωστές σχέσεις 8.18, 8.19. Η σχέση 8.21 υλοποιεί τελικά τη διακριτή συζυγή μέθοδο, δηλαδή τη συνδέει με μια μέθοδο ελαχιστοποίησης, όπως αυτή της απότομης καθόδου.

8.3 Διακριτή Συζυγής Μέθοδος και Υπολογιστικό Κόστος

Στην ενότητα αυτή θα αναλυθούν πολλά περισσότερα από όσα περιέχει ο σύντομος τίτλος της. Η παρουσίαση που ακολουθεί στηρίζεται, για εποπτικούς και μόνο λό-

γους, στη διακριτή συνεχή μέθοδο, η οποία θα παρουσιασθεί ‘ξανά’ για προβλήματα μιας και περισότερων της μιας μεταβλητών σχεδιασμού, πάντα για μονοκριτηριακή βελτιστοποίηση. Θα φανεί σε τι ακριβώς συνίσταται αυτό που ονομάζουμε **δυναμικό πρόβλημα** (dual problem), πως ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας αντικειμενικής συνάρτησης F (σχέση 8.8) μπορεί να λυθεί με την ευθεία ή τη συζυγή προσέγγιση και ποια από τις δύο προσεγγίσεις και πότε συμφέρει να χρησιμοποιηθεί.

Ως αφετηρία, επαναδιατυπώνεται η σχέση 8.9 ως

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \delta \vec{b} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (8.22)$$

με πλεονέκτημα ότι η νέα μορφή περιέχει ευθέως την παράγωγο $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, η οποία εκφράζει τη ‘διακριτή’ επίδραση των μεταβολών της γεωμετρίας \vec{b} στις τιμές των μεγεθών της ροής στους κόμβους ενός πλέγματος. Με βάση τους γενικούς συμβολισμούς που διέπουν αυτές τις σημειώσεις, όπου υπενθυμίζεται ότι N είναι το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού και κ το πλήθος των διακριτών ροϊκές ποσότητες που περιγράφουν το πεδίο ροής (λ.χ. οι τιμές των μεγεθών αυτών στους κόμβους του χρησιμοποιούμενου πλέγματος), τα διανύσματα ή μητρώα που εμπλέκονται στη σχέση 8.22 είναι σχηματικά:

$$\begin{array}{c} \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \dots & \square & \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow 1 \\ \leftarrow \kappa \rightarrow \\ \downarrow \end{array}, \quad \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \dots & \square & \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow 1 \\ \leftarrow N \rightarrow \\ \downarrow \end{array} \\ \\ \vec{b} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \vdots \\ \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow N \\ \downarrow 1 \end{array}, \quad \vec{U} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \vdots \\ \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \kappa \\ \downarrow 1 \end{array}, \quad \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \dots & \square & \square \\ \hline \dots & \square & \square \\ \hline \dots & \square & \square \\ \hline \dots & \square & \square \\ \hline \dots & \square & \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \kappa \\ \downarrow N \end{array} \end{array}$$

ενώ, βέβαια, η δF είναι βαθμωτή ποσότητα. Για την ουσιαστική κατανόηση, και για πραγματικά προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, είναι $\kappa \gg N$ και, μάλιστα, η διαφορά τους μπορεί να είναι αρκετές τάξεις μεγέθους.

Στη σχέση 8.22, η παράγωγος που αντιστοιχεί στην ευθεία εξάρτηση-ευαισθησία της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, δηλαδή η $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}$, υπολογίζεται άμεσα όταν είναι γνωστή η παραμετροποίηση. Για παράδειγμα, αν $F \equiv C_L \propto \int (p n_y \cos a - p n_x \sin a) ds \approx \sum_i (p n_y \cos a - p n_x \sin a) ds$ (a είναι η γωνία της επ’ άπειρο ροής), όπου η άθροιση γίνεται για όλα τα ευθύγραμμα τμήματα που ορίζονται από δύο διαδοχικούς κόμβους στο περίγραμμα μιας αεροτομής, αρκεί να βρεθούν οι παράγωγοι γεωμετρικών ποσοτήτων (των n_x, n_y, ds) ως προς \vec{b} , για το τρέχον πεδίο πιέσεων. Εξίσου εύκολος είναι και ο υπολογισμός της παραγωγού $\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}$. Το πραγματικό πρόβλημα ώστε να είναι πρακτικά χρήσιμη η σχέση 8.22 είναι να υπολογισθεί η παράγωγος $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$.

Ο υπολογισμός της τελευταίας γίνεται εφικτός χρησιμοποιώντας τη σχέση 8.12, η οποία εκφράζει ότι η διαμορφούμενη ροή μετά τη διακύμανση $\delta \vec{b}$ συνεχίζει να ικανοποιεί τις (γραμμικοποιημένες και με διακριτό τρόπο γραμμένες) εξισώσεις της ροής. Η 8.12 ξαναγράφεται στη μορφή

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = 0 \Rightarrow A \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = 0 \quad (8.23)$$

όπου το τετραγωνικό μητρώο A ορίζεται ως

$$A = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$$

Όπως και προηγουμένως, απεικονίζονται σχηματικά τα διανύσματα και μητρώα της σχέσης 8.23. Είναι:

$$A = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & & \dots & & \\ \hline & & & \dots & & \\ \hline & & & \dots & & \\ \hline & & & \vdots & & \\ \hline & & & \dots & & \\ \hline & & & \dots & & \\ \hline & & & \dots & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array}, \quad \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \vdots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline & \dots & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array}$$

← κ → ← N →

Ο συνδιασμός των σχέσεων 8.22 και 8.23 οδηγεί σε δύο τρόπους εργασίας ώστε να υπολογισθεί το δF ή, ισοδύναμα, το $\frac{dF}{d\vec{b}}$. Αυτοί είναι:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Είναι ο προφανής τρόπος εργασίας. Λόγω της 8.23, επιλύεται η ως προς ,

$$A \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} = -\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (8.24)$$

και οι τιμές του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ που υπολογίζονται αντικαθίστανται στην 8.22 ώστε να υπολογισθεί το δF .

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Ο δεύτερος τρόπος εργασίας, ο οποίος μας εισάγει και στην έννοια της δυαδικότητας, προκύπτει αρχικά με απαλοιφή του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ από την 8.22, η οποία έτσι γράφεται ως

$$\delta F = \left(\underbrace{-\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}}_{\vec{\Psi}^T} A^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b}$$

Η ποσότητα που υποσημειώνεται στην εξίσωση ορίζεται ως το δυαδικό ή συζυγές πεδίο $\vec{\Psi}$ (διάνυσμα στήλης διάστασης $\kappa \times 1$) και υπολογίζεται από την επίλυση της διακριτής συζυγούς εξίσωσης

$$A^T \vec{\Psi} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (8.25)$$

οπότε το δF προκύπτει ως

$$\delta F = \left(-\vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (8.26)$$

Ενδιαφέρουσα είναι η σύγκριση σε υπολογιστικό κόστος της ευθείας και της συζυγούς μεθόδου. Η σύγκριση αυτή ακολουθεί, αρχικά για πρόβλημα βελτιστοποίησης με μια μεταβλητή σχεδιασμού ($N = 1$) και, στη συνέχεια, για $N > 1$ μεταβλητές σχεδιασμού.

8.3.1 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N = 1$

Για μια μόνο μεταβλητή σχεδιασμού, το διάνυσμα \vec{b} εκφυλίζεται στη βαθμωτή ποσότητα b και οι δύο μέθοδοι επαναδιατυπώνονται ως:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Επιλύεται η εξίσωση 8.24, ή σχηματικά

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \vdots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array} \cdot \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \vdots \kappa \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline 1 \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ = \\ \\ \downarrow \\ 1 \\ \hline \end{array}$$

με υπολογιστικό κόστος αυτό της αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $\kappa \times \kappa$ εξισώσεων. Η αντικατάσταση του $\frac{dU}{db}$ στην 8.22, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc|ccc} \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \hline \leftarrow & \kappa & \rightarrow \end{array} \right] \updownarrow 1 \\ \cdot \\ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \kappa \\ \square \\ \square \\ \square \\ 1 \end{array} \updownarrow \\ + \begin{array}{c} \square \\ 1 \end{array} \end{array} \right] \begin{array}{c} \square \\ 1 \end{array}$$

στοιχίζει όσο το γινόμενο δύο διανυσμάτων, κόστος πρακτικά αμελητέο σε σχέση με την επίλυση του γραμμικού συστήματος.

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης 8.25 δίνεται σχηματικά ως

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cccc|ccc} \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \vdots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \end{array} \updownarrow \\ \cdot \\ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \kappa \\ \square \\ \square \\ \square \\ 1 \end{array} \updownarrow \\ = \\ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \kappa \\ \square \\ \square \\ \square \\ 1 \end{array} \updownarrow \end{array}$$

και έχει, όπως και η ευθεία μέθοδος το κόστος της αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $\kappa \times \kappa$ εξισώσεων. Η αντικατάσταση του $\vec{\Psi}$ στην 8.26, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc|ccc} \square & \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \hline \leftarrow & \kappa & \rightarrow \end{array} \right] \updownarrow 1 \\ \cdot \\ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \kappa \\ \square \\ \square \\ \square \\ 1 \end{array} \updownarrow \\ + \begin{array}{c} \square \\ 1 \end{array} \end{array} \right] \begin{array}{c} \square \\ 1 \end{array}$$

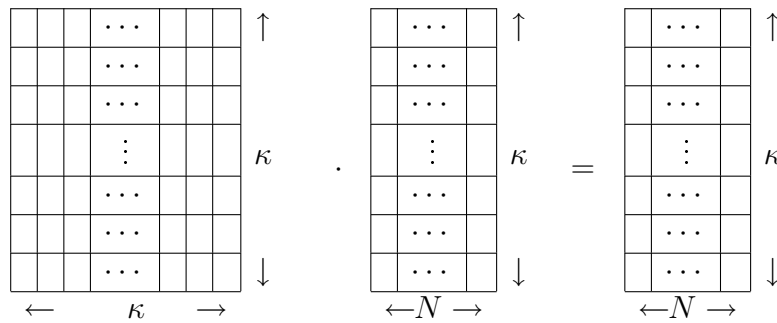
έχει, και πάλι, αμελητέο κόστος.

Το συμπέρασμα είναι ότι σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με μια μεταβλητή σχεδιασμού ($N = 1$), η χρήση είτε της ευθείας ή της συζυγούς μεθόδου έχει πρακτικά το ίδιο υπολογιστικό κόστος, άρα οποιαδήποτε επιλογή ανάμεσα στις δύο είναι αδιάφορη.

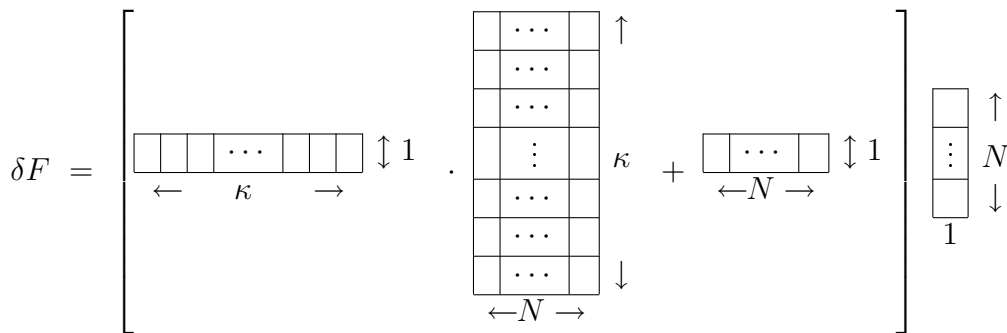
8.3.2 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N > 1$

Για περισσότερες της μιας μεταβλητές σχεδιασμού, ισχύουν τα παρακάτω:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Επιλύεται η εξίσωση 8.24, ή σχηματικά

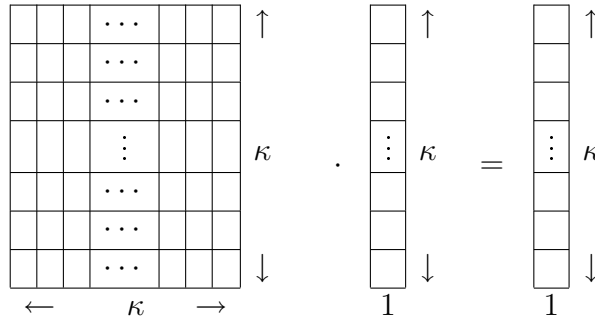


που ισοδυναμεί με την επίλυση N συστημάτων, με το ίδιο $\kappa \times \kappa$ μητρώο συντελεστών (αριστερό μέλος) και διαφορετικά δεξιά μέλη (κάθε στήλη του $-\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$). Κάθε τέτοια επίλυση θα δώσει τα στοιχεία μιας στήλης του $\frac{d\vec{U}}{db}$. Πρακτικά, απαιτείται ο υπολογισμός και αποθήκευση του A^{-1} και, αν αυτό είναι εφικτό (η αποθήκευση ολόκληρου του μητρώου για μεγάλες τιμές του κ είναι πιθανόν ασύμφορη ή και αδύνατη) το συνολικό κόστος θα επιβαρυνθεί με αυτό των N πολλαπλασιασμών μητρώου με διάνυσμα. Η αντικατάσταση του $\frac{d\vec{U}}{db}$ στην 8.22, πράξη που σχηματικά γράφεται ως



στοιχίζει όσο N γινόμενα διανυσμάτων, δηλαδή έχει συγκριτικά αμελητέο κόστος.

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης 8.25 απεικονίζεται σχηματικά, ακριβώς όπως και στην περίπτωση $N = 1$, ως



και έχει, σε αντίθεση με την ευθεία μέθοδο, κόστος μιας μόνο αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $k \times k$ εξισώσεων, **άσχετα με την τιμή του N** . Η αντικατάσταση του $\vec{\Psi}$ στην 8.26, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} \square & \square & \dots & \square \end{array} \right] \updownarrow 1 \\ \leftarrow \quad \kappa \quad \rightarrow \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \vdots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right] \updownarrow \kappa \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} \dots & \dots & \dots \end{array} \right] \updownarrow 1 \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \square \\ \vdots \\ \square \end{array} \right] \updownarrow N \\ 1 \end{array} \right]$$

έχει, και πάλι, αμελητέο κόστος.

Στην περίπτωση $N > 1$, συμπεραίνουμε ότι η χρήση της συζυγούς είναι περισσότερο συμφέρουσα σε υπολογιστικό κόστος από την ευθεία μέθοδο και, μάλιστα, το κέρδος αυξάνει όσο αυξάνει η τιμή του N .

8.4 Συνεχής Συζυγής Μέθοδος

Μέχρι τώρα γνωρίσαμε τη διακριτή συνεχή μέθοδο. Βασικό της γνώρισμα και ειδοποιός της διαφορά από τη συνεχή συζυγή μέθοδο που θα παρουσιασθεί στη συνέχεια είναι ότι πρώτα γραμμικοποιούμε (αν είναι μη-γραμμικές) και διακριτοποιούμε την αντικειμενική συνάρτηση και τις εξισώσεις ροής και στη συνέχεια παράγουμε την προς επίλυση συζυγή εξίσωση. Έτσι, η τελευταία προκύπτει σε μητρική γραφή και είναι έτοιμη προς αριθμητική επίλυση.

Η **συνεχής συζυγής μέθοδος** (continuous adjoint method) βασίζεται και αυτή στην επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση F_{aug} . Η διαφορά, όμως, είναι ότι η F_{aug} συντίθεται από την αναλυτική έκφραση της αντικειμενικής συνάρτησης (λ.χ. μια ολοκληρωματική ποσότητα, εννοείται πριν από τη διακριτοποίησή της) και από το ολοκλήρωμα (σε όλο το χωρίο) των εξισώσεων κατάστασης (εδώ, των εξισώσεων ροής)

πολλαπλασιασμένων με τη συνάρτηση των συζυγών μεταβλητών. Με το ίδιο σκεπτικό που ακολουθήθηκε και στη διακριτή μέθοδο (δηλαδή, να καταστεί η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης ανεξάρτητη κάθε μεταβολής μεγεθών της ροής) εντοπίζονται ποσότητες που πρέπει να μηδενισθούν και αυτό παράγει τις συζυγείς εξισώσεις και τις οριακές τους εξισώσεις. Αυτά είναι όμως σε αναλυτική γραφή και απαιτούν διακριτοποίηση. Άρα στη συνεχή συζυγή μέθοδο, η διακριτοποίηση ακολουθεί την παραγωγή της συζυγούς εξίσωσης, σε αντίθεση με τη διακριτή μέθοδο που η διακριτοποίηση προηγείται και έτσι οι συζυγείς εξισώσεις παράγονται απευθείας σε διακριτή μορφή.

Θα παρουσιάσουμε τη συνεχή συζυγή μέθοδο με ένα συγκεκριμένο μεν, σχετικά γενικό δε, παράδειγμα. Επιθυμούμε την ελαχιστοποίηση της F η οποία ορίζεται ως

$$F = \int_s DU ds \quad (8.27)$$

όπου D είναι ένας διαφορικός τελεστής, U οι μεταβλητές κατάστασης (είναι σημαντικό να διακρίνετε: U) και s το όριο του χωρίου επίλυσης. Η μεταβολή της F , η οποία αντιστοιχεί σε μεταβολή των μεταβλητών σχεδίασης \vec{b} γράφεται

$$\delta F = \int_s \delta(DU) ds + \int_s DU \delta(ds) \quad (8.28)$$

Το πρόβλημα ελαχιστοποίησης θα λυθεί με τον περιορισμό να ικανοποιούνται οι εξισώσεις κατάστασης (ροής), οι οποίες συμβολίζονται ως

$$\mathcal{L}U = f \quad (8.29)$$

όπου \mathcal{L} είναι ένας γραμμικός διαφορικός τελεστής. Το χωρικό ολοκλήρωμα της άμεσης μεταβολής (ονομάζουμε έτσι τον τελευταίο όρο της σχέσης 8.9, δηλαδή τον όρο $\frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b}$ που πραγματικά εξαρτάται άμεσα από μεταβολές του \vec{b}) των εξισώσεων κατάστασης (βλ. εξίσωση 8.8 αλλά και τα σχόλια που ακολούθησαν ώστε να προκύψει η σχέση 8.9), πολλαπλασιασμένο με τις συζυγείς μεταβλητές Ψ δίνει

$$\int_{\mathcal{U}} \Psi \frac{\partial}{\partial \vec{b}} (\mathcal{L}U - f) \delta \vec{b} d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} \Psi \mathcal{L} \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \right) d\mathcal{U} - \int_{\mathcal{U}} \Psi \frac{\partial f}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} d\mathcal{U} \quad (8.30)$$

όπου \mathcal{U} είναι το χωρίο ολοκλήρωσης με όριο το s . Η τμηματική ολοκλήρωση δίνει

$$\int_{\mathcal{U}} \Psi \mathcal{L} \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \right) d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} (\mathcal{L}^* \Psi) \frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} d\mathcal{U} + \int_s (\mathcal{E} \Psi) G \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \right) ds \quad (8.31)$$

Επειδή

$$\delta U = \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial U}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b}$$

η σχέση 8.30 μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\int_{\mathcal{U}} \Psi \frac{\partial}{\partial \vec{b}} (\mathcal{L}U - f) \delta \vec{b} d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_i \right) (\mathcal{L}^* \Psi) d\mathcal{U} \\ + \int_s (\mathcal{E}\Psi) G(\delta U) ds - \int_s (\mathcal{E}\Psi) \frac{\partial(GU)}{\partial x_i} \delta x_i ds - \int_{\mathcal{U}} \Psi \frac{\partial f}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} d\mathcal{U}$$

Με αντικατάσταση, η μεταβολή της επαυξημένης συνάρτησης γίνεται

$$\delta F_{aug} = \int_s \delta(DU) ds + \int_s DU \delta(ds) - \int_{\mathcal{U}} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_i \right) (\mathcal{L}^* \Psi) d\mathcal{U} \\ - \int_s (\mathcal{E}\Psi) G(\delta U) ds + \int_s (\mathcal{E}\Psi) \frac{\partial(GU)}{\partial x_i} \delta x_i ds + \int_{\mathcal{U}} \Psi \frac{\partial f}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} d\mathcal{U} \quad (8.32)$$

Στη βάση της εξίσωσης 8.32, ορίζεται η πεδιακή συζυγής εξίσωση ($\mathcal{L}^* \Psi = 0$), η οποία με τον τρόπο αυτό μηδενίζει το ολοκλήρωμα

$$\int_{\mathcal{U}} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_i \right) (\mathcal{L}^* \Psi) d\mathcal{U}$$

που περιέχει τις μεταβολές του U στο \mathcal{U} . Με όμοιο τρόπο, η απαλοιφή του ολοκληρώματος

$$\int_s \delta(DU) ds - \int_s (\mathcal{E}\Psi) G(\delta U) ds$$

της εξίσωσης 8.32 παράγει τις οριακές συνθήκες για το Ψ . Οι όροι οι οποίοι απομένουν στην εξίσωση 8.32 αντιστοιχούν σε μεταβολές του F οι οποίες συσχετίζονται άμεσα με τις μεταβολές $\delta \vec{b}$ και εκφράζουν, τελικά τη ζητούμενη παράγωγη που θα υποστηρίξει λ.χ. μια μέθοδο καθόδου.

Δεν αποτελεί σκοπό του κεφαλαίου αυτού να υπεισέλθει σε θέματα σύγκρισης συνεχούς και διακριτής συζυγούς μεθόδου. Βλέποντας πολύ γενικά τη σύγκριση αυτή, αρκεί να παρατηρήσουμε απλά ότι διατυπώνοντας τη συνεχή συζυγή μέθοδο έχουμε πάντα καλύτερη κατανόηση (φυσική σημασία) του συζυγούς προβλήματος. Αυτός είναι και ένας από τους λόγους που στη συνέχεια θα ασχοληθούμε, σχεδόν αποκλειστικά, με τη συνεχή συζυγή μέθοδο. Ο δεύτερος συναφής λόγος είναι ότι, εδώ, δεν ασχολούμαστε με τη διακριτοποίηση των εξισώσεων, άρα δεν είναι εύκολο να ασχοληθούμε σε βάθος με τη διακριτή μέθοδο.

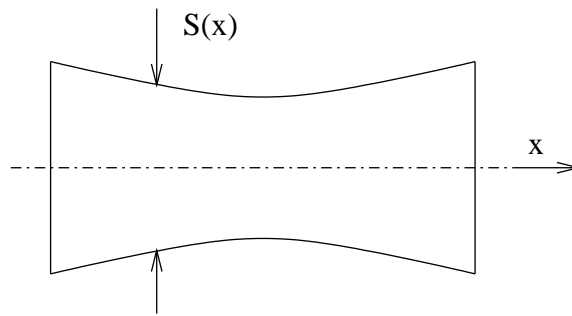
8.5 Ψευδο-1Δ Αντίστροφος Σχεδιασμός Αγωγού— Συζυγής Διατύπωση

Στην ενότητα αυτή θα εξειδικεύσουμε τη συζυγή μέθοδο και θα επιλύσουμε με αυτή ένα απλό πρόβλημα: αυτό του αντίστροφου σχεδιασμού ενός αγωγού, του οποίου έχει

τεθεί ως στόχος συγκεκριμένη κατανομή πίεσης κατά το μήκος του, χρησιμοποιώντας το μοντέλο της λεγόμενης (ψευδο)-μονοδιάστατης ροής.

Το ρευστό είναι ατριβές και η ροή συμπιεστή-υποηχητική. Το μέσο είναι ο αέρας, λογιζόμενος ως τέλειο αέριο.

Η εφαρμογή θα μπορούσε να αποτελεί το προκαταρκτικό στάδιο σχεδιασμού αγωγών (διαχυτών και ακροφυσίων), με τη θεωρήση ότι η ροή μεταβάλλεται μόνο κατά την αξονική κατεύθυνση. Ο σχεδιασμός αφορά την εύρεση της κατανομής της διατομής $S(x)$ του αγωγού κατά την αξονική κατεύθυνση, σχήμα 8.3, η οποία επιφέρει επιθυμητή κατανομή πίεσης $p_{tar}(x)$ κατά μήκος του. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, οι διατομές εισόδου και εξόδου του αγωγού θεωρούνται δεδομένες.



Σχήμα 8.3: Μορφή συγκλίνοντος-αποκλίνοντος αγωγού, με μεταβλητές σχεδιασμού γεωμετρικές ποσότητες που καθορίζουν τη μορφή τη διατομή $S(x)$ κατά την αξονική κατεύθυνση.

Επιπλέον δεδομένα του προβλήματος είναι η ολική πίεση $p_{t,in}$ και η ολική θερμοκρασία $T_{t,in}$ στη διατομή εισόδου (δείκτης *in*) καθώς και η στατική πίεση p_{out} στην έξοδο. Η ροή είναι ισεντροπική και άεργη, άρα τα ολικά μεγέθη $p_{t,in}$ και $T_{t,in}$ παραμένουν σταθερά σε κάθε διατομή $S(x)$, συμπεριλαμβανομένης της εξόδου. Προφανής έλεγχος συμβατότητας μεταξύ των δεδομένων της ροής και της κατανομής πίεσης $p_{tar}(x)$ είναι η ταύτιση τιμών τους στην έξοδο του αγωγού.

Πρακτικά, το ψευδο-μονοδιάστατο πρόβλημα ροής επιλύεται εύκολα χωρίς αναγκαστικά να χρησιμοποιηθούν συζυγείς διατυπώσεις. Είναι γνωστό ότι στη διατομή $S = S(x)$, στην οποία η ροή ενός τέλειου αερίου (γ, R) διέρχεται κάθετα, σε ολικές συνθήκες (p_t, T_t) , η παροχή μάζας εκφράζεται ως

$$\dot{m} = Sp_t \sqrt{\frac{\gamma}{RT_t}} M \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right)^{-\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (8.33)$$

ή, χρησιμοποιώντας την τοπική ταχύτητα u αντί του τοπικού αριθμού Mach, ως

$$\dot{m} = Su \frac{p_t}{RT_t} \left(1 - \frac{u^2}{2C_p T_t} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (8.34)$$

Οι εξισώσεις 8.33 και 8.34 επιλύονται ως προς τον αριθμό Mach M ή την ταχύτητα u σε κάθε θέση επαναληπτικά (αλγόριθμος σταθερού σημείου), με το σχήμα (αν η ροή είναι υποηχητική)

$$M = Z_M \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (8.35)$$

όπου

$$Z_M = \frac{\dot{m}}{Sp_t} \sqrt{\frac{RT_t}{\gamma}} \quad (8.36)$$

ή το σχήμα

$$u = Z_u \left(1 - \frac{1}{2C_p T_t} u^2 \right)^{-\frac{1}{\gamma-1}} \quad (8.37)$$

όπου

$$Z_u = \frac{\dot{m}RT_t}{p_t S} \quad (8.38)$$

Η παραμετροποίηση της κατανομής $S(x)$ γίνεται με οποιαδήποτε συνάρτηση παρεμβολής ή προσέγγισης και εισάγει τις ελεύθερες μεταβλητές, οι οποίες εμπεριέχονται στο διάνυσμα \vec{b} , διάστασης N . Προσέξτε ότι η συνάρτηση αυτή διέπει τη διατομή $S(x)$ και όχι την εκ περιστροφής επιφάνεια που σχηματίζει τον αγωγό.

Παρά τη φαινομενική απλότητά του, το 1Δ πρόβλημα που θα επιλύσουμε έχει μια πολύ σημαντική διαφορά από τα 2Δ ή 3Δ προβλήματα. Η διαφορά είναι ότι σε ένα μονοδιάστατο πρόβλημα, οι εξισώσεις ροής και ο στόχος ορίζονται στον ίδιο χώρο (κατά το μήκος x του αγωγού). Δεν συμβαίνει το ίδιο κατά το σχεδιασμό μιας αεροτομής (2Δ πρόβλημα), όπου οι μεν εξισώσεις ροής ισχύουν στο χώρο που περιβάλλει την αεροτομή (2Δ χωρίο) ο δε στόχος –κατανομή πίεσης ορίζεται μονοδιάστατα κατά το περίγραμμά της.

8.5.1 Εξισώσεις Ροής και Αριθμητική Επίλυση

Για το ψευδο-μονοδιάστατο πρόβλημα διατυπώνονται οι εξισώσεις ροής (εξισώσεις Euler) ως

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u S)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)S}{\partial x} &= p \frac{dS}{dx} \\ \frac{\partial(\rho E S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h_t S)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (8.39)$$

και επαναδιατυπώνονται σε συντηρητική διανυσματική μορφή, ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = \vec{q} \quad (8.40)$$

όπου $\vec{U} = [\rho \quad \rho u \quad \rho E]^T$ είναι το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, u η ταχύτητα, $h_t = C_p T_t$ η ολική ενθαλπία, T_t η ολική θερμοκρασία και E είναι η ολική ενέργεια του ρευστού ανά μονάδα μάζας. Η διανυσματική γραφή διευκολύνει τη διατύπωση των εξισώσεων διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας με ενιαίο τρόπο.

Στην εξίσωση 8.40, ο χρονικός όρος παραμένει (έστω και αν η ροή θεωρείται χρονικά μόνιμη) ώστε να εκμεταλλευτούμε τις ιδιότητες των υπερβολικών συστημάτων και να εφαρμόσουμε **τεχνικές χρονοπροέλασης** (time-marching) για την επίλυση του πεδίου ροής. Με τη μέθοδο της χρονοπροέλασης, η λύση του χρονικά μόνιμου πεδίου προκύπτει ως η ασυμπτωτική στο χρόνο λύση που δέχονται οι χρονικά μη-μόνιμες εξισώσεις ροής, επιλυόμενες με χρονικά μόνιμες οριακές συνθήκες. Χαρακτηριστικό τους είναι ότι εκμεταλλεύονται το ότι το σύστημα 8.40 είναι υπερβολικό στο χωρο-χρόνο, με πραγματικές ιδιοτιμές που εκφράζουν, σε κάθε θέση, την ταχύτητα της πληροφορίας που διατρέχει τον αγωγό.

Το διάνυσμα της ατριβούς ροής \vec{f} και ο μη-ομογενής όρος \vec{q} των εξισώσεων που οφείλεται στη μεταβολή της διατομής κατά την αξονική κατεύθυνση δίνονται από τις σχέσεις

$$\vec{f} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \vec{q} = -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad (8.41)$$

Τέλος, χρήσιμες –βοηθητικές σχέσεις από τη θερμοδυναμική των τελείων αερίων, για χρήση κατά την περαιτέρω επεξεργασία της σχέσης 8.40 είναι οι

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (8.42)$$

$$E = h_t - \frac{p}{\rho} \quad (8.43)$$

$$\rho E = \frac{\rho c^2}{\gamma(\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (8.44)$$

$$p = (\gamma - 1)\rho e = (\gamma - 1) \left(\rho E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right) \quad (8.45)$$

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

Οι εξισώσεις ροής 8.40 ξαναγράφονται ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} = \vec{q} \quad (8.46)$$

όπου A είναι η Ιακωβιανή ορίζουσα

$$A = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}u^2 & (3-\gamma)u & \gamma-1 \\ -\gamma u E + (\gamma-1)u^3 & \gamma E - \frac{\gamma-1}{2}3u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \quad (8.47)$$

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

Σε **υποηχητική ροή**, κατευθυνόμενη κατά τα αύξοντα x , σχήμα 8.3, και σε κάθε θέση x του αγωγού, οι τρεις ιδιοτιμές έχουν γνωστό πρόσημο. Δύο από αυτές είναι θετικές (οι λ_1 και λ_2) και η τρίτη (λ_3 , αφού $u < c$) είναι αρνητική. Μπορεί να δειχθεί (η απόδειξη ξεφεύγει από τα όρια του μαθήματος) ότι οι προσημασμένες ιδιοτιμές καθορίζουν και τις οριακές συνθήκες του ευθέως προβλήματος Έτσι, ορίζονται δύο μεγέθη στην είσοδο (ολική πίεση και ολική θερμοκρασία, που μαζί καθορίζουν το ενεργειακό επίπεδο του εισερχόμενου ρευστού) ενώ το τρίτο μεταφέρεται εκεί από το εσωτερικό του αγωγού μέσω της λ_3 (επηρεάζεται, δηλαδή, από τις συνθήκες εξόδου, μέσω πληροφορίας η οποία 'ταξιδεύει' στο διαμορφούμενο πεδίο ροής). Επίσης, ένα μέγεθος, η στατική πίεση, επιβάλλεται στην έξοδο και τα άλλα δύο μεταφέρονται εκεί από το εσωτερικό (με τις ιδιοτιμές λ_1 και λ_2) και, με τον τρόπο αυτό η ροή στην έξοδο 'αισθάνεται' την επίδραση των συνθηκών εισόδου. Το πρόσημο των ιδιοτιμών καθορίζει και τα αριθμητικά σχήματα που απαιτούνται για τη χρονική και χωρική διακριτοποίηση του συστήματος εξισώσεων 8.40.

Γενικά, σε ότι ακολουθεί, θα συμβολίζουμε

$$\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial U_1} & \frac{\partial f_1}{\partial U_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial U_\kappa} \\ \frac{\partial f_2}{\partial U_1} & \frac{\partial f_2}{\partial U_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial U_\kappa} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_\kappa}{\partial U_1} & \frac{\partial f_\kappa}{\partial U_2} & \cdots & \frac{\partial f_\kappa}{\partial U_\kappa} \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{U}} = [\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_\kappa] \quad (8.48)$$

Στο σημείο αυτό, έχουν διατυπωθεί και μπορούν να επιλυθούν (αριθμητικά, με τη βοήθεια της ΥΡΔ) οι εξισώσεις ροής, δηλαδή να υπολογισθεί το πεδίο ροής, άρα και η κατανομή πίεσης $p(x)$, κατά μήκος του αγωγού, αρκεί να είναι δεδομένη η διατομή $S(x)$ αυτού. Αυτό είναι το λεγόμενο **ευθύ πρόβλημα** (direct problem).

8.5.2 Διατύπωση του Συζυγούς Προβλήματος

Η διατύπωση του συζυγούς προβλήματος, για επιθυμητή κατανομή πίεσης $p_{tar} = p_{tar}(x)$, γίνεται γράφοντας την αντικειμενική συνάρτηση (πρόβλημα ελαχιστοποίησης) ως

$$F(\vec{U}, \vec{b}) = \frac{1}{2} \int_L (p(x) - p_{tar}(x))^2 dx \quad (8.49)$$

Η ολοκλήρωση γίνεται σε όλο το μήκος L του αγωγού, το οποίο είναι γνωστό και σταθερό. Η μεταβολή (διακύμανση) της αντικειμενικής συνάρτησης γράφεται

$$\begin{aligned}\delta F(\vec{U}, \vec{b}) &= \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = \\ &= \int_L (p - p_{tar}) \frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} dx + \frac{1}{2} \int_L (p - p_{tar})^2 \delta(dx) \quad (8.50)\end{aligned}$$

όπου, σύμφωνα με τη σχέση 8.45

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} = (\gamma - 1) \begin{bmatrix} \frac{1}{2} u^2 & -u & 1 \end{bmatrix} \quad (8.51)$$

Σύμφωνα με όσα παρουσιάστηκαν στην ενότητα 8.2, εισάγοντας τις συζυγείς μεταβλητές $\vec{\Psi}$, η μεταβολή της επαυξημένης αντικειμενικής συνάρτησης F_{aug} γράφεται

$$\begin{aligned}\delta F_{aug} &= \delta F - \int_L \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - \delta \vec{q} \right) dx \\ &= \delta F - \int_L \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - T_U \delta \vec{U} - T_b \delta \vec{b} \right) dx \quad (8.52)\end{aligned}$$

όπου παραλείφθηκε ο (ψευδο)χρονικός όρος των εξισώσεων ροής. Επίσης, χρησιμοποιήθηκε ο όρος $\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x}$ αντί του $\delta \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} \right)$. Σε 1Δ προβλήματα, με τις υπόλοιπες παραδοχές που γίνονται εδώ, οι δύο αυτοί όροι είναι ίσοι (βλ. επόμενα). Αργότερα, σε εφαρμογές 2Δ ροών (όπου οι δύο αυτοί όροι δεν είναι ίσοι), θα ασχοληθούμε περισσότερο με τη διαφορά μεταξύ τους. Ο μη-ομογενής όρος αναπτύχθηκε ως

$$\delta \vec{q} = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = T_U \delta \vec{U} + T_b \delta \vec{b} \quad (8.53)$$

με το μητρώο $T_b = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{b}}$ να εξαρτάται από την εκάστοτε γεωμετρική παραμετροποίηση της κατανομής της διατομής $S(x)$ ενώ το μητρώο T_U υπολογίζεται αναλυτικά (με βάση τη σχέση 8.41) ως

$$T_U = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \vec{U}} = -\frac{1}{S} \frac{dS}{dx} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 \\ -\gamma u E + (\gamma - 1)u^3 & \gamma E - \frac{\gamma-1}{2} 3u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \quad (8.54)$$

Η πρώτος όρος στο δεξιό μέλος της 8.52, ο οποίος αντιστοιχεί στη μεταβολή της πραγματικής αντικειμενικής συνάρτησης, έχει ήδη αναλυθεί στη σχέση 8.50. Ο

δεύτερος όρος, ο οποίος εκφράζει τον περιορισμό του να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, αναπτύσσεται με ολοκλήρωση κατά παράγοντες, ως

$$\begin{aligned}
& \int_L \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial(\delta \vec{f})}{\partial x} - T_U \delta \vec{U} - T_b \delta \vec{b} \right) dx = \\
& = \int_L \left(\frac{\partial(\vec{\Psi}^T \delta \vec{f})}{\partial x} - \delta \vec{f}^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x} - \vec{\Psi}^T T_U \delta \vec{U} - \vec{\Psi}^T T_b \delta \vec{b} \right) dx = \\
& = \left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{out} - \left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in} - \int_L \left(\delta \vec{U}^T A^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x} + \vec{\Psi}^T T_U \delta \vec{U} + \vec{\Psi}^T T_b \delta \vec{b} \right) dx
\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήθηκε ότι $\vec{f} = A\vec{U}$ και $\delta \vec{f} = A\delta \vec{U}$. Η δεύτερη σχέση είναι προσεγγιστική και ισχύει με την παραδοχή $\delta A = 0$.

Εισάγοντας την τελευταία σχέση μαζί με τη 8.50 στην εξίσωση 8.52 προκύπτει ότι

$$\begin{aligned}
\delta F_{aug} & = \int_L (p - p_{tar}) \frac{\partial p}{\partial U} \delta \vec{U} dx + \frac{1}{2} \int_L (p - p_{tar})^2 \delta(dx) \\
& - \left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{out} + \left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in} \\
& + \int_L \left(\delta \vec{U}^T A^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x} + \vec{\Psi}^T T_U \delta \vec{U} + \vec{\Psi}^T T_b \delta \vec{b} \right) dx \quad (8.55)
\end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned}
\delta F_{aug} & = \underbrace{\int_L \delta \vec{U}^T \left[(p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T + A^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x} + T_U^T \vec{\Psi} \right]}_{AE} dx \\
& - \underbrace{\left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{out} + \left[\vec{\Psi}^T A \delta \vec{U} \right]_{in}}_{AEBC} \\
& + \underbrace{\frac{1}{2} \int_L (p - p_{tar})^2 \delta dx + \int_L \vec{\Psi}^T T_b \delta \vec{b} dx}_{SD} \quad (8.56)
\end{aligned}$$

Η 8.56 είναι η βασική εξίσωση η οποία περιέχει οτιδήποτε απαιτείται για τη διατύπωση του συζυγούς προβλήματος. Συμβολικά, σημειώνεται η συμμετοχή κάθε όρου της εξίσωσης. Έτσι:

- Όροι σημειούμενοι με *AE* (Adjoint Equation) δίνουν τη συζυγή εξίσωση, εκείνη δηλαδή που αν διατυπωθεί και ικανοποιηθεί, απαλείφει όλους τους όρους της 8.56 που περιέχουν την ποσότητα $\delta \vec{U}$. Ικανοποιώντας τη συζυγή εξίσωση, η μεταβολή της τιμής της (επαυξημένης) αντικειμενικής συνάρτησης γίνεται ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta \vec{U}$ του πεδίου ροής.

- Όροι σημειούμενοι με *AEBC* (Adjoint Equation Boundary Conditions) δίνουν τις οριακές συνθήκες της συζυγούς εξίσωσης. Με την επιβολή τους, η μεταβολή της τιμής της (επαυξημένης) αντικειμενικής συνάρτησης γίνεται ανεξάρτητη οποιασδήποτε μεταβολής $\delta \vec{U}$ στα όρια του πεδίου.
- Όροι σημειούμενοι με *SD* (Sensitivity Derivatives) είναι αυτοί οι οποίοι απομένουν μετά την ικανοποίηση της συζυγούς εξίσωσης και των οριακών της συνθηκών. Χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές ελέγχου, μετά ασφαλώς τον υπολογισμό της κατανομής των συζυγών μεταβλητών $\vec{\Psi}$. Το πρώτο από τα δύο ολοκληρώματα του όρου αυτού συναρτάται της μεταβολής $\delta(dx)$. Υπό προϋποθέσεις σχετιζόμενες με την παραμετροποίηση του σχήματος (βλ. περισσότερα σε επόμενη ενότητα) είναι $\delta(dx) = 0$ και ο πρώτος από τους δύο όρους παραλείπεται.

Οι Συζυγείς Εξισώσεις

Όπως ήδη αναφέρθηκε, στην εξίσωση 8.56, η απαλοιφή όλων των όρων που περιέχουν τη διαταραχή του διανύσματος των συντηρητικών μεταβλητών $\delta \vec{U}$, καθιστούν τη διαταραχή του επαυξημένου συναρτησιακού κόστους ανεξάρτητη της διαταραχής των ποσοτήτων ροής. Στη βάση της ίδιας λογικής, διατυπώνονται η συζυγής εξίσωση και οι οριακές συνθήκες για τις συζυγείς μεταβλητές (όροι *AE* και *AEBC*, αντίστοιχα). Από τον αντίστοιχο όρο της εξίσωσης 8.56 γίνεται εμφανές ότι η συζυγής εξίσωση είναι μια διανυσματική εξίσωση, δηλαδή ένα σύστημα τριών μερικών διαφορικών εξισώσεων (όσες και οι εξισώσεις ροής), με αγνώστους τα Ψ_1 , Ψ_2 και Ψ_3 σε κάθε κόμβο. Συνεπώς, το σύστημα των μερικών διαφορικών εξισώσεων για τις συζυγείς μεταβλητές, αφού σ' αυτό προστεθεί χρονικός όρος για τη διατύπωση ενός χωρο-χρονικά υπερβολικού προβλήματος, γράφεται

$$\frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t} - \left(A^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x} + T_U^T \vec{\Psi} + (p - p_{tar}) \left(\frac{\partial p}{\partial \vec{U}} \right)^T \right) = 0 \quad (8.57)$$

Το γραμμικό σύστημα 8.57 που διέπει τις συζυγείς μεταβλητές έχει πραγματικές ιδιοτιμές, ίσες ή αντίθετες με εκείνες του προβλήματος ροής. Δίνεται ιδιαίτερη σημασία στο ότι το σύστημα είναι γραμμικό: οι συντελεστές A^T και T^T δεν συναρτώνται του $\vec{\Psi}$. Μια λίγο περισσότερο 'προχωρημένη' παρατήρηση αφορά το πρόσημο με το οποίο προστέθηκε ο χρονικός όρος.

Οριακές Συνθήκες για τις Συζυγείς Εξισώσεις

Οι οριακές συνθήκες που επιβάλλονται στις εξισώσεις 8.57 προέρχονται από τους όρους της 8.56 που σημειώνονται με *AEBC* και (σε ανάστροφη γραφή) είναι

$$\delta \vec{U}^T A^T \vec{\Psi} = 0 \quad (8.58)$$

Η διαχείριση της σχέσης 8.58 γίνεται με διαφορετικό τρόπο στην είσοδο και έξοδο του πεδίου ροής, αφού σε αυτά επιβάλλονται διαφορετικές συνθήκες ροής. Η ανάπτυξη της 8.58 είναι, ασφαλώς, κοινή για την είσοδο και την έξοδο και δίνει

$$[\delta\rho \quad \delta(\rho u) \quad \delta(\rho E)] \begin{bmatrix} 0 & \frac{\gamma-3}{2}u^2 & -\gamma u E + (\gamma-1)u^3 \\ 1 & (3-\gamma)u & \gamma E - \frac{\gamma-1}{2}3u^2 \\ 0 & \gamma-1 & \gamma u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{bmatrix} = 0$$

ή

$$[\delta\rho \quad \delta(\rho u) \quad \delta(\rho E)] \begin{bmatrix} \frac{\gamma-3}{2}u^2\Psi_2 + (-\gamma u E + (\gamma-1)u^3)\Psi_3 \\ \Psi_1 + (3-\gamma)u\Psi_2 + (\gamma E - \frac{\gamma-1}{2}3u^2)\Psi_3 \\ (\gamma-1)\Psi_2 + \gamma u\Psi_3 \end{bmatrix} = 0$$

ή, ακόμη,

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\gamma-3}{2}u^2\Psi_2 + (-\gamma u E + (\gamma-1)u^3)\Psi_3 \right] \delta\rho + \\ & \left[\Psi_1 + (3-\gamma)u\Psi_2 + \left(\gamma E - \frac{\gamma-1}{2}3u^2 \right) \Psi_3 \right] \delta(\rho u) + \\ & [(\gamma-1)\Psi_2 + \gamma u\Psi_3] \delta(\rho E) = 0 \end{aligned} \quad (8.59)$$

Στην **είσοδο**, όπου επιβάλλονται σταθερές τιμές στα ολικά θερμοδυναμικά μεγέθη της ροής (p_t και T_t), διαφορίζοντας τις σχέσεις ισεντροπικής μεταβολής, προκύπτουν οι συσχετίσεις μεταβολών

$$\delta p = -\rho u \delta u \quad (8.60)$$

$$\delta \rho = -\frac{\rho u}{c^2} \delta u \quad (8.61)$$

Η απόδειξη της 8.60 προκύπτει από την ισεντροπική σχέση

$$p = p_t \left(\frac{T}{T_t} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} = p_t \left(1 - \frac{u^2}{2C_p T_t} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$$

η οποία είναι σχέση της μορφής $p = p(u)$ και συνεπώς $\delta p = \frac{\partial p}{\partial u} \delta u$ (εκτελέστε την παραγωγή). Η απόδειξη της 8.61 προκύπτει από το ότι στην είσοδο η ολική θερμοκρασία είναι σταθερή, άρα

$$\delta T_t = \delta \left(T + \frac{u^2}{2C_p} \right) = 0 \Rightarrow \delta T = -\frac{u}{C_p} \delta u$$

και την ταυτόχρονη χρήση της διακύμανσης της καταστατικής εξίσωσης

$$\delta \rho = \delta \left(\frac{p}{RT} \right) = \frac{1}{RT} \delta p - \frac{p}{RT^2} \delta T$$

Στις σχέσεις 8.60 και 8.61 επισημαίνεται η συσχέτιση των μεταβολών πίεσης και πυκνότητας με τη μεταβολή μιας μόνο ποσότητας, της ταχύτητας εισόδου στον αγωγό. Από τις σχέσεις αυτές, προκύπτουν οι μεταβολές της δεύτερης και τρίτης συντηρητικής μεταβλητής των εξισώσεων ροής, ως

$$\delta(\rho u) = u \delta \rho + \rho \delta u = \rho \left[1 - \frac{u^2}{c^2} \right] \delta u \quad (8.62)$$

$$\delta(\rho E) = \frac{\delta p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \delta(\rho u^2) = \rho u \left[\frac{\gamma - 2}{\gamma - 1} - \frac{1}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \delta u \quad (8.63)$$

Με αντικατάσταση όλων αυτών των σχέσεων για τις μεταβολές των ποσοτήτων ροής στη σχέση 8.59, η τελευταία παίρνει για την είσοδο της ροής στον αγωγό (όπου η ροή θεωρείται υποηχητική) τη μορφή

$$\rho \left[1 - \frac{u^2}{c^2} \right] \Psi_1 + \rho u \left[1 - \frac{u^2}{c^2} \right] \Psi_2 + \rho u^2 \left[-\frac{u^2}{2c^2} + \frac{\gamma - 3}{2(\gamma - 1)} + \frac{1}{\gamma - 1} \frac{c^2}{u^2} \right] \Psi_3 = 0 \quad (8.64)$$

Πρόκειται για αλγεβρική σχέση-περιορισμό που διέπει τις τρεις συνιστώσες του $\vec{\Psi}$ στον κόμβο εισόδου του αγωγού. Η υλοποίηση της σχέσης 8.64 προϋποθέτει την παρεκβολή από το εσωτερικό του πεδίου δύο εκ των τριών συνιστωσών του $\vec{\Psi}$ (μέσω χαρακτηριστικών που κατευθύνονται στα ανάντι της ροής) και, στη συνέχεια, τον υπολογισμό της τρίτης συνιστώσας από τη σχέση 8.64. Αναλογιζόμενοι το τι ισχύει για τις εξισώσεις ροής στη θέση της (υποηχητικής) εισόδου, καταλήγουμε στο ότι το συζυγές πρόβλημα πρέπει στην είσοδο να έχει χαρακτηριστικές αντίθετου προσήμου από ότι οι εξισώσεις της ροής (βλ. προηγούμενη παρατήρηση για το πρόσημο του ψευδοχρονικού όρου).

Η διατύπωση των οριακών συνθηκών για την **έξοδο** του πεδίου ροής ακολουθεί αντίστοιχη διαδικασία. Η εκεί επιβαλλόμενη σταθερή τιμή της στατικής πίεσης ισοδυναμεί με $\delta p = 0$. Έτσι, από τη σχέση 8.45, προκύπτει ότι

$$\delta p = (\gamma - 1) \left(\delta(\rho E) - u \delta(\rho u) + \frac{1}{2} u^2 \delta \rho \right) = 0 \quad (8.65)$$

και συνεπώς

$$\delta(\rho E) = u \delta(\rho u) - \frac{1}{2} u^2 \delta \rho \quad (8.66)$$

Με αντικατάσταση στην 8.59, προκύπτει ότι

$$\left[-u^2\Psi_2 + \left[-\gamma u E + \frac{\gamma - 2}{2}u^3 \right] \Psi_3 \right] \delta\rho + \left[\Psi_1 + 2u\Psi_2 + \left[\gamma E - \frac{\gamma - 3}{2}u^2 \right] \Psi_3 \right] \delta(\rho u) = 0$$

η οποία επιβάλλει την ικανοποίηση δύο σχέσεων στον κόμβο εξόδου από τον αγωγό, των

$$-u^2\Psi_2 + \left(-\gamma u E + \frac{\gamma - 2}{2}u^3 \right) \Psi_3 = 0 \quad (8.67)$$

$$\Psi_1 + 2u\Psi_2 + \left(\gamma E - \frac{\gamma - 3}{2}u^2 \right) \Psi_3 = 0 \quad (8.68)$$

Στην έξοδο, συνεπώς, υπολογίζεται μια από τις τρεις συνιστώσες της συζυγούς μεταβλητής μέσω παρεμβολής από το εσωτερικό του πεδίου (πληροφορία που φέρει μια χαρακτηριστική που κατευθύνεται προς τα κατάντι της ροής) και οι υπόλοιπες δύο προκύπτουν ‘τοπικά’, στην έξοδο, από τις αλγεβρικές σχέσεις 8.67 και 8.68.

Εκφράσεις για την Κλίση της Αντικειμενικής Συνάρτησης

Επιλύοντας αριθμητικά τις συζυγείς μερικές διαφορικές εξισώσεις και επιβάλλοντας τις οριακές συνθήκες που διατυπώθηκαν προηγουμένως, στην εξίσωση 8.56 απομένουν μόνο τα δύο τελευταία ολοκληρώματα (τα σημειούμενα με SD) για τον ζητούμενο υπολογισμό των συνιστωσών της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού.

Όπως προαναφέρθηκε, στο πρόβλημά μας, υπό προϋποθέσεις, το πρώτο από τα δύο αυτά ολοκληρώματα, το οποίο συναρτάται της μεταβολής δdx , ισούται με μηδέν. Μια τέτοια περίπτωση, στην οποία θα βασισθεί και η ανάπτυξη ενδεικτικών σχέσεων για την κλίση του F ή του F_{aug} που ακολουθεί, είναι όταν η διατομή S παραμετροποιείται λ.χ. με πολυώνυμα Bézier–Bernstein των οποίων οι κατά τον άξονα του αγωγού (x) θέσεις των σημείων ελέγχου παραμένουν σταθερές κατά τη βελτιστοποίηση και, συγχρόνως, οι κόμβοι υπολογισμού προκύπτουν για δεδομένη (την ίδια πάντα) κατανομή τιμών της παραμέτρου t στο διάστημα $[0, 1]$. Έστω ότι μια απλή τέτοια παραμετροποίηση στηρίζεται σε πολυώνυμα Bézier–Bernstein με N σημεία ελέγχου. Συνήθως, το πρώτο και το τελευταίο από αυτά θεωρούνται σταθερά (προσδιορίζουν τη διατομή εισόδου και εξόδου του αγωγού, οι οποίες είναι γνωστές) και πρέπει να είναι συμβατά με την πρώτη και τελευταία τιμή της κατανομής πίεσης κατά μήκος του αγωγού που χρησιμοποιείται ως στόχος. Εδώ, παρακάμπουμε τη λεπτομέρεια αυτή και θεωρούμε ότι τα σημεία ελέγχου της διατομής είναι τα $(X_i, S_i), i = 0, \dots, N - 1$. Θεωρώντας σταθερά και γνωστά όλα τα X_i , το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού συντίθεται από τις N τιμές των S_i , είναι δηλαδή (με συμβολισμό συμβατό με τα προηγούμενα)

$$\vec{b} = (b_1, b_2, \dots, b_N)^T = (S_0, S_1, \dots, S_{N-1})^T$$

Κατά τα γνωστά από τη θεωρία της παραμετροποίησης Bézier (βλ. σχέση 9.26), για μια τιμή της παραμέτρου $t \in [0 : 1]$, η διατομή του αγωγού στην αξονική θέση $x(t) = \sum_{i=0}^{N-1} C_i(t)X_i$ ισούται με

$$S(x(t)) = S(t) = \sum_{i=0}^{N-1} C_i(t)S_i = \sum_{i=0}^{N-1} C_i(t)b_{i+1} \quad (8.69)$$

όπου $C_i(t)$ είναι οι συναρτήσεις βάσης των πολυωνύμων Bézier. Για δεδομένη τιμή του t , αφού $C_i(t)$ και X_i παραμένουν αμετάβλητα, η τιμή του $x(t)$ δεν μεταβάλλεται. Με τη συνήθη υπόθεση ότι οι αξονικές θέσεις των κόμβων που διακριτοποιούν το μήκος L του αγωγού προκύπτουν για δεδομένη και αμετάβλητη κατανομή t , το dx μεταξύ των ίδιων δύο διαδοχικών κόμβων παραμένει σταθερό, δηλαδή $\delta(dx) = 0$.

Έτσι, απομένει ότι

$$\delta F_{aug} = \int_L \vec{\Psi}^T T_b \delta \vec{b} dx \quad (8.70)$$

με το μητρώο T_b διάστασης $3 \times N$ να ορίζεται ως

$$T_b = \begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma}{\partial b_1} \rho u & \frac{\partial \sigma}{\partial b_2} \rho u & \dots & \frac{\partial \sigma}{\partial b_N} \rho u \\ \frac{\partial \sigma}{\partial b_1} \rho u^2 & \frac{\partial \sigma}{\partial b_2} \rho u^2 & \dots & \frac{\partial \sigma}{\partial b_N} \rho u^2 \\ \frac{\partial \sigma}{\partial b_1} u(\rho E + p) & \frac{\partial \sigma}{\partial b_2} u(\rho E + p) & \dots & \frac{\partial \sigma}{\partial b_N} u(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad (8.71)$$

όπου $\sigma = -\frac{1}{S} \frac{\partial S}{\partial x}$. Με βάση τη γραφή 8.71, αν \vec{T}_{b_i} είναι η i -ιοστή στήλη του T_b , τότε

$$\frac{\delta F}{\delta b_i} = \int_L \vec{\Psi}^T \vec{T}_{b_i} dx \quad (8.72)$$

Αφού

$$\frac{\partial \sigma}{\partial b_i} = \frac{\delta \sigma}{\delta b_i} = \frac{\delta(-\frac{1}{S} \frac{\partial S}{\partial x})}{\delta b_i} = -\frac{1}{S} \frac{\delta(\frac{\partial S}{\partial x})}{\delta b_i} + \frac{1}{S^2} \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\delta S}{\delta b_i} \quad (8.73)$$

αρκεί, δεδομένης της σχέσης 8.69, να βρεθούν οι εκφράσεις των μεταβολών $\frac{\delta S}{\delta b_i}$ και $\frac{\delta(\frac{\partial S}{\partial x})}{\delta b_i}$. Για την εκάστοτε τιμή του t , η μεταβολή του $S(t)$ γράφεται εύκολα ως

$$\frac{\delta S(t)}{\delta b_i} = \frac{\delta \left(\sum_{i=0}^{N-1} C_i(t)b_{i+1} \right)}{\delta b_i} = C_{i-1}(t) \quad (8.74)$$

Η παράγωγος της διατομής ως προς την x κατεύθυνση είναι ίση με

$$\frac{\partial S}{\partial x}(t) = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\partial C_i}{\partial x}(t)b_{i+1} \quad (8.75)$$

και η μεταβολή της κλίσης της διατομής ως προς τις μεταβλητές ελέγχου δίνεται από τη σχέση

$$\frac{\delta(\frac{\partial S}{\partial x}(t))}{\delta b_i} = \frac{\partial C_i(t)}{\partial x} = \frac{\frac{dC_i(t)}{dt}}{\frac{dx(t)}{dt}} \quad (8.76)$$

με την παράγωγο $\frac{dC_i(t)}{dt}$ να προκύπτει από τη σχέση 9.28 ενώ

$$\frac{dx(t)}{dt} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{dC_i(t)}{dt} X_i$$

Επαναλαμβάνεται (τόρα που γνωρίσαμε λεπτομερώς τη μαθηματική διατύπωση) ότι, στην περίπτωση αντίστροφου σχεδιασμού 1Δ αγωγού με τη συζυγή μέθοδο, η απόκλιση της τρέχουσας κατανομής πίεσης από την κατανομή-στόχο συμμετέχει ως όρος πηγής στη συζυγή εξίσωση 8.57. Όπως θα αναπτυχθεί σε επόμενη ενότητα, στο 2Δ πρόβλημα οι αντίστοιχοι όροι εμφανίζονται στις εξισώσεις που διατυπώνονται για τα στερεά όρια και όχι σε αυτές για το εσωτερικό του πεδίου. Η ιδιομορφία αυτή των πολυδιάστατων προβλημάτων είναι αξιοσημείωτη.

8.5.3 Ο Αλγόριθμος Αντίστροφου Σχεδιασμού

Συνοψίζουμε τα βήματα του αλγόριθμου αντίστροφου σχεδιασμού αγωγού, με βάση θεώρηση ψευδο-1Δ ροής, που βασίζεται σε συζυγή διατύπωση και την μέθοδο απότομης καθόδου:

Βήμα 1: Δίνεται αρχική τιμή στο μετρητή των κύκλων $n = 0$ και επιλέγεται τυχαία η αρχική λύση, δηλαδή ένα αρχικό σύνολο τιμών των N μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b}^n , το \vec{b}^0 , όπου ο πάνω δείκτης είναι μετρητής κύκλων.

Βήμα 2: Χρησιμοποιείται η συνάρτηση παρεμβολής (λ.χ. το πολυώνυμο Bézier-Bernstein) ώστε να σχηματισθεί η γεωμετρία του αγωγού, δηλαδή να βρεθεί η κατανομή $S^n(x)$ που αντιστοιχεί στο τρέχον διάνυσμα \vec{b}^n . Αποτέλεσμα του βήματος αυτού είναι να υπολογισθεί μια κατανομή κόμβων κατά το μήκος L του αγωγού και η αντίστοιχη κατανομή διατομής $S(x)$ ώστε, στη συνέχεια, σε αυτό το πλέγμα να επιλυθούν αριθμητικά οι εξισώσεις της ροής και οι συζυγείς εξισώσεις.

Βήμα 3: Επιλύεται το ευθύ πρόβλημα. Επιλύονται, δηλαδή, αριθμητικά οι εξισώσεις 8.40 της ροής. Υπολογίζεται, μεταξύ άλλων, η κατανομή πίεσης $p(x)$ κατά μήκος του αγωγού.

Βήμα 4: Εφαρμόζεται κριτήριο σύγκλισης, σχετικό με την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης 8.49 και σταματά εδώ ο αλγόριθμος αν ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης.

Βήμα 5: Επιλύεται το συζυγές πρόβλημα, δηλαδή το γραμμικό σύστημα 8.57 με τις οριακές συνθήκες της ενότητας 8.5.2. Υπολογίζονται έτσι οι συζυγές μεταβλητές $\vec{\Psi}^n$.

Βήμα 6: Διορθώνονται οι τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού,

$$b_i^{n+1} = b_i^n - \eta \frac{\delta F}{\delta b_i}, \quad i = 1, \dots, N \quad (8.77)$$

με τις παραγώγους να υπολογίζονται από τη σχέση 8.72.

Βήμα 7: Ένας νέος κύκλος ξεκινά από το Βήμα 2, θέτοντας $n \leftarrow n + 1$.

Σύμφωνα με τα προηγούμενα, ένας **κύκλος** αντιστοιχεί στην επίλυση ενός ευθέως και ενός συζυγούς προβλήματος. Να γιατί, από την αρχή, διατυπώθηκε ότι το κόστος ενός κύκλου ισούται προσεγγιστικά με το κόστος δύο επιλύσεων του ευθέως προβλήματος. Ας σημειωθεί ότι, επειδή και το ευθύ και το συζυγές πρόβλημα λύνονται με επαναληπτικές μεθόδους, είναι χρήσιμο να γίνει η διάκριση μεταξύ των όρων **κύκλος** και **επανάληψη**.

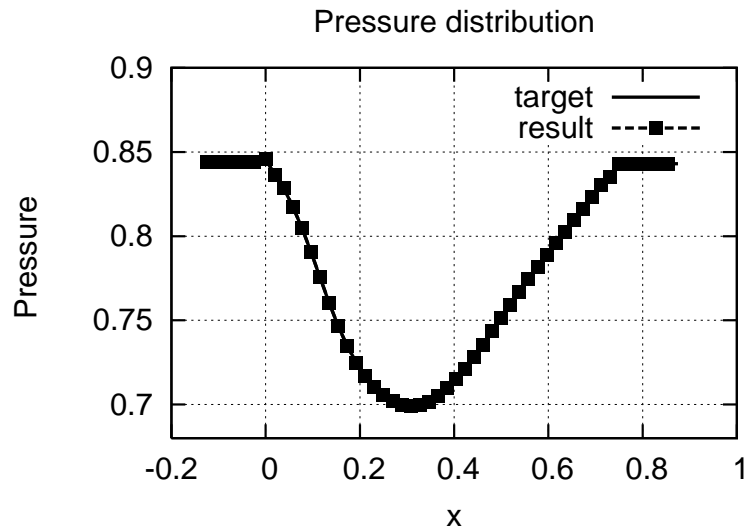
8.5.4 Εφαρμογή–Υπολογιστικό Παράδειγμα

Ακολουθεί η εφαρμογή της προηγούμενης μεθόδου στον αντίστροφο σχεδιασμό αγωγού με ισεντροπικό αριθμό *Mach* στην έξοδο $M_{2, is} = 0.50$. Πρόκειται για τον τυπικό τρόπο ελέγχου της αξιοπιστίας τέτοιων μεθόδων όπου, για δεδομένο αγωγό (δεδομένη κατανομή $S(x)$), υπολογίζεται αρχικά η αντίστοιχη κατανομή πίεσης $p_{tar}(x)$. Στη συνέχεια, λύνουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης και ελέγχουμε αν η τελική κατανομή πίεσης $p(x)$ αναπαράγει με ακρίβεια την $p_{tar}(x)$ αλλά και αν η τελική γεωμετρία που προκύπτει ως λύση του προβλήματος βελτιστοποίησης συμφωνεί με την αρχική γεωμετρία (που θα αποκαλείται ‘γεωμετρία αναφοράς’).

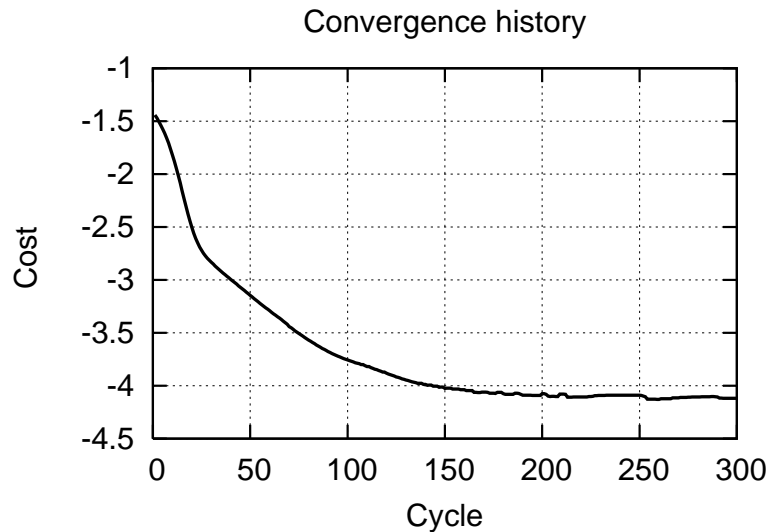
Ακολουθώντας τον παραπάνω τρόπο εργασίας, στα σχήματα 8.4 και 8.5 παρουσιάζεται η κατανομή του μεγέθους -στόχου (κατανομή πίεσης) στον αγωγό που προέκυψε από τη μέθοδο βελτιστοποίησης και ο ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου. Παρατηρήστε ότι χρειάστηκαν περί τους 200 κύκλους για σύγκλιση της μεθόδου, δηλαδή περίπου 400 ισοδύναμες επιλύσεις των εξισώσεων ροής. Ο αριθμός αυτός (άρα και το υπολογιστικό κόστος) μπορεί να μειωθεί κατά πολύ αν η μέθοδος της απότομης καθόδου αντικατασταθεί από μια ‘καλύτερη’ μέθοδο βελτιστοποίησης (λ.χ. μέθοδο Newton, ακριβή ή προσεγγιστική).

8.6 Συζυγής Διατύπωση για 2Δ Προβλήματα

Η ενότητα αυτή ασχολείται με τη διατύπωση των συζυγών εξισώσεων για διδιάστατα προβλήματα ροής. Η παρουσίαση που ακολουθεί μπορεί να εφαρμοσθεί στο σχεδιασμό οποιασδήποτε γεωμετρικής μορφής αλλά, εδώ θα αναφερόμαστε στο σχεδιασμό αεροτομών, είτε μεμονωμένων είτε πτερυγώσεων στροβιλομηχανών.



Σχήμα 8.4: Αντίστροφος σχεδιασμός αγωγού, με παραδοχές ψευδο-1Δ ροής. Παρουσιάζεται η κατανομή πίεσης –στόχος που τέθηκε και η αντίστοιχη κατανομή που υπολογίστηκε. Και οι δύο κατανομές είναι αδιάστατες με τον ίδιο τρόπο. Πρακτικά, οι δύο κατανομές συμπίπτουν απόλυτα.



Σχήμα 8.5: Αντίστροφος σχεδιασμός αγωγού, με παραδοχές ψευδο-1Δ ροής: Ρυθμός σύγκλισης με την τιμή της συνάρτησης κόστους σε λογαριθμική κλίμακα. Παρατηρήστε τη συνήθη συμπεριφορά της μεθόδου της απότομης καθόδου: στην αρχή το κόστος μειώνεται με γρήγορο ρυθμό και στη συνέχεια ο ρυθμός αυτός μειώνεται δραματικά.

8.6.1 Αντίστροφος Σχεδιασμός Αεροτομής – Θεμελίωση

Έστω ότι στόχος είναι να ευρεθεί η μορφή αεροτομής η οποία σε δεδομένες συνθήκες ροής αναπαράγει δεδομένη κατανομή πίεσης στα τοιχώματά της. Δηλαδή, έχει

προκαθορισθεί μια κατανομή πίεσης $p_{tar} = p_{tar}(s)$ ως συνάρτηση του μήκους τόξου s του περιγράμματος της αεροτομής, για τις πλευρές υπερπίεσης και υποπίεσης. Πρακτικά, μια τέτοια κατανομή-στόχος δημιουργείται συνήθως χρησιμοποιώντας ολοκληρωματικές εξισώσεις υπολογισμού του οριακού στρώματος, οι οποίες υπολογίζουν κατανομές πίεσης ώστε τα αναπτυσσόμενα οριακά στρώματα να έχουν επιθυμητά χαρακτηριστικά (λ.χ. να μην αποκολλώνται). Σε άλλες πραγματικές περιπτώσεις, η κατανομή-στόχος προκύπτει επεμβαίνοντας και τροποποιώντας την κατανομή πίεσης που δίνει υπάρχουσα αεροτομή, με γνώμονα την καλύτερευση των χαρακτηριστικών της ροής που αναπτύσσονται γύρω της. Συνήθως, τέτοιοι υπολογισμοί δίνουν τον (αδιάστατο) συντελεστή πίεσης $c_p(s)$ ο οποίος θα έπρεπε να τεθεί ως στόχος αντί της κατανομής πίεσης $p(s)$, αλλά για λόγους ευκολίας στη διατύπωση θα θεωρήσουμε ότι στόχος είναι μια κατανομή πίεσης.

Με βάση τα προηγούμενα, ως αντικειμενική συνάρτηση προς ελαχιστοποίηση (συνάρτηση κόστους) επιλέγεται η

$$F = \int_w (p(s) - p_{tar}(s))^2 ds \quad (8.78)$$

όπου το ολοκλήρωμα υπολογίζεται στο περίγραμμα w κάθε αεροτομής-υποψήφιας λύσης, η οποία στις συγκεκριμένες συνθήκες ροής δίνει κατανομή πίεσης $p(s)$ η οποία στη γενική περίπτωση είναι διαφορετική της επιθυμητής $p_{tar}(s)$.

Επίσης, θα υποθέσουμε ότι το ρευστό είναι συμπιεστό και ατριβές, άρα διέπεται από τις εξισώσεις Euler. Καθορίζεται, με τον τρόπο αυτό, η συνάρτηση \vec{R} της εξίσωσης 8.10.

Τελευταία παραδοχή είναι αυτή που αφορά στο γεωμετρικό μοντέλο παραμετροποίησης του περιγράμματος της αεροτομής. Για την ανάπτυξη που θα ακολουθήσει (η οποία πρέπει να είναι γενική και κατά το δυνατόν απλή) δεν θα επιλέξουμε ένα συγκεκριμένο μοντέλο (b-Splines, Bézier ή οτιδήποτε άλλο). Για λόγους γενικότητας, θα εκφράσουμε με $B(\vec{b})$ το μοντέλο της παραμετροποίησης, όπου \vec{b} είναι το διάνυσμα των ελεύθερων μεταβλητών. Τονίζουμε ότι, όταν το μοντέλο $B(\vec{b})$ είναι γνωστό, βοηθητικές γεωμετρικές ποσότητες όπως είναι το μήκος τόξου, οι συνιστώσες του κάθετου μοναδιαίου διανύσματος στο περίγραμμα της αεροτομής κλπ που εμπλέκονται στους υπολογισμούς, προκύπτουν εύκολα και κατά περίπτωση, με αναλυτικές σχέσεις.

Ως προς τη μέθοδο βελτιστοποίησης, έστω ότι λύνουμε το πρόβλημα με τη μέθοδο της απότομης καθόδου και η συζυγής μέθοδος (όπως διατυπώνεται στη συνέχεια) χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης.

Τα βήματα του συνολικού αλγορίθμου επίλυσης είναι:

Βήμα 0: Επιλογή αρχικής λύσης \vec{b}^n με $n = 0$, η οποία αντιστοιχεί σε μια αρχική αεροτομή.

Βήμα 1: Χάραξη περιγράμματος τρέχουσας αεροτομής εφαρμόζοντας το μοντέλο παραμετροποίησης $B(\vec{b}^n)$.

Βήμα 2: Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος γύρω από την αεροτομή και αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής σε αυτό, για τις δεδομένες συνθήκες ροής.

Αποτέλεσμα είναι ο υπολογισμός του ροϊκού πεδίου \vec{U}^n (άρα, προφανώς, και του πεδίου πίεσης p) που διαμορφώνεται γύρω από την τρέχουσα αεροτομή-λύση.

Βήμα 3: Επίλυση των συζυγών εξισώσεων (εξισώσεις 8.17) στο ίδιο υπολογιστικό πλέγμα, χρησιμοποιώντας το πεδίο ροής που ήδη υπολογίστηκε. Υπολογισμός του συζυγούς πεδίου $\vec{\Psi}^n$.

Βήμα 4: Ανανέωση της μορφής της αεροτομής εφαρμόζοντας τη μέθοδο της απότομης καθόδου με την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης που υπολογίστηκε από τις σχέσεις 8.18 και 8.19.

Βήμα 5: Εφαρμογή κριτηρίων σύγκλισης και επιστροφή στο βήμα 1 με $(n \leftarrow n + 1)$, αν η μέθοδος δεν έχει συγκλίνει ακόμη, σύμφωνα με το κριτήριο σύγκλισης

Η ανάπτυξη που θα ακολουθήσει βασίζεται στις εξισώσεις Euler για 2D ροές, γραμμένες σε συντηρητική διανυσματική μορφή

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial y} = \vec{0} \quad (8.79)$$

Επεκτείνοντας γνώσεις και συμβολισμούς από το σχεδιασμό του ψευδο-1Δ αγωγού, με $\vec{U} = [\rho \ \rho u \ \rho v \ \rho E]^T$ συμβολίζεται το διάνυσμα των συντηρητικών μεταβλητών, u και v είναι οι καρτεσιανές συνιστώσες της ταχύτητας, ενώ η ολική ενέργεια ρE του ρευστού ανά μονάδα όγκου δίνεται από τη σχέση

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \quad (8.80)$$

Στην εξίσωση 8.79, ο χρονικός όρος παραμένει ώστε να εφαρμοστούν τεχνικές χρονοπροέλασης, με τις οποίες η λύση του χρονικά μόνιμου πεδίου προκύπτει ως η ασυμπτωτική στο χρόνο λύση των χρονικά μη-μόνιμων εξισώσεων ροής, για χρονικά μόνιμες οριακές συνθήκες. Με \vec{f} και \vec{g} συμβολίζουμε τα διανύσματα ατρισμού ροής στις διευθύνσεις x και y αντίστοιχα, τα οποία δίνονται από τις σχέσεις

$$\vec{f} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \quad \vec{g} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad (8.81)$$

Το σύστημα των μερικών διαφορικών εξισώσεων συμπληρώνεται με την καταστατική εξίσωση των τελείων αερίων. Έτσι, στη διανυσματική γραφή 8.79 αναγνωρίζουμε, ανά γραμμή, την εξίσωση της συνέχειας, τις δύο συνιστώσες της εξίσωσης της ορμής και την εξίσωση της ενέργειας. Σε οτιδήποτε ακολουθεί, θα παραλείπονται δείκτες (όπως ο n) που χρησιμοποιούνται ως μετρητές επανάληψων του αλγόριθμου βελτιστοποίησης. Θα θεωρείται ότι, στην τρέχουσα επανάληψη, κάθε ποσότητα υπολογίζεται με τις πιο πρόσφατες τιμές των εμπλεκόμενων ποσοτήτων

Οι εξισώσεις ροής 8.79 γράφονται

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial \vec{U}} \frac{\partial \vec{U}}{\partial y} = \vec{0} \quad (8.82)$$

και, συμβολίζοντας με A και B τα Ιακωβιανά μητρώα

$$A = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{U}}, \quad B = \frac{\partial \vec{g}}{\partial \vec{U}} \quad (8.83)$$

η 8.82 ξαναγράφεται ως

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} + B \frac{\partial \vec{U}}{\partial y} = \vec{0} \quad (8.84)$$

όπου

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}u^2 + \frac{\gamma-1}{2}v^2 & (3-\gamma)u & -(\gamma-1)v & \gamma-1 \\ -uv & v & u & 0 \\ -\gamma u \rho E + (\gamma-1)u(u^2+v^2) & \gamma \rho E - \frac{\gamma-1}{2}(v^2+3u^2) & -(\gamma-1)uv & \gamma u \end{bmatrix} \quad (8.85)$$

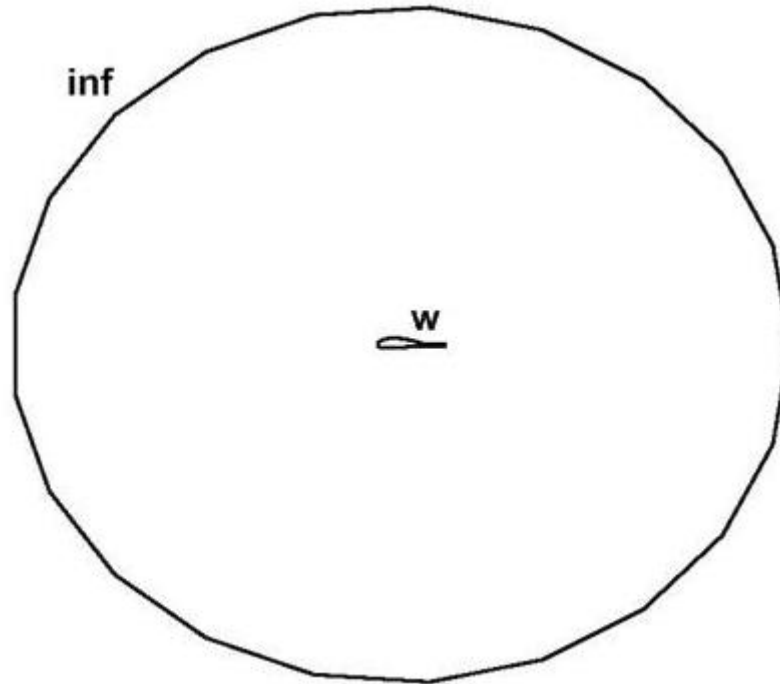
και

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}v^2 + \frac{\gamma-1}{2}u^2 & -(\gamma-1)u & (3-\gamma)v & \gamma-1 \\ -\gamma v \rho E + (\gamma-1)v(u^2+v^2) & -(\gamma-1)uv & \gamma \rho E - \frac{\gamma-1}{2}(u^2+3v^2) & \gamma v \end{bmatrix} \quad (8.86)$$

Για διακύμανση $\delta \vec{b}$ των μεταβλητών ελέγχου, η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης δίνεται από τη σχέση

$$\delta F = \frac{1}{2} \delta \int_{s_w} (p - p_{tar})^2 ds = \frac{1}{2} \int_{s_w} (p - p_{tar})^2 \delta(ds) + \int_{s_w} (p - p_{tar}) \delta p ds \quad (8.87)$$

όπου συμμετέχουν μόνο επικαμπύλια ολοκληρώματα σε ένα τμήμα του ορίου s του χωρίου ροής και συγκεκριμένα στα στερεά τοιχώματα (s_w) που σε πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομής συμπίπτουν με το περίγραμμα αυτής. Το χωρίο στο οποίο επιλύεται η ροή παρουσιάζεται στο σχήμα 8.6, όπου φαίνεται και το τμήμα του ορίου το οποίο σημειώνεται με s_w .



Σχήμα 8.6: Υπολογιστικό χωρίο \mathcal{U} που τυπικά χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ροής γύρω από μεμονωμένη αεροτομή. Το χωρίο περιορίζεται από τις δύο καμπύλες. Η εξωτερική καμπύλη αντιστοιχεί στο επ' άπειρο όριο της ροής (*inf*, infinite boundary). Πρακτικά μπορεί να έχει οποιοδήποτε σχήμα (συχνά κυκλικό) αρκεί να τοποθετείται επαρκώς μακριά των στερεών τοιχωμάτων ώστε εκεί η ροή να θεωρείται πρακτικά αδιατάρακτη. Τυπική απόσταση είναι περί τα 10 ως 20 μήκη χορδής από την αεροτομή. Η εσωτερική καμπύλη είναι η προς σχεδιασμό αεροτομή, το τμήμα δηλαδή του συνολικού περιγράμματος που αντιστοιχεί σε στερεό τοίχωμα (w , wall). Εννοείται ότι $\partial\mathcal{U} = s = s_{inf} \cup s_w = s_{inf} \cup w$.

Για οποιαδήποτε διακύμανση των μεταβλητών σχεδιασμού πρέπει να εξακολουθούν να ικανοποιούνται οι εξισώσεις της ροής δηλαδή ισχύει

$$\delta\left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial y}\right) = \vec{0} \quad (8.88)$$

Πολλαπλασιάζοντας τη μεταβολή αυτή των εξισώσεων ροής με το διάνυσμα των πολλαπλασιαστών *Lagrange* ή αλλιώς τις συζυγείς μεταβλητές και ολοκληρώνοντας στο πεδίο ροής προκύπτει

$$\int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta\left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial y}\right) d\mathcal{U} = 0 \quad (8.89)$$

Αφαιρώντας το (έτσι κι αλλιώς μηδενικό) ολοκλήρωμα της 8.89 από τη μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης, σχέση 8.87, προκύπτει η μεταβολή της επαυξημένης

αντικειμενικής συνάρτησης

$$\delta F_{aug} = \delta F - \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial y} \right) d\mathcal{U} = \delta F - \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} \quad (8.90)$$

Λόγω της σχέσης 8.89 είναι εμφανές ότι η ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης F ή της επαυξημένης F_{aug} είναι ένας και ο αυτός στόχος και, στη συνέχεια, οι δύο συναρτήσεις θα χρησιμοποιούνται αδιακρίτως.

Παρατηρήστε ότι στη σχέση 8.90, στο χωρικό ολοκλήρωμα, εμφανίζονται μεταβολές παραγώγων. Όπως φάνηκε και στο ψευδο-1Δ παράδειγμα, βασικό 'εργαλείο' για τη μαθηματική ανάπτυξη των συζυγών εξισώσεων είναι το θεώρημα των Green-Gauss. Με αυτό, χωρικά ολοκληρώματα της απόκλισης (*div*) μιας διανυσματικής ποσότητας (και οι εξισώσεις ροής γράφονται έτσι, είναι η λεγόμενη συντηρητική τους γραφή) μετατρέπονται σε συνοριακά ολοκληρώματα. Άρα, στη σχέση 8.90, θα ήταν προτιμότερο να υπήρχαν παράγωγοι των μεταβολών αντί των μεταβολών των παραγώγων. Ο τρόπος που γίνεται ο σχετικός μετασχηματισμός παρουσιάζεται, ως θεωρία και παράδειγμα, στην επόμενη εμβόλιμη ενότητα.

8.6.2 Σχετικό Μαθηματικό Υπόβαθρο – Μαθηματικό Παράδειγμα

Για λόγους γενικότητας, ας αφήσουμε για λίγο τις εξισώσεις ροής και τα προβλήματα αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομών, και ας ασχοληθούμε με μια αντικειμενική συνάρτηση η οποία είναι ένα χωρικό ολοκλήρωμα, της μορφής

$$F = \int_{\mathcal{U}} \left(B_i \frac{\partial U}{\partial x_i} + CU \right) d\mathcal{U} \quad (8.91)$$

Οι συντελεστές B_i και C θεωρούνται ανεξάρτητες της μεταβλητής κατάστασης U . Οι εξισώσεις κατάστασης του αντίστοιχου 'εικονικού' φυσικού προβλήματος είναι διαφορικές εξισώσεις της μορφής

$$R(U) = K_{ij} \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} + E_i \frac{\partial U}{\partial x_i} + HU = 0 \quad (8.92)$$

οι οποίες ικανοποιούνται σε κάθε εσωτερικό σημείο του πεδίου \mathcal{U} ενώ στα συνοριακά σημεία του \mathcal{U} (σημεία-κόμβοι του s) επιβάλλονται οι 'πρέπουσες' οριακές συνθήκες. Τα K_{ij} , E_i , H είναι όλα ανεξάρτητα του U και των x_i .

Εισάγοντας τη συζυγή μεταβλητή Ψ , η διακύμανση της επαυξημένης αντικειμενική συνάρτηση ορίζεται ως

$$\delta F_{aug} = \delta F - \int_{\mathcal{U}} \Psi \delta R(U) d\mathcal{U} \quad (8.93)$$

ή, με αντικατάσταση,

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} &= \int_{\mathcal{V}} \left[B_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + C \delta U \right] d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \left(B_i \frac{\partial U}{\partial x_i} + CU \right) \delta(d\mathcal{V}) \\ &\quad - \int_{\mathcal{V}} \Psi \left[K_{ij} \delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) + E_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + H \delta U \right] d\mathcal{V} \end{aligned} \quad (8.94)$$

Τα δύο πρώτα χωρικά ολοκληρώματα στο δεξιό μέλος της 8.94 εκφράζουν, το πρώτο μεν, τη μεταβολή στην τιμή της F που οφείλεται στο ότι η μεταβολή στις τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} μεταβάλλει το πεδίο των μεταβλητών κατάστασης U (το ροϊκό πεδίο, δηλαδή), το δεύτερο δε, την πρόσθετη μεταβολή στην τιμή της F που προκαλεί η ίδια μεταβολή στις τιμές των \vec{b} λόγω της μεταβολής που συνεπάγεται στο σχήμα του χωρίου ολοκλήρωσης (μεταβάλλεται ολόκληρο ή ένα τμήμα του ορίου s του \mathcal{V} και, μαζί του, μεταβάλλεται και το χωρίο ολοκλήρωσης \mathcal{V}).

Όπως προαναφέρθηκε, η διαχείριση της 8.94 βασίζεται στην ολοκλήρωση κατά παράγοντες και το θεώρημα των Green–Gauss. Με αυτή τη συλλογιστική, υπάρχουν δύο ‘τύποι’ όρων σε αυτήν την εξίσωση που απαιτούν προσεκτική αντιμετώπιση. Ο πρώτος όρος είναι ο $\delta(d\mathcal{V})$. Ο δεύτερος όρος είναι ποσότητες της μορφής $\delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right)$ ή $\delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right)$ (μεταβολές μιας χωρικής παραγώγου οποιασδήποτε τάξης).

Αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι σχέσεις

$$\delta(d\mathcal{V}) = \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_k} d\mathcal{V} \quad (8.95)$$

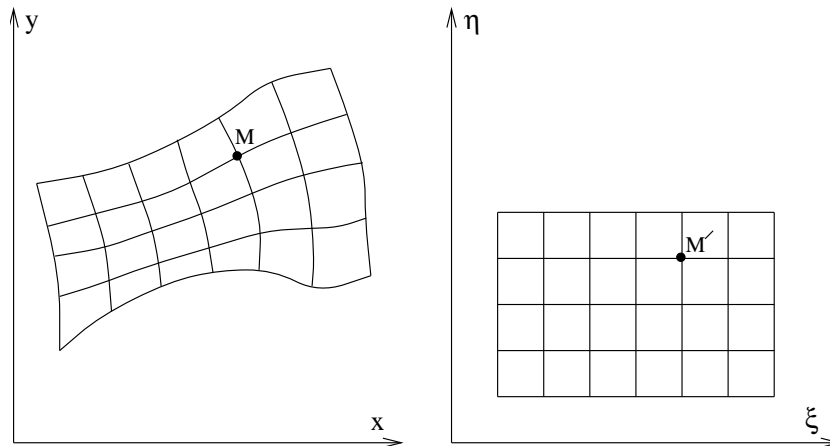
και

$$\delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} - \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} \quad (8.96)$$

Στις παραπάνω σχέσεις κάθε επαναλαμβανόμενος δείκτης υπονοεί άθροιση, κατά τη σύμβαση του Einstein. Έτσι, για διδιάστατα πεδία, στο επίπεδο (x, y) , οι σχέσεις αναπτύσσονται ως

$$\begin{aligned} \delta(d\mathcal{V}) &= \left(\frac{\partial(\delta x)}{\partial x} + \frac{\partial(\delta y)}{\partial y} \right) d\mathcal{V} \\ \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right) &= \frac{\partial(\delta U)}{\partial x} - \left(\frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial(\delta x)}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial(\delta y)}{\partial x} \right) \\ \delta \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right) &= \frac{\partial(\delta U)}{\partial y} - \left(\frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial(\delta x)}{\partial y} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial(\delta y)}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

Ειδικά η σχέση 8.96 αξίζει ουσιαστική κατανόηση της φυσικής της σημασίας. Έστω το πρόβλημα του σχεδιασμού ενός διδιάστατου αγωγού. Όπως φαίνεται και στο



Σχήμα 8.7: Το πραγματικό (x, y) και το μετασχηματισμένο (ξ, η) υπολογιστικό χωρίο.

σχήμα 8.7, για να επιλυθεί αριθμητικά το πεδίο ροής (οι εξισώσεις κατάστασης) αλλά και οι συζυγείς εξισώσεις, το χωρίο U διακριτοποιείται χρησιμοποιώντας (εδώ) ένα δομημένο πλέγμα. Η μεταβολή της χωρικής παραγωγού ενός μεγέθους της ροής στον κόμβο M (πόσο, δηλαδή, αλλάζει λ.χ. η $\frac{\partial U}{\partial x}$ στο M) ισούται με τη χωρική παράγωγο της μεταβολής του μεγέθους αυτού (σε κάθε κόμβο του πλέγματος γνωρίζουμε την προκαλούμενη δU και υπολογίζουμε τη χωρική παράγωγό της $\frac{\partial U}{\partial x}$ στο M , ως εάν αυτός να μην μετακινήθηκε) και έναν ακόμη όρο (τον τελευταίο) που εκφράζει το ότι η μεταβολή των \vec{b} άλλαξε το σχήμα του αγωγού άρα άλλαξε και το πλέγμα και συνεπώς ο κόμβος M μετακινήθηκε.

Η απόδειξη της 8.96 είναι απλή. Άς δεχθούμε, για την απλότητα της απόδειξης, ότι υπάρχει μια μόνο μεταβλητή σχεδιασμού, η b . Η μεταβολή του U λόγω μεταβολής του b γράφεται με τον κανόνα της αλυσίδας ως

$$\delta U = \frac{\delta U(x_i(b), b)}{\delta b} \delta b = \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k + \frac{\partial U}{\partial b} \delta b \quad (8.97)$$

και παραγωγίζεται χωρικά, δίνοντας

$$\frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k + \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial U}{\partial b} \right) \delta b \quad (8.98)$$

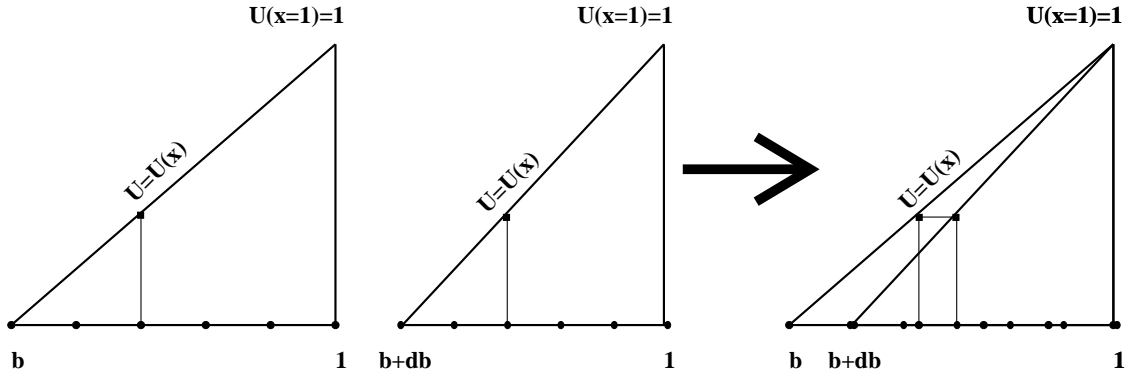
Όμοια, η μεταβολή του $\frac{\partial U}{\partial x_i}$ ως προς b γράφεται ως

$$\delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial b} \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k \quad (8.99)$$

Μεταξύ των σχέσεων 8.98 και 8.99, απαλείφονται οι κοινοί όροι του δεξιού μέλους και προκύπτει εύκολα η σχέση 8.96.

8.6.3 Φυσική Σημασία της 8.96

Το παράδειγμα που ακολουθεί είναι μονοδιάστατο, ιδιαίτερα απλό και κατανοητό (σχήμα 8.8).



Σχήμα 8.8: Μονοδιάστατο παράδειγμα για την κατανόηση της σχέσης $\delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} - \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i}$

Έστω ότι στόχος είναι η βελτιστοποίηση της μορφής ενός μονοδιάστατου χωρίου μήκους $1 - b$, όπου το b είναι η μοναδική μεταβλητή σχεδιασμού, με $b \in (0, 1)$. Η βελτιστοποίηση γίνεται ως προς μια αντικειμενική συνάρτηση η οποία δεν έχει σημασία σε σχέση με την εξίσωση 8.96 και ως εκ τούτου παραλείπεται κάθε αναφορά σε αυτή. Το χωρίο είναι μεταβλητού μήκους, αρχίζει στη θέση $x = b$ τελειώνει στη σταθερή θέση $x = 1$. Μεταβάλλοντας την τιμή του b , αλλάζει μήκος το χωρίο, το οποίο όμως πάντα διακριτοποιείται με M ισαπέχοντες κόμβους. Με x_i συμβολίζεται η θέση του i -οστού κόμβου, είναι δηλαδή

$$x_i = b + \frac{i-1}{M-1} (1-b) \quad , \quad i = 1, M \quad (8.100)$$

Η επίδειξη που επιχειρείται δεν απαιτεί ούτε τη γνώση της εξίσωσης κατάστασης. Για απλότητα, θα δεχθούμε ότι αυτή είναι οποιαδήποτε συνήθης διαφορική εξίσωση έχει ως λύση U τη γραμμική συνάρτηση

$$U_i = \frac{b - x_i}{b - 1} \quad (8.101)$$

κατά μήκος του μονοδιάστατου χωρίου. Συνεπώς

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_i = \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = \frac{1}{1-b} \quad (8.102)$$

(χωρίς άθροιση στον επαναλαμβανόμενο δείκτη i) και

$$\frac{\partial U_i}{\partial b} = \frac{x_i - 1}{(b-1)^2} \quad (8.103)$$

Από την εξίσωση 8.100 προκύπτει ότι

$$\frac{dx_i}{db} = \frac{\delta x_i}{\delta b} = \frac{1 - x_i}{1 - b} \quad (8.104)$$

Συνδυάζοντας τις 8.102, 8.103 και 8.104, η σχέση 8.97 δίνει

$$\delta U_i = \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial U_i}{\partial b} \delta b = 0 \quad (8.105)$$

Η 8.105 ήταν αναμενόμενη. Κάθε μεταβολή της τιμής του b προκαλεί αλλαγή μήκους του συνολικού χωρίου και αναδιανέμονται (πάντα με ίσες μεταξύ τους αποστάσεις) οι M κόμβοι του μονοδιάστατου πλέγματος, χωρίς όμως να αλλοιώνονται οι κομβικές τιμές U_i .

Από τη σχέση 8.105 προκύπτει άμεσα (η χωρική παράγωγος μηδενικής συνάρτησης είναι μηδέν) ότι

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\delta U_i}{\delta b} \right) = 0 \quad (8.106)$$

Επίσης, από τη σχέση 8.104 έχουμε ότι

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\delta x_i}{\delta b} \right) = \frac{1}{b - 1} \quad (8.107)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 8.106, 8.102 και 8.107, η εξίσωση 8.96, αφού επαναδιατυπωθεί ως

$$\delta \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\delta U_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \frac{\partial(\delta x_i)}{\partial x_i}$$

δίνει την

$$\delta \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{(1 - b)^2} \delta b \quad (8.108)$$

Μπορούμε εύκολα να επαληθεύσουμε την ορθότητα της τελευταίας σχέσης εφαρμόζοντας προσέγγιση πεπερασμένων διαφορών. Είναι

$$\frac{\delta}{\delta b} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = \lim_{\delta b \rightarrow 0} \frac{\frac{1}{1-b-\delta b} - \frac{1}{1-b}}{\delta b} = \lim_{\delta b \rightarrow 0} \frac{1}{(1-b-\delta b)(1-b)} = \frac{1}{(1-b)^2} \quad (8.109)$$

8.6.4 Περί Διακυμάνσεων Παραγώγων Δεύτερης Τάξης

Στα προηγούμενα είδαμε πως, με τη βοήθεια της σχέσης 8.96, η διακύμανση μιας πρώτης παραγώγου μετατρέπεται στην πρώτη παράγωγο της διακύμανσης της ίδιας ποσότητας συν έναν επιπλέον όρο. Στην ενότητα αυτή θα παράγουμε την αντίστοιχη σχέση για

τις παραγώγους δεύτερης τάξης. Η σχέση αυτή είναι χρήσιμη για να διατυπωθεί το συζυγές του προβλήματος της ενότητας 8.6.2 αλλά και ως υποθήκη για τη διατύπωση των συζυγών εξισώσεων σε προβλήματα βελτιστοποίησης συνεκτικού ρευστού (όπου υπάρχουν οι όροι διάχυσης). Συνεπώς, σκοπός της παρούσας ενότητας είναι να βρεθεί η μαθηματική σχέση που υλοποιεί τη μετατροπή

$$\delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) \rightarrow \frac{\partial^2 (\delta U)}{\partial x_i \partial x_j}$$

Για μεγαλύτερη ευκολία ας υποθεθεί ότι έχουμε μόνο μια μεταβλητή σχεδιασμού, την b . Η παράγωγος κατά x_i της μεταβολής

$$\delta U = \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k + \frac{\partial U}{\partial b} \delta b$$

είναι

$$\frac{\partial (\delta U)}{\partial x_i} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k + \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial U}{\partial b} \right) \delta b$$

και η κατά x_j παράγωγος αυτής είναι

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 (\delta U)}{\partial x_i \partial x_j} &= \underbrace{\frac{\partial^3 U}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \delta x_k}_{(a)} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i} \\ &+ \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i \partial x_j} + \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(\frac{\partial U}{\partial b} \right) \delta b}_{(b)} \end{aligned}$$

Συγχρόνως υπολογίζουμε τη μεταβολή της παραγώγου $\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j}$ η οποία είναι

$$\delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) = \underbrace{\frac{\partial^3 U}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \delta x_k}_{(a)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial b} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) \delta b}_{(b)}$$

Σημειώνεται η ισότητα των όρων (a) και (b) στις δύο τελευταίες σχέσεις οπότε με αντικατάσταση προκύπτει

$$\delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) = \frac{\partial^2 (\delta U)}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_j} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_j} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i} - \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (8.110)$$

που είναι η ζητούμενη σχέση για τη διακύμανση παραγώγων δεύτερης τάξης.

8.6.5 Μαθηματικό Παράδειγμα – Κατανοώντας τα Βήματα προς μια Συζυγή Διατύπωση

Έχουμε ήδη παραθέσει το πρόσθετο μαθηματικό υπόβαθρο που χρειάζεται για να προκύψει η συζυγής εξίσωση του απλού προβλήματος της ενότητας 8.6.2 αλλά και οι οριακές συνθήκες για τις συζυγείς μεταβλητές. Οι σχέσεις 8.95, 8.96 και 8.110 συνθέτουν το μαθηματικό υπόβαθρο στο οποίο στηρίζεται η διατύπωση.

Αφετηρία είναι η έκφραση 8.94 της μεταβολής της αντικειμενικής συνάρτησης ενώ θα χρησιμοποιηθούν και οι σχέσεις 8.95. Επαναλαμβάνουμε εδώ την 8.94 με βοηθητικές υποσημειώσεις των πέντε χωρικών ολοκληρωμάτων

$$\begin{aligned}
 \delta F_{aug} = & \underbrace{\int_{\mathcal{U}} \left[B_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + C \delta U \right] d\mathcal{U}}_{XO1} + \underbrace{\int_{\mathcal{U}} \left(B_i \frac{\partial U}{\partial x_i} + CU \right) \delta(d\mathcal{U})}_{XO2} \\
 & - \underbrace{K_{ij} \int_{\mathcal{U}} \Psi \delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) d\mathcal{U}}_{XO3} \\
 & - \underbrace{\int_{\mathcal{U}} \Psi \left[E_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + H \delta U \right] d\mathcal{U}}_{XO4} \quad (8.111)
 \end{aligned}$$

Το χωρικό ολοκλήρωμα που σημειώνεται με $XO1$, χρησιμοποιώντας την εξίσωση 8.96 και το θεώρημα των Green–Gauss, γράφεται

$$\begin{aligned}
 XO1 &= \int_{\mathcal{U}} \left[B_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + C \delta U \right] d\mathcal{U} = B_i \int_{\mathcal{U}} \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} + C \int_{\mathcal{U}} \delta U d\mathcal{U} = \\
 &= B_i \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} d\mathcal{U} - B_i \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} d\mathcal{U} + C \int_{\mathcal{U}} \delta U d\mathcal{U} = \\
 &= B_i \int_{\partial \mathcal{U}} \delta U n_i ds - B_i \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right) d\mathcal{U} + B_i \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_i} \delta x_k d\mathcal{U} + C \int_{\mathcal{U}} \delta U d\mathcal{U} = \\
 &= B_i \int_s \delta U n_i ds - B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds + B_i \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_i} \delta x_k d\mathcal{U} + C \int_{\mathcal{U}} \delta U d\mathcal{U}
 \end{aligned}$$

όπου, κατά τα γνωστά, n_i είναι οι συνιστώσες του μοναδιαίου κάθετου στο όριο s και προς τα έξω του χωρίου κατευθυνόμενου διανύσματος.

Το χωρικό ολοκλήρωμα που σημειώνεται με $XO2$, χρησιμοποιώντας την εξίσωση 8.95, δίνει

$$\begin{aligned}
XO2 &= \int_{\mathcal{V}} \left(B_i \frac{\partial U}{\partial x_i} + CU \right) \delta(d\mathcal{V}) = B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial x_i} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_k} d\mathcal{V} + C \int_{\mathcal{V}} U \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_k} d\mathcal{V} = \\
&= B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_k \right) d\mathcal{V} - B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} + C \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial(U \delta x_k)}{\partial x_k} d\mathcal{V} - C \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} = \\
&= B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_k n_k ds - B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} + C \int_s U \delta x_k n_k ds - C \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

Το χωρικό ολοκλήρωμα που σημειώνεται με $XO3$ και το οποίο περιλαμβάνει παραγώγους δεύτερης τάξης του U , χρησιμοποιώντας την εξίσωση 8.110, δίνει (μετά από αρκετές μαθηματικές πράξεις οι οποίες παραλείπονται) ότι

$$\begin{aligned}
XO3 &= - K_{ij} \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) d\mathcal{V} = -K_{ij} \int_s \Psi \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_j} \right) n_i ds \\
&+ K_{ij} \int_s \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right) n_j ds + K_{ij} \int_s \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_j \partial x_k} n_i \delta x_k ds \\
&- K_{ij} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i \partial x_j} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right) d\mathcal{V} - K_{ij} \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^3 U}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

Το χωρικό ολοκλήρωμα που σημειώνεται με $XO4$ και το οποίο περιλαμβάνει παραγώγους πρώτης τάξης του U δίνει (εδώ, οι πράξεις παρουσιάζονται αναλυτικά)

$$\begin{aligned}
XO4 &= - \int_{\mathcal{V}} \Psi \left[E_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + H \delta U \right] d\mathcal{V} = -E_i \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) d\mathcal{V} - H \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta U d\mathcal{V} = \\
&= -E_i \underbrace{\int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} d\mathcal{V}}_{XO4a} + E_i \underbrace{\int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} d\mathcal{V}}_{XO4b} - H \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta U d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

Όμως, για τον όρο $XO4a$ έχουμε

$$\begin{aligned}
XO4a &= \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial(\Psi \delta U)}{\partial x_i} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \delta U d\mathcal{V} = \\
&= \int_s \Psi \delta U n_i ds - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \delta U d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

ενώ για τον όρο $XO4b$ είναι

$$\begin{aligned}
XO4b &= \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} d\mathcal{V} = \\
&= \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right] d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} = \\
&= \int_s \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

οπότε ο όρος $XO4$ συνολικά γράφεται ως

$$\begin{aligned}
XO4 &= - \int_{\mathcal{V}} \Psi \left[E_i \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right) + H \delta U \right] d\mathcal{V} = \\
&- E_i \int_s \Psi \delta U n_i ds + E_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \delta U d\mathcal{V} \\
&+ E_i \int_s \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds - E_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} - E_i \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V} \\
&- H \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta U d\mathcal{V}
\end{aligned}$$

Εισάγοντας τις παραπάνω σχέσεις στην έκφραση 8.94 (ή την 8.111) της μεταβολής της αντικειμενικής συνάρτησης, η τελευταία γράφεται

$$\begin{aligned}
\delta F_{aug} &= \underbrace{B_i \int_s \delta U n_i ds}_{AEBC} - B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds + \underbrace{B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_k \partial x_i} \delta x_k d\mathcal{V}}_{CANCEL} + \underbrace{C \int_{\mathcal{V}} \delta U d\mathcal{V}}_{FAE} \\
&+ B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_k n_k ds - \underbrace{B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{CANCEL} + C \int_s U \delta x_k n_k ds - \underbrace{C \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{FAE} \\
&- \underbrace{K_{ij} \int_s \Psi \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_j} \right) n_i ds}_{AEBC} + \underbrace{K_{ij} \int_s \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \delta U n_j ds}_{AEBC} \\
&- K_{ij} \int_s \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_j ds + K_{ij} \int_s \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_j \partial x_k} n_i \delta x_k ds \\
&- \underbrace{K_{ij} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i \partial x_j} \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right) d\mathcal{V}}_{FAE} - \underbrace{K_{ij} \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^3 U}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{DSE} \\
&- \underbrace{E_i \int_s \Psi \delta U n_i ds}_{AEBC} + \underbrace{E_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \delta U d\mathcal{V}}_{FAE} \\
&+ E_i \int_s \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds - \underbrace{E_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{FAE} - \underbrace{E_i \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{DSE} \\
&- \underbrace{H \int_{\mathcal{V}} \Psi \delta U d\mathcal{V}}_{FAE} + \underbrace{H \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{FAE} - \underbrace{H \int_{\mathcal{V}} \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{V}}_{DSE} \tag{8.112}
\end{aligned}$$

Τα δύο τελευταία ολοκληρώματα προσθαφαιρέθηκαν σκόπιμα. Παρατηρήστε ότι οι όροι που υποσημειώνονται με *CANCEL* απαλείφονται και ότι, επίσης, απαλείφονται οι τρεις όροι που υποσημειώνονται με *DSE* (Derivatives of State Equations) αφού είναι

οι παράγωγοι ως προς x_k των εξισώσεων κατάστασης (σχέση 8.92) και, για το λόγο αυτό, ικανοποιούνται αυτόματα.

Από τους όρους που απομένουν στη σχέση 8.112, όλα τα χωρικά ολοκληρώματα υποσημειώνονται με *FAE* (Field Adjoint Equation) και μαζί συνθέτουν το ολοκλήρωμα

$$\int_{\mathcal{V}} \left[-K_{ij} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i \partial x_j} + E_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} - H\Psi + C \right] \left(\delta U - \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k \right) d\mathcal{V}$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα απαλείφεται και, μαζί του, εξαφανίζεται κάθε επίδραση πεδιακών διακυμάνσεων του U στη διακύμανση της αντικειμενικής συνάρτησης αν διατυπωθούν και ικανοποιηθούν οι πεδιακές συζυγείς εξισώσεις, οι οποίες προφανώς είναι οι

$$-K_{ij} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i \partial x_j} + E_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} - H\Psi + C = 0 \quad (8.113)$$

Παρατηρήστε την ‘ομοιότητα’ της πεδιακής συζυγούς εξίσωσης 8.113 με την πεδιακή εξίσωση κατάστασης 8.92. Από την πλευρά της αριθμητικής ανάλυσης (ΥΡΔ, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, αν διαθέτουμε γνώσεις και λογισμικό για την αριθμητική επίλυση της 8.92, τότε άμεσα μπορούμε (με την ίδια ‘επένδυση’ σε μεθόδους και λογισμικό, με μικρές τροποποιήσεις μόνο) να επιλύσουμε και τη συζυγή της εξίσωση 8.113. Ουσιαστικά, και πέραν από αλλαγές προσήμου (θυμηθείτε τις αλλαγές προσήμου που εμφανίστηκαν στο πρόβλημα του αντίστροφου σχεδιασμού αγωγού, με ψευδο- 1Δ προσέγγιση) η 8.113 περιέχει επιπλέον το σταθερό όρο C , μέσω του οποίου ‘αντιλαμβάνεται’ την αντικειμενική συνάρτηση (βλ. σχέση 8.91).

Στο σημείο αυτό, αξίζει να σχολιαστεί ακόμα περισσότερο το γιατί από τους δύο όρους του ολοκληρώματος (σχέση 8.91) της αντικειμενικής συνάρτησης δεν εμφανίζεται στη συζυγή εξίσωση αυτός με το συντελεστή B_i που αντιστοιχεί στις πρώτες παραγώγους του U . Η απάντηση είναι ενδιαφέρουσα και οδηγεί σε βαθύτερη κατανόηση της έννοιας του συζυγούς προβλήματος. Διατυπώστε, με τη βοήθεια του θεωρήματος Green-Gauss (μιας και είναι στη μορφή *div*), τον όρο αυτό ως:

$$\int_{\mathcal{V}} B_i \frac{\partial U}{\partial x_i} d\mathcal{V} = B_i \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial U}{\partial x_i} d\mathcal{V} = \int_s B_i U n_i ds ds$$

Λόγω της μορφής του, το ολοκλήρωμα από χωρικό μετατρέπεται σε ολοκλήρωμα μόνο κατά μήκος των ορίων του χωρίου \mathcal{V} και, έτσι, δεν συνεισφέρει σε χωρικούς όρους, άρα ούτε στην πεδιακή συζυγή εξίσωση.

Τα σημειούμενα με *AEBC* (Adjoint Equation Boundary Conditions) επικαμπύλια ολοκληρώματα της 8.112 περιέχουν όρους της μορφής $\frac{\partial(\delta U)}{\partial x_i}$ και δU . Οι όροι αυτοί, που γράφονται ως

$$\int_s \left(B_i - E_i \Psi + K_{ji} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \right) \delta U n_i ds - K_{ij} \int_s \Psi \delta \left(\frac{\partial U}{\partial x_j} \right) n_i ds$$

μπορούν επίσης να αμεληθούν αν, κατά μήκος του ορίου s διατυπωθούν κατάλληλες οριακές συνθήκες για τή συζυγή μεταβλητή Ψ και, συγχρόνως, ληφθούν υπόψη οι οριακές συνθήκες του U . Επειδή στόχος μας δεν είναι να φτάσουμε στη διατύπωση των τελικών συζυγών εξισώσεων και οριακών συνθηκών του Ψ για το μαθηματικό πρόβλημα, αλλά να αποκτήσουμε τις απαραίτητες μαθηματικές γνώσεις ώστε να χειριστούμε το πρόβλημα του αντίστροφου σχεδιασμού αεροτομών, η αναφορά στις οριακές συνθήκες του Ψ σταματά εδώ. Παρατηρήστε, πάντως ότι, αν το U διέπεται από οριακές συνθήκες τύπου Dirichlet, τότε $\delta U = 0$ και το πρώτο ολοκλήρωμα από τα δύο είναι μηδέν.

Στη σχέση 8.112, απομένουν οι όροι χωρίς υποσημείωση που συναρτώνται των μεταβολών της γεωμετρίας στο όριο. Οι όροι αυτοί δίνουν τις παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τη μεταβλητή σχεδιασμού b που ελέγχει το σχήμα του ορίου. Οι όροι αυτοί δίνουν

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} = & -B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds + B_i \int_s \frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_k n_k ds + C \int_s U \delta x_k n_k ds \\ & - K_{ij} \int_s \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_j ds + K_{ij} \int_s \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x_j \partial x_k} n_i \delta x_k ds \\ & + E_i \int_s \Psi \frac{\partial U}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds \end{aligned} \quad (8.114)$$

και δίνουν τις ζητούμενες παραγώγους $\frac{\partial F_{aug}}{\partial b}$ αν καθορισθεί η παραμετροποίηση.

8.6.6 Σχεδιασμός Αεροτομής – Συζυγείς Εξισώσεις

Επιστρέφουμε στη σχέση 8.90, όπου πλέον γνωρίζουμε το πως γίνεται η διαχείριση των διακυμάνσεων παραγώγων. Για λόγους συμβατότητας με το μαθηματικό παράδειγμα, ξαναγράφεται η σχέση 8.90 ως

$$\delta F_{aug} = \delta F - \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} \quad (8.115)$$

όπου για τους δείκτες ισχύει $\vec{f}_1 = \vec{f}$, $\vec{f}_2 = \vec{g}$, $x_1 = x$, $x_2 = y$. Με τη βοήθεια της σχέσης 8.96, ο τελευταίος όρος γράφεται

$$\int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial (\delta \vec{f}_i)}{\partial x_i} d\mathcal{U} - \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \frac{\partial (\delta x_k)}{\partial x_i} d\mathcal{U} \quad (8.116)$$

Ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος της 8.116 δίνει

$$\int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial (\delta \vec{f}_i)}{\partial x_i} d\mathcal{U} = - \int_{\mathcal{U}} \delta \vec{U}^T \left(A_i^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} + \int_s \vec{\Psi}^T \delta \vec{f}_i n_i ds \quad (8.117)$$

όπου $A_i = \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial \vec{U}}$ είναι οι Ιακωβιανές ορίζουσες που ορίστηκαν στις σχέσεις 8.85 και 8.86 (σε ταυστική γραφή, είναι $A_1 = A$ και $A_2 = B$).

Το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα της 8.117 αντιμετωπίζεται χωριστά για το επ' άπειρο όριο s_{inf} του \mathcal{U} από ότι για τα στερεά τοιχώματα (s_w , περίγραμμα αεροτομής, σχήμα 8.6). Για το s_{inf} είναι

$$\int_{s_{inf}} \vec{\Psi}^T \delta \vec{f}_i n_i ds = \int_{s_{inf}} \delta \vec{U}^T (A_n^T \vec{\Psi}) ds \quad (8.118)$$

($A_n = A_i n_i = A n_x + B n_y$). Για ατριβή ροή, στα στερεά τοιχώματα s_w ισχύει η συνθήκη μη-εισχώρησης $u_n = u_i n_i = 0$ (η κάθετη στο τοίχωμα ταχύτητα $u_n = u n_x + v n_y$ είναι μηδενική). Ως προς την ατριβή ροή $\vec{f}_n = \vec{f}_i n_i = \vec{f} n_x + \vec{g} n_y$ (ρυθμός ροής μάζας, ορμής και ενέργειας, βλ. σχέση 8.81) η οποία 'διασχίζει' το στερεό τοίχωμα, σε κάθε στοιχειώδες τμήμα του ds , ισχύει

$$\vec{f}_n = \vec{f}_i n_i = n_x \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} + n_y \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho u n_x \\ \rho u u_n + p n_x \\ \rho v u_n + p n_y \\ u_n(\rho E + p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ p n_x \\ p n_y \\ 0 \end{bmatrix}$$

(η σχέση αυτή δείχνει ότι οι μοναδικές δυνάμεις που, σε ατριβή ροή, ασκούνται στα στερεό τοίχωμα είναι οι δυνάμεις πίεσης και οι οποίες είναι κάθετες σε αυτό). Έτσι, το αντίστοιχο της σχέσης 8.118 επικαμπύλιο ολοκλήρωμα κατά μήκος του τοιχώματος της αεροτομής γράφεται

$$\int_{s_w} \vec{\Psi}^T \delta \vec{f}_i n_i ds = \int_{s_w} \vec{\Psi}^T \delta(\vec{f}_i n_i ds) - \int_{s_w} \vec{\Psi}^T \vec{f}_i \delta(n_i ds)$$

όπου η διακύμανση ροή από το τμήμα ds του τοιχώματος της αεροτομής είναι

$$\delta(\vec{f}_i n_i ds) = \begin{bmatrix} 0 & \delta p (n_x ds) + p \delta(n_x ds) & \delta p n_y ds + p \delta(n_y ds) & 0 \end{bmatrix}^T$$

ή

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}^T \delta(\vec{f}_i n_i ds) &= \Psi_{i+1} \delta p n_i ds + \Psi_{i+1} p \delta(n_i ds) \\ &= \delta p (\Psi_2 n_x + \Psi_3 n_y) ds + p (\Psi_2 \delta(n_x ds) + \Psi_3 \delta(n_y ds)) \end{aligned}$$

οπότε

$$\int_{s_w} \vec{\Psi}^T \delta \vec{f}_i n_i ds = \int_{s_w} \Psi_{i+1} \delta p n_i ds + \int_{s_w} (\Psi_{i+1} p - \vec{\Psi}^T \vec{f}_i) \delta(n_i ds) \quad (8.119)$$

Ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος της 8.116 γράφεται

$$- \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \frac{\partial(\delta x_k)}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \right) \delta x_k d\mathcal{U} - \int_s \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \delta x_k n_i ds \quad (8.120)$$

όπου περαιτέρω ανάπτυξη δίνει

$$\int_{\mathcal{U}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \right) \delta x_k d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial \vec{\Psi}^T}{\partial x_i} \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \delta x_k d\mathcal{U} + \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \right) \delta x_k d\mathcal{U}$$

ή

$$\int_{\mathcal{U}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_k} \right) \delta x_k d\mathcal{U} = \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial \vec{U}^T}{\partial x_k} (A_i^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x_i}) \delta x_k d\mathcal{U} + \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) \delta x_k d\mathcal{U} \quad (8.121)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις από 8.117 ως 8.121, ο όρος $\vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right)$ για την ατριβή ροή λαμβάνει την τελική μορφή

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \delta \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} &= - \int_{\mathcal{U}} \left(\delta \vec{U}^T - \frac{\partial \vec{U}^T}{\partial x_k} \delta x_k \right) \left(A_i^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U} \\ &+ \int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) \delta x_k d\mathcal{U} \\ &- \int_{s_w} \frac{\partial \vec{U}^T}{\partial x_k} A_n^T \vec{\Psi} \delta x_k ds + \int_{s_w} \Psi_{i+1} n_i \delta p ds \\ &+ \int_{s_w} (\Psi_{i+1} p - \vec{\Psi}^T \vec{f}_i) \delta(n_i ds) + \int_{s_{inf}} \delta \vec{U}^T (A_n^T \vec{\Psi}) ds \quad (8.122) \end{aligned}$$

Η αντικατάσταση των σχέσεων 8.87 και 8.122 στη σχέση 8.115 δίνει

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} &= \underbrace{\frac{1}{2} \int_{s_w} (p - p_{tar})^2 \delta(ds)}_{BSD} + \underbrace{\int_{s_w} (p - p_{tar}) \delta p ds}_{BCW} \\ &- \underbrace{\int_{\mathcal{U}} \left(\delta \vec{U}^T - \frac{\partial \vec{U}^T}{\partial x_k} \delta x_k \right) \left(A_i^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x_i} \right) d\mathcal{U}}_{FAE} + \underbrace{\int_{\mathcal{U}} \vec{\Psi}^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \vec{f}_i}{\partial x_i} \right) \delta x_k d\mathcal{U}}_{DFE} \\ &- \underbrace{\int_{s_w} \frac{\partial \vec{U}^T}{\partial x_k} A_n^T \vec{\Psi} \delta x_k ds}_{BSD} + \underbrace{\int_{s_w} \Psi_{i+1} n_i \delta p ds}_{BCW} \\ &+ \underbrace{\int_{s_w} (\Psi_{i+1} p - \vec{\Psi}^T \vec{f}_i) \delta(n_i ds)}_{BSD} + \underbrace{\int_{s_{inf}} \delta \vec{U}^T (A_n^T \vec{\Psi}) ds}_{BCINF} \quad (8.123) \end{aligned}$$

Ο όρος που υποσημειώνεται με *DFE* (Derivative of Flow Equations) είναι μηδενικός, μιας και αποτελεί την κατά x_k παράγωγο των εξισώσεων ροής. Ο υποσημειούμενος με

FAE (Field Adjoint Equations) όρος αποτελεί τις (γραμμικές) συζυγείς εξισώσεις, οι οποίες όταν προστεθεί και ο (ψευδο) χρονικός όρος παίρνουν τη μορφή

$$\frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t} - A_i^T \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial x_i} = \vec{0} \quad (8.124)$$

Η ικανοποίηση των συζυγών εξισώσεων απαλείφει τους όρους *FAE* από την εξίσωση 8.123. Κατά μήκος των στερεών τοιχωμάτων, απαλείφονται οι όροι *BCW* (Boundary Condition–Wall, συχνά ονομάζεται και συνθήκη συμβατότητας (compatibility condition) απαιτώντας για το $\vec{\Psi}$ να ισχύει

$$(p - p_{tar}) + \Psi_{i+1} n_i = (p - p_{tar}) + \Psi_2 n_x + \Psi_3 n_y = 0 \quad (8.125)$$

Ο σχολιασμός της συνθήκης συμβατότητας έχει ενδιαφέρον: κατά μήκος του στερεού τοιχώματος εκεί όπου για το πρωτεύον πρόβλημα (αυτό της ροής) ισχύει η συνθήκη μη-εισχώρησης

$$u n_x + v n_y = U_2 n_x + U_3 n_y = 0$$

δια το δυαδικό ή συζυγές πρόβλημα ισχύει η 8.125, είναι δηλαδή

$$\Psi_2 n_x + \Psi_3 n_y = -(p - p_{tar})$$

Με τη σύγκλιση της μεθόδου βελτιστοποίησης (μετά από όσους κύκλους χρειαστεί) ο στόχος θα έχει επιτευχθεί (θα είναι, δηλαδή, $p = p_{tar}$), άρα ποιοτικά τότε οι δύο προηγούμενες συνθήκες θα είναι ταυτόσημες.

Με αντίστοιχη λογική, απαλείφεται και το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα κατά μήκος του επ• άπειρο ορίου (όρος *BCINF*, Boundary Conditions–Infinite) απαιτώντας εκεί να ισχύει η

$$\delta \vec{U}^T (A_n^T \vec{\Psi}) = \vec{0} \quad (8.126)$$

Οι όροι που απομένουν στην 8.123 δίνουν τη διακύμανση της αντικειμενικής συνάρτησης που αντιστοιχούν σε διακυμάνσεις του στερεού ορίου (της μορφής της αεροτομής). Είναι

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} &= \frac{1}{2} \int_{s_w} (p - p_{tar})^2 \delta(ds) - \int_{s_w} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x_k} A_n^T \vec{\Psi} \delta x_k ds \\ &+ \int_{s_w} (\Psi_{i+1} p - \vec{\Psi}^T \vec{f}_i) \delta(n_i ds) \end{aligned} \quad (8.127)$$

Η 8.127 μπορεί να αναλυθεί περαιτέρω μόνο αφού αποφασισθεί η μέθοδος παραμετροποίησης της βεωμετρίας και ορισθούν οι μεταβλητές σχεδιασμού.

8.6.7 Παραμετροποίηση και Μεταβολές Γεωμετρικών Ποσοτήτων

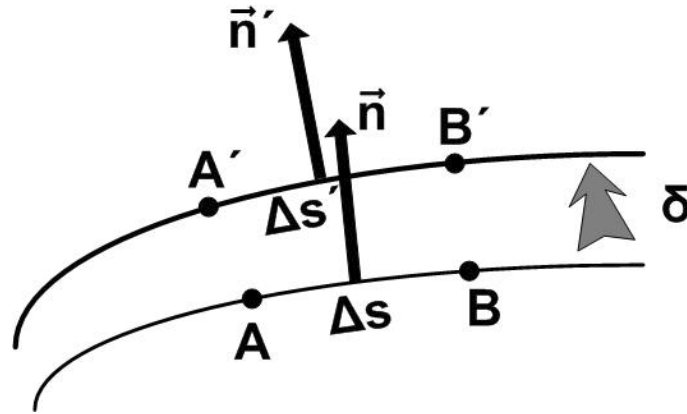
Η χρήση της σχέσης 8.127 για τον υπολογισμό των παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού είναι άμεση αν προηγηθεί η παραμετροποίηση της αεροτομής και βρεθούν αρχικά σχέσεις των $ds, n_x ds, n_y ds$ ως συνάρτηση του \vec{b} και τελικά σχέσεις των $\delta(ds), \delta(n_x ds), \delta(n_y ds)$. Η ολοκλήρωση στην εξίσωση 8.127 αντικαθίσταται πρακτικά με άθροιση στους κόμβους και, συνεπώς, αναζητούνται ουσιαστικά σχέσεις για τα $\delta(\Delta s), \delta(n_x \Delta s), \delta(n_y \Delta s)$. Για τα επόμενα, ας γίνει προσεκτική διάκριση των συμβόλων δ (μεταβολή ή διακύμανση) και Δ ('πεπερασμένη'•• διαφορά τιμής μιας ποσότητας μεταξύ δύο διαδοχικών κόμβων πάνω στο περίγραμμα της αεροτομής).

Ακολουθεί επαρκές δείγμα της διαδικασίας αυτής. Θα χρησιμοποιηθούν πολυώνυμα Bézier–Bernstein για μια πλευρά της αεροτομής, έστω την πλευρά υποπίεσης. Η πλευρά αυτή ξεκινά από το $x = 0$ και τερματίζει στο $x = 1$, δηλαδή η αεροτομή έχει μοναδιαία χορδή. Οποιαδήποτε διαφορετική παραμετροποίηση προσαρμόζεται σχετικά εύκολα αν γίνει κατανοητός ο τρόπος εργασίας και οι παραδοχές που πρέπει να γίνουν. Η παραμετροποίηση χρησιμοποιεί N^* σημεία ελέγχου, με συντεταγμένες τις (X_i, Y_i) , $i \in [0, N^* - 1]$. Προφανώς $(X_0, Y_0) = (0, 0)$ και $(X_{N^*-1}, Y_{N^*-1}) = (1, 0)$. Έχοντας ένα σύνολο τιμών για τα (X_i, Y_i) κατασκευάζεται το περίγραμμα (ουσιαστικά, εδώ, μόνο η πλευρά υποπίεσης) της αεροτομής, τοποθετώντας σε αυτήν πλήθος σημείων (κόμβων, για το πλέγμα που θα σχηματισθεί) που επιλέγει ο χρήστης. Ας υποθέσουμε (και έτσι γίνεται συνήθως) ότι τα τελικά σημεία του περιγράμματος δημιουργούνται πάντοτε για την ίδια αύξουσα κατανομή τιμών t στο διάστημα $[0 : 1]$.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, υποθέτουμε ότι οι N μεταβλητές σχεδιασμού $\vec{b} = (b_1, \dots, b_N)^T$ είναι οι τετμημένες και τεταγμένες όλων των σημείων ελέγχου πέραν του πρώτου και του τελευταίου τα οποία παραμένουν σταθερά. Τότε, η συσχέτιση N και N^* είναι $N = 2(N^* - 2)$.

Σύμφωνα με το σχήμα 8.9, ας είναι A και B δύο διαδοχικοί κόμβοι πάνω στην πλευρά υποπίεσης της αεροτομής. Αυτοί προκύπτουν για το τρέχον σύνολο τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} , για δύο διαδοχικές τιμές της παραμέτρου t (έστω t και $t + \Delta t$) των πολυωνύμων Bézier–Bernstein. Έστω ότι μεταβάλλονται κατά $\delta \vec{b}$ οι μεταβλητές σχεδιασμού που πλέον γίνονται ίσες με $\vec{b} + \delta \vec{b}$. Η μεταβολή αυτή προκαλεί αλλαγή στο σχήμα της αεροτομής. Για τις ίδιες τιμές της παραμέτρου t (t και $t + \Delta t$), οι νέοι κόμβοι που προκύπτουν συμβολίζονται με A' και B' . Θεωρείται, συνεπώς, ότι ο A μετακινήθηκε στο A' και ο B στο B' . Συνέπεια της μετακίνησης είναι η μεταβολή του μήκους τόξου από Δs σε $\Delta s' = \Delta s + \delta(\Delta s)$ και αυτή του μοναδιαίου κάθετου διανύσματος από $\vec{n} = (n_x, n_y)$ σε $\vec{n}' = (n'_x, n'_y) = \vec{n} + \delta \vec{n} = (n_x + \delta n_x, n_y + \delta n_y)$.

Με βάση τα ανωτέρω, οι συντεταγμένες των τεσσάρων σημείων του σχήματος 8.9 είναι



Σχήμα 8.9: Υπολογισμός των μεταβολών γεωμετρικών ποσοτήτων λ.χ. στην πλευρά υποπίεσης μιας αεροτομής. Με A και B συμβολίζονται δύο διαδοχικοί κόμβοι πάνω στην πλευρά αυτή, οι οποίοι προκύπτουν για δύο διαδοχικές τιμές της παραμέτρου t , σύμφωνα με τη θεωρία των πολυωνύμων Bézier–Bernstein. Προκαλώντας μικρή διακύμανση στις τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού, τα δύο σημεία μετακινούνται στα A' και B' (έκαστο διατηρώντας την τιμή της παραμέτρου t). Συνέπεια της μετακίνησης είναι η μεταβολή του μήκους τόξου και του αντίστοιχου μοναδιαίου κάθετου διανύσματος.

$$\begin{aligned}
 (x_A, y_A) &= \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t) X_i, \sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t) Y_i \right) \\
 (x_{A'}, y_{A'}) &= \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t) (X_i + \delta X_i), \sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t) (Y_i + \delta Y_i) \right) \\
 (x_B, y_B) &= \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t + \Delta t) X_i, \sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t + \Delta t) Y_i \right) \\
 (x_{A'}, y_{A'}) &= \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t + \Delta t) (X_i + \delta X_i), \sum_{i=0}^{N^*-1} C_i(t + \Delta t) (Y_i + \delta Y_i) \right)
 \end{aligned}$$

ενώ

$$\begin{aligned}\Delta x = x_B - x_A &= \sum_{i=0}^{N^*-1} (C_i(t + \Delta t) - C_i(t)) X_i \\ \Delta y = y_B - y_A &= \sum_{i=0}^{N^*-1} (C_i(t + \Delta t) - C_i(t)) Y_i \\ \Delta x' = x_{B'} - x_{A'} &= \sum_{i=0}^{N^*-1} (C_i(t + \Delta t) - C_i(t)) (X_i + \delta X_i) \\ \Delta y' = y_{B'} - y_{A'} &= \sum_{i=0}^{N^*-1} (C_i(t + \Delta t) - C_i(t)) (Y_i + \delta Y_i)\end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned}\Delta x = x_B - x_A &= \Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) X_i = \Delta t \dot{x} \\ \Delta y = y_B - y_A &= \Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i = \Delta t \dot{y} \\ \Delta x' = x_{B'} - x_{A'} &= \Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (X_i + \delta X_i) = \Delta t \dot{x}' \\ \Delta y' = y_{B'} - y_{A'} &= \Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (Y_i + \delta Y_i) = \Delta t \dot{y}'\end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned}\dot{C}_i(t) &= \frac{dC}{dt}(t) \\ \dot{x} &= \frac{dx}{dt} = \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) X_i \\ \dot{y} &= \frac{dy}{dt} = \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i\end{aligned}$$

Οι ποσότητες \dot{C} υπολογίζονται αναλυτικά από διαφορίση ως προς t των συντελεστών των πολυωνύμων Bézier–Bernstein. Τα αντίστοιχα μήκη τόξων είναι

$$\begin{aligned}
 (\Delta s)^2 &= (\Delta t)^2 \left[\left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) X_i \right)^2 + \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i \right)^2 \right] \\
 (\Delta s')^2 &= (\Delta t)^2 \left[\left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (X_i + \delta X_i) \right)^2 + \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (Y_i + \delta Y_i) \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

Αφού

$$\delta((\Delta s)^2) = (\Delta s')^2 - (\Delta s)^2$$

και

$$\delta((\Delta s)^2) = 2(\Delta s)\delta(\Delta s)$$

εύκολα συνάγεται ότι

$$\delta(\Delta s) = \frac{(\Delta t)^2}{\Delta s} \left[\left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) X_i \right) \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i \right) + \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i \right) \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i \right) \right]$$

ή, συντομογραφικά,

$$\delta(\Delta s) = \frac{(\Delta t)^2}{\Delta s} \left[\dot{x} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i \right) + \dot{y} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i \right) \right] \quad (8.128)$$

Όροι με γινόμενα (τετράγωνα) μεταβολών έχουν αμεληθεί ως πολύ μικροί για μικρές μεταβολές. Από την άλλη πλευρά, το κάθετο μοναδιαίο διάνυσμα στο τμήμα AB γράφεται

$$\vec{n} = (n_x, n_y) = \left(-\frac{\Delta y}{\Delta s}, \frac{\Delta x}{\Delta s} \right)$$

και με τη μεταβολή των σημείων ελέγχου γίνεται

$$\vec{n}' = (n'_x, n'_y) = \left(-\frac{\Delta y'}{\Delta s'}, \frac{\Delta x'}{\Delta s'} \right)$$

Είναι

$$n_x = -\frac{\Delta y}{\Delta s} = -\frac{\Delta t}{\Delta s} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i \right) = -\frac{\Delta t}{\Delta s} \dot{y} \quad (8.129)$$

$$n_y = \frac{\Delta x}{\Delta s} = \frac{\Delta t}{\Delta s} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) X_i \right) = \frac{\Delta t}{\Delta s} \dot{x} \quad (8.130)$$

και η σχέση 8.128 ξαναγράφεται ως

$$\delta(\Delta s) = \Delta t \left[n_y \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i \right) - n_x \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i \right) \right] \quad (8.131)$$

Ακολουθούν, ενδεικτικά, σχέσεις που αφορούν τη μεταβολή της κατά x συνιστώσας του μοναδιαίου διανύσματος. Είναι

$$n'_x = -\frac{\Delta y'}{\Delta s'} = -\frac{\Delta t}{\Delta s + \delta(\Delta s)} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (Y_i + \delta Y_i) \right)$$

Η μεταβολή του n_x ορίζεται από τη διαφορά τους

$$\delta n_x = n'_x - n_x = -\frac{\Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) (Y_i + \delta Y_i)}{\Delta s + \delta(\Delta s)} + \frac{\Delta t \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i}{\Delta s}$$

όπου αφού τα κλάσματα γίνουν ομώνυμα και θεωρήσουμε ότι στον παρονομαστή ισχύει η απλοποιητική παραδοχή $\Delta s \cdot (\Delta s + \delta(\Delta s)) \approx (\Delta s)^2$, προκύπτει (με τη βοήθεια και των 8.129, 8.130) και 8.131)

$$\begin{aligned} \delta n_x = n'_x - n_x &= \frac{\Delta t}{(\Delta s)^2} \left(-\Delta s \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i + \delta(\Delta s) \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) Y_i \right) \\ &= -\frac{\Delta t}{\Delta s} \left(\sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i + n_x n_y \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i - n_x^2 \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i \right) \end{aligned}$$

τελική γραφή της οποίας είναι η

$$\delta n_x = -\frac{\Delta t}{\Delta s} \left((1 - n_x^2) \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i + n_x n_y \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i \right) \quad (8.132)$$

Με ακριβώς όμοιο τρόπο αποδεικνύεται και η σχέση μεταβολής της δεύτερης συνιστώσας του κάθετου μοναδιαίου διανύσματος, η οποία είναι

$$\delta n_y = \frac{\Delta t}{\Delta s} \left((1 - n_y^2) \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta X_i + n_x n_y \sum_{i=0}^{N^*-1} \dot{C}_i(t) \delta Y_i \right) \quad (8.133)$$

Έχοντας ήδη παράγει τις εξαρτώμενες από την παραμετροποίηση σχέσεις 8.131, 8.132 και 8.132, είναι χρήσιμο να συνοψίσουμε τα βήματα που απαιτούνται ώστε η σχέση 8.127 να δώσει τις ζητούμενες παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Τα δX_i , δY_i συνθέτουν το διάνυσμα μεταβολών των μεταβλητών σχεδιασμού, δηλαδή το $\delta \vec{b}$. Είναι απλό να αντιληφθούμε τις τρεις προαναφερθείσες σχέσεις στη μορφή

$$\delta(\Delta s) = T_{ds} \delta \vec{b}, \quad \delta n_x = T_{nx} \delta \vec{b}, \quad \delta n_y = T_{ny} \delta \vec{b}$$

με γνωστά μητρώα-συντελεστές (T_{ds} , T_{nx} , T_{ny}) υπενθυμίζοντας ότι ποσότητες ως οι $C_i(t)$ ή οι $\dot{C}_i(t)$ προσδιορίζονται αναλυτικά από την επιλεγείσα παραμετροποίηση. Τότε, η σχέση 8.127 γράφεται ποιοτικά στη μορφή

$$\delta F_{aug} = \sum_{i=1}^N T_i b_i \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta F_{aug}}{db_i} = \frac{\delta F}{db_i} = T_i$$

που, όντως, υπολογίζει τις παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης.

Κεφάλαιο 9

Παραμετροποίηση Αεροδυναμικών Μορφών

Η ενασχόληση με θέματα βελτιστοποίησης αεροδυναμικών μορφών προϋποθέτει ιδιαίτερη εξοικείωση με θέματα παραμετροποίησης μορφών. Η παραμετροποίηση παίζει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο αφού αυτή καθορίζει τον αριθμό των ελεύθερων μεταβλητών που θα διαχειρισθεί το λογισμικό. Για λόγους πληρότητας, ακολουθούν τρία μοντέλα παραμετροποίησης για αεροτομές: οι κυβικές B-Splines, οι καμπύλες Bézier και η παραμετροποίηση *PARSEC*.

9.1 Κυβικές B-Splines

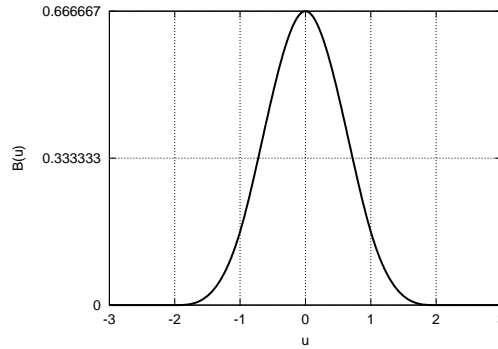
Οι κυβικές B-Splines χρησιμοποιούνται συχνότατα ως εργαλείο τμηματικά συνεχούς προσέγγισης μια καμπύλης, με βαθμούς ελευθερίας τις συντεταγμένες \vec{r}_i , $i = 0, \dots, N$ των $N + 1$ σημείων ελέγχου (\vec{r}_i). Η διαδικασία σχηματισμού της καμπύλης εμπλέκει προαιρετικά δύο επιπλέον σημεία (ψευδοσημεία ελέγχου, \vec{r}_{-1} και \vec{r}_{N+1} , μη ελεγχόμενα από το χρήστη). Ο ρόλος τους είναι να εξασφαλίζουν ότι η καμπύλη διέρχεται από τα δύο ακραία σημεία ελέγχου, τα \vec{r}_0 και \vec{r}_N .

Δομικό στοιχείο των κυβικών B-Splines είναι ένα πολυώνυμο τρίτου βαθμού ως προς την παράμετρο u , το οποίο λαμβάνει μη-μηδενικές τιμές στο διάστημα $[-2, 2]$ και δίνεται από τη σχέση

$$B(u) = \begin{cases} \frac{(2+u)^3}{6} & -2 \leq u \leq -1 \\ \frac{4-6u^2-3u^3}{6} & -1 \leq u \leq 0 \\ \frac{4-6u^2+3u^3}{6} & 0 \leq u \leq 1 \\ \frac{(2-u)^3}{6} & 1 \leq u \leq 2 \\ 0 & \text{αλλού} \end{cases} \quad (9.1)$$

Συγκρατείστε ότι $B(0) = 2/3$, $B(-1) = B(1) = 1/3$ και $B(-2) = B(2) = 0$.

Με τη βοήθεια του πολυωνύμου 9.1 και χρησιμοποιώντας αφενός μεν τις συντεταγμένες των $N + 1$ σημείων ελέγχου, αφετέρου δε τις βοηθητικές σχέσεις (θα δοθούν



Σχήμα 9.1: Γραφική παράσταση του πολυωνύμου τρίτου βαθμού που αποτελεί το δομικό στοιχείο των κυβικών B-Splines.

παρακάτω) προσδιορισμού των \vec{r}_{-1} και \vec{r}_{N+1} , σχηματίζεται η τελική καμπύλη ως

$$\vec{r}(\mu) = \sum_{i=-1}^{N+1} B(N\mu - i) \vec{r}_i \quad (9.2)$$

όπου $\mu \in [0, 1]$ είναι μια παράμετρος που 'σαρώνει' την καμπύλη σε τρόπο ώστε το πρώτο σημείο ελέγχου \vec{r}_0 να αντιστοιχεί στο $\mu = 0$ ενώ το τελευταίο \vec{r}_N στο $\mu = 1$. Οι εκφράσεις 9.1 σε συνδυασμό με τη σχέση 9.2 καθορίζουν το αν και κατά πόσο επηρεάζεται η θέση του σημείου της τελικής καμπύλης που αντιστοιχεί σε κάποια τιμή της παραμέτρου μ ($0 \leq \mu \leq 1$) από καθένα από τα σημεία ελέγχου.

Με τη βοήθεια της 9.1 και για $\mu = 0$ είναι

$$\vec{r}(0) = \sum_{i=-1}^{N+1} B(-i) \vec{r}_i = \sum_{i=-1}^1 B(-i) \vec{r}_i = B(-1) \vec{r}_{-1} + B(0) \vec{r}_0 + B(1) \vec{r}_1 \quad (9.3)$$

ή, με αριθμητική αντικατάσταση

$$\vec{r}(0) = \frac{1}{6} \vec{r}_{-1} + \frac{2}{3} \vec{r}_0 + \frac{1}{6} \vec{r}_1 \quad (9.4)$$

Όμοια, για $\mu = 1$, προκύπτει

$$\vec{r}(1) = \frac{1}{6} \vec{r}_{N-1} + \frac{2}{3} \vec{r}_N + \frac{1}{6} \vec{r}_{N+1} \quad (9.5)$$

Έτσι, οι απαιτήσεις $\vec{r}(0) = \vec{r}_0$ και $\vec{r}(1) = \vec{r}_N$ προσδιορίζουν τις θέσεις των ψευδοσημείων ελέγχου, ως

$$\begin{aligned} \vec{r}_{-1} &= 2 \vec{r}_0 - \vec{r}_1 \\ \vec{r}_{N+1} &= 2 \vec{r}_N - \vec{r}_{N-1} \end{aligned} \quad (9.6)$$

Μια ενδιαφέρουσα ιδιότητα των κυβικών B-splines είναι το ότι τα δύο ακραία σημεία ελέγχου (πρώτο–δεύτερο και τελευταίο–προτελευταίο, χωρίς να προσμετρώνται τα ψευδοσημεία ελέγχου) καθορίζουν την κλίση της καμπύλης προσέγγισης στα ακραία σημεία. Είναι εύκολο να δειχθεί ότι

$$\dot{\vec{r}}(0) = N(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) \quad (9.7)$$

$$\dot{\vec{r}}(1) = N(\vec{r}_N - \vec{r}_{N-1}) \quad (9.8)$$

Σχέσεις όπως η 9.7 έστω και αν εμπλέκουν παραγώγους ως προς την παράμετρο μ είναι εύκολα μετατρέψιμες σε κλίσεις της καμπύλης. Ενδεικτικά

$$\frac{dy}{dx}(0) = \frac{\dot{y}(0)}{\dot{x}(0)} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (9.9)$$

Επειδή το περίγραμμα λ.χ. μιας αεροτομής μπορεί να δημιουργηθεί από συρραφή δι-αδοχικών, ανεξάρτητων καμπύλων B-Splines, είναι ιδιαίτερα χρήσιμο να υπάρχει ένα εργαλείο (όπως είναι η σχέση 9.9) που να χειρίζεται προβλήματα συνέχειας τιμών και παραγώγων. Εννοείται, βέβαια, ότι ο μηχανικός που εμπλέκεται σε έναν τέτοιο σχεδιασμό ενδέχεται να χρειαστεί να διατυπώσει και παραγώγους υψηλότερης τάξης, ανάλογα με τις απαιτήσεις του σχεδιασμού.

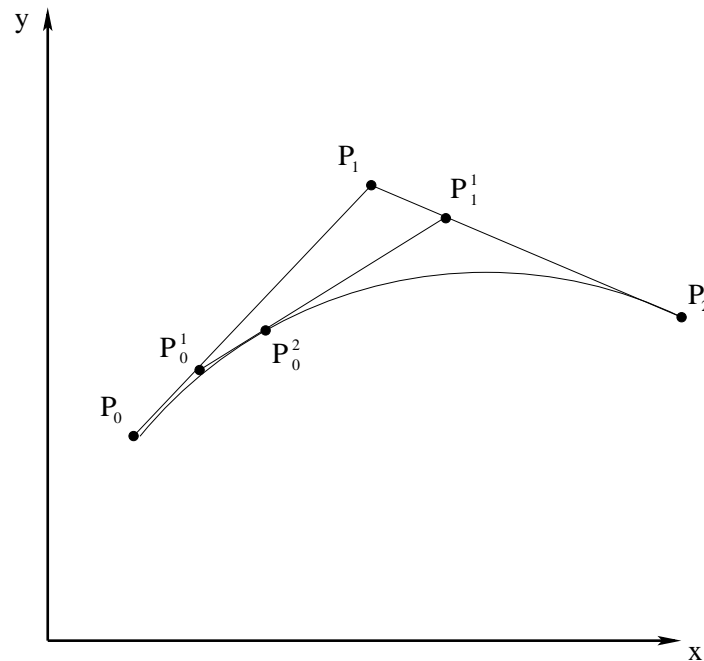
Το πολύγωνο ορισμού μιας B-spline (έτσι ονομάζεται συνήθως η αλληλουχία των $N + 1$ σημείων ελέγχου) μπορεί να περιλαμβάνει ένα ή περισσότερα σημεία πολλαπλές φορές. Ένα διπλό σημείο ελέγχου έλκει την καμπύλη προσέγγισης προς το μέρος του, ενώ η τελική καμπύλη διέρχεται αναγκαστικά από κάθε τριπλό σημείο ελέγχου.

9.2 Πολυώνυμα Bézier

Οι καμπύλες Bézier–Bernstein (ή απλά καμπύλες Bézier, όπως επίσης αποκαλούνται λόγω συντομίας) αποτελούν έναν πολύ απλό και ευέλικτο τρόπο να προσεγγιστεί μια γεωμετρική μορφή (έστω μια αεροτομή) χρησιμοποιώντας έναν περιορισμένο αριθμό σημείων ελέγχου. Ο χρήστης χειρίζεται ένα (μικρό συνήθως, εδώ το πλήθος τους ανά καμπύλη θα συμβολίζεται με $N + 1$) αριθμό σημείων (**σημεία ελέγχου**, control points) και από αυτό παράγει μια τεράστια ποικιλία μορφών. Βασική ιδιότητα της καμπύλης Bézier με σημεία ελέγχου τα $(x_0, y_0), \dots, (x_N, y_N)$ είναι το ότι η καμπύλη ξεκινά (‘περνά’) από το πρώτο και τερματίζει στο (‘περνά’ από το) τελευταίο σημείο. Ακόμη, το ζεύγος των δύο πρώτων και το ζεύγος των δύο τελευταίων σημείων καθορίζει την κλίση της καμπύλης στο πρώτο και στο τελευταίο σημείο της Άμεσα συνδεδεμένος με τις καμπύλες Bézier είναι αναδρομικός αλγόριθμος του de Casteljau, που θα παρουσιασθεί στη συνέχεια.

Αλγόριθμος de Casteljau

Πριν την παρουσίαση του γενικευμένου αλγορίθμου του de Casteljau, ας παρουσιάσουμε την ειδική εφαρμογή του για τρία σημεία (τα $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2$) όπως στο σχήμα



Σχήμα 9.2: Εφαρμογή του αλγόριθμου de Casteljau για τρία δεδομένα σημεία.

9.2.

Έστω t μια παράμετρος $t \in [0, 1]$, με τη βοήθεια της οποίας και με αφετηρία τα τρία σημεία \vec{r}_0 , \vec{r}_1 και \vec{r}_2 δημιουργούμε για κάθε τιμή της t δύο νέα σημεία ως εξής :

$$\begin{aligned}\vec{r}_0^1(t) &= (1-t)\vec{r}_0 + t\vec{r}_1 \\ \vec{r}_1^1(t) &= (1-t)\vec{r}_1 + t\vec{r}_2\end{aligned}\quad (9.10)$$

Από τον τρόπο ορισμού του, το σημείο $r_0^1(t)$ ανήκει στο ευθύγραμμο τμήμα P_0P_1 και το σημείο $r_1^1(t)$ στο τμήμα P_1P_2 . Με αφετηρία τα δύο νέα σημεία \vec{r}_0^1 και \vec{r}_1^1 που έστω προέκυψαν για μια τιμή της παραμέτρου t δημιουργούμε ένα τρίτο νέο σημείο με βάση τη σχέση

$$\vec{r}_0^2(t) = (1-t)\vec{r}_0^1 + t\vec{r}_1^1 \quad (9.11)$$

(για την ίδια τιμή της t) που, με τη σειρά του θα ανήκει στο ευθύγραμμο τμήμα $P_0^1P_1^1$. Με την εισαγωγή των εξισώσεων 9.10 στην 9.11 προκύπτει ότι

$$\vec{r}_0^2(t) = (1-t)^2\vec{r}_0 + 2t(1-t)\vec{r}_1 + t^2\vec{r}_2 \quad (9.12)$$

δηλαδή μια τετραγωνική έκφραση ως προς την παράμετρο t , γεγονός που αντικατοπτρίζεται στον άνω δείκτη του διανύσματος θέσης \vec{r}_0^2 . Καθώς το t μεταβάλλεται γενικά στο $(-\infty, +\infty)$, ή ειδικά όπως εδώ ορίστηκε στο $[0, 1]$ δημιουργείται και σχεδιάζεται

μια παραβολή. Η παραβολή αυτή, όπως φάνηκε παραπάνω, σχηματίστηκε από την επαναληπτική (αναδρομική) εφαρμογή σχημάτων γραμμικής παρεμβολής.

Με κατανοητό το απλό αυτό εισαγωγικό παράδειγμα, παρουσιάζουμε στη συνέχεια τον αναδρομικό τύπο του de Casteljau, για $N + 1$ σημεία στο διδιάστατο ή τριδιάστατο χώρο, τα $\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$. Μαθηματικά εκφράζεται με μια και μόνη σχέση ως

$$\vec{r}_i^\alpha(t) = (1-t) \vec{r}_i^{\alpha-1}(t) + t \vec{r}_{i+1}^{\alpha-1}(t) \quad (9.13)$$

όπου θέτουμε ότι $\vec{r}_i^0(t) = \vec{r}_i$, $i = 0, \dots, N$ (δηλαδή τα δεδομένα $N + 1$ σημεία που θα ονομάζονται πλέον *σημεία ελέγχου* ή *σημεία Bézier*). Αντίστοιχα, το πολυώνυμο που ορίζεται από την αλληλουχία σημείων $\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$ θα λέγεται *παλύγωνο Bézier*. Η σχέση 9.13, ως αναδρομικός τύπος προγραμματιζόμενος σε οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού αποτελείται από δύο βρόχους τον ένα μέσα στον άλλο. Ο εξωτερικός βρόχος έχει ως μεταβλητή την α ($\alpha = 1, \dots, N$) και ο εσωτερικός έχει ως μεταβλητή την i και μεταβλητά όρια ($i = 0, \dots, N - \alpha$). Η εκτέλεση των πράξεων που αντιστοιχούν στη σχέση 9.13 καταλήγουν στην καμπύλη $\vec{r}_0^N(t)$ που είναι η ζητούμενη καμπύλη Bézier για τα σημεία ελέγχου που προαναφέραμε.

Ο διπλός βρόχος της εξίσωσης 9.13 παριστάνεται εποπτικά με το τριγωνικό σχηματισμό (κάτω τριγωνικό μητρώο)

$$\begin{bmatrix} \vec{r}_0 & & & & & \\ \vec{r}_1 & \vec{r}_0^1 & & & & \\ \vec{r}_2 & \vec{r}_1^1 & \vec{r}_0^2 & & & \\ & & \vdots & & & \\ \vec{r}_N & \vec{r}_{N-1}^1 & \vec{r}_{N-2}^2 & \dots & \vec{r}_0^N & \end{bmatrix} \quad (9.14)$$

που ονομάζεται και σχηματισμός του de Casteljau. Δίνει δε την εποπτεία ότι, για μια τιμή του $t \in [0, 1]$ αναδρομικά, η κάθε στήλη δημιουργεί την επομένη στα δεξιά της με ένα στοιχείο λιγότερο, καταλήγοντας στο $\vec{r}_0^N(t)$ που είναι και η ζητούμενη καμπύλη Bézier.

Μέχρι τώρα παρουσιάσαμε εποπτικά έναν αλγόριθμο, τον αλγόριθμο του de Casteljau που εύκολα και αναδρομικά παράγει μια καμπύλη Bézier, με αφετηρία $N + 1$ διαθέσιμα σημεία ελέγχου. Παρά όμως την απλότητα ενός τέτοιου αναδρομικού τύπου, θα ήταν επιθυμητό να υπάρχει διαθέσιμη και μια αναλυτική έκφραση για την καμπύλη Bézier, ώστε αυτή να προκύπτει σημείο-προς-σημείο με ευθεία αριθμητική αντικατάσταση αντί του αναδρομικού αλγορίθμου. Η μαθηματική αυτή έκφραση υπάρχει και χρησιμοποιεί τα λεγόμενα Bernstein πολυώνυμα. Έτσι η καμπύλη Bézier, ή σωστότερα η καμπύλη Bézier-Bernstein δίνεται από τη σχέση

$$\vec{r}_0^N(t) = \sum_{i=0}^N \vec{r}_i B_i^N(t) \quad (9.15)$$

ως γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων θέσης των σημείων ελέγχου και με συντελεστές οι οποίοι προσδιορίζονται από τα πολυώνυμα Bernstein

$$B_i^N(t) = \binom{N}{i} t^i (1-t)^{N-i} \quad (9.16)$$

Οι σχέσεις 9.15 και 9.16 είναι έτοιμες να εφαρμοστούν - προγραμματιστούν για το σχηματισμό της καμπύλης Bézier. Υπενθυμίζεται ότι

$$\binom{\alpha}{i} = \frac{\alpha!}{i!(\alpha-i)!} \quad (9.17)$$

Η σχέση 9.16 είναι γενική, ισχύει δηλαδή για οποιαδήποτε τιμή του άνω δείκτη $\alpha = 0, \dots, N$. Γράφεται δηλαδή ως

$$B_i^\alpha(t) = \binom{\alpha}{i} t^i (1-t)^{\alpha-i} \quad (9.18)$$

ενώ εύκολα αποδεικνύεται ότι ισχύει ο αναδρομικός τύπος

$$B_i^\alpha(t) = (1-t)B_i^{\alpha-1}(t) + tB_{i-1}^{\alpha-1}(t) \quad (9.19)$$

με

$$B_0^0(t) \equiv 1 \quad (9.20)$$

και

$$B_j^\alpha(t) \equiv 0 \quad , \quad j \notin \{0, \dots, N\} \quad (9.21)$$

Ο αναδρομικός τύπος 9.19 ουσιαστικά παραπέμπει στον αλγόριθμο de Casteljau. Η απόδειξη του 9.19 είναι σύντομη και παρατίθεται αμέσως παρακάτω

$$\begin{aligned} B_i^\alpha(t) &= \binom{\alpha}{i} t^i (1-t)^{\alpha-i} = \\ &= \binom{\alpha-1}{i} t^i (1-t)^{\alpha-i} + \binom{\alpha-1}{i-1} t^i (1-t)^{\alpha-i} \\ &= (1-t)B_i^{\alpha-1}(t) + tB_{i-1}^{\alpha-1}(t) \end{aligned}$$

Βασική επίσης ιδιότητα των πολυωνύμων Bernstein είναι ότι

$$\sum_{i=0}^N B_i^N(t) \equiv 1 \quad (9.22)$$

Με τον ίδιο τρόπο που ο αλγόριθμος de Casteljau δημιουργεί το τριγωνικό σχηματισμό 9.14, οι συντελεστές-πολυώνυμα Bernstein (που λέγονται και *ενδιάμεσα πολυώνυμα Bernstein*) εντάσσονται και αυτοί σε ένα τριγωνικό μητρώο ως εξής :

$$\begin{bmatrix} B_0^0(t) & B_0^1(t) & B_0^2(t) & \dots & B_0^N(t) \\ & B_1^1(t) & B_1^2(t) & \dots & B_1^N(t) \\ & & B_2^2(t) & \dots & B_2^N(t) \\ & & & \ddots & \\ & & & & B_N^N(t) \end{bmatrix} \quad (9.23)$$

με κάθε μη-μηδενικό συντελεστή να υπολογίζεται εφαρμόζοντας την αναδρομική σχέση 9.19.

Έστω για παράδειγμα η δημιουργία της καμπύλης Bézier που καθορίζουν τα τέσσερα σημεία ελέγχου P_0, P_1, P_2, P_3 ($N = 3$).

Η καμπύλη Bézier θα δίνεται τελικά από την εξίσωση 9.15 που εδώ ξαναγράφεται ως

$$\vec{r}_0^3(t) = \sum_{i=0}^3 \vec{r}_i B_i^3(t)$$

και φυσικά η εφαρμογή της απαιτεί την εύρεση των τεσσάρων συντελεστών $B_0^3(t)$, $B_1^3(t)$, $B_2^3(t)$, $B_3^3(t)$. Με οδηγό το τριγωνικό μητρώο 9.23 και αφετηρία για τους υπολογισμούς τη σχέση 9.20 που καθορίζει μοναδιαία τιμή στο πάνω-αριστερό στοιχείο του έχουμε τους παρακάτω υπολογισμούς ανά στήλη:

- Δεύτερη στήλη:

$$B_0^1(t) = \binom{1}{0} t^0 (1-t)^1 = 1-t$$

$$B_1^1(t) = \binom{1}{1} t^1 (1-t)^0 = t$$

με τιμές που ήταν αναμενόμενες αν ως βάση πάρουμε τον αλγόριθμο de Casteljau.

- Τρίτη στήλη:

$$B_0^2(t) = \binom{2}{0} t^0 (1-t)^2 = (1-t)^2$$

$$B_1^2(t) = \binom{2}{1} t^1 (1-t)^1 = 2t(1-t)$$

$$B_2^2(t) = \binom{2}{2} t^2 (1-t)^0 = t^2$$

τα στοιχεία της οποίας συμβαδίζουν με τους συντελεστές της εξίσωσης 9.12

- Τέταρτη στήλη:

$$\begin{aligned} B_0^3(t) &= \binom{3}{0} t^0 (1-t)^3 = (1-t)^3 \\ B_1^3(t) &= \binom{3}{1} t^1 (1-t)^2 = 3t(1-t)^2 \\ B_2^3(t) &= \binom{3}{2} t^2 (1-t)^1 = 3t^2(1-t) \\ B_3^3(t) &= \binom{3}{3} t^3 (1-t)^0 = t^3 \end{aligned}$$

Με βάση τα παραπάνω, το μητρώο 9.23 παίρνει τη μορφή (τα στοιχεία που παραλείπονται είναι όλα μηδενικά)

$$\begin{bmatrix} 1 & (1-t) & (1-t)^2 & (1-t)^3 & (1-t)^4 & \dots \\ & t & 2t(1-t) & 3t(1-t)^2 & 4t(1-t)^3 & \dots \\ & & t^2 & 3t^2(1-t) & 6t^2(1-t)^2 & \dots \\ & & & t^3 & 4t^3(1-t) & \dots \\ & & & & t^4 & \dots \\ & & & & & \vdots \end{bmatrix} \quad (9.24)$$

Οι μέχρι τώρα σχέσεις που δόθηκαν για την καμπύλη Bézier–Bernstein είναι άμεσα υλοποιήσιμες σε γλώσσα προγραμματισμού. Για $N+1$ σημεία ελέγχου $\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$, ο αναδρομικός τύπος 9.19 υπολογίζει τελικά τους $N+1$ συντελεστές $B_0^N(t), \dots, B_N^N(t)$ για οποιαδήποτε τιμή του $t \in [0, 1]$ (για κάθε τιμή του t υπολογίζεται ένα διακριτό σημείο της καμπύλης, άρα βασικό αρχικό βήμα είναι να καθοριστεί μια αλληλουχία τιμών της παραμέτρου t για την οποία θα υπολογιστούν σημεία της καμπύλης Bézier–Bernstein – προφανώς το πλήθος αυτών είναι επίσης μια παράμετρος ελεύθερη να επιλεγεί από το χρήστη) και τελικά τα σημεία της καμπύλης υπολογίζονται από τη σχέση 9.15 συναρτήσεως των συντεταγμένων των σημείων ελέγχου. Είναι σημαντικό να τονισθεί η ‘ανεξαρτησία’ και ‘ομοιότητα’ των εκφράσεων που παράγουν λ.χ. τις τρεις συντεταγμένες κάθε σημείου της καμπύλης Bézier–Bernstein. Είναι

$$\begin{aligned} x^N(t) &= x(t) = \sum_{i=0}^N B_i^N(t)x_i \\ y^N(t) &= y(t) = \sum_{i=0}^N B_i^N(t)y_i \\ z^N(t) &= z(t) = \sum_{i=0}^N B_i^N(t)z_i \end{aligned} \quad (9.25)$$

όπου (x_i, y_i, z_i) , $i = 0, \dots, N$ είναι οι τρεις συντεταγμένες κάθε σημείου Bézier–Bernstein έστω στον 3Δ χώρο.

9.2.1 Η Μητρική Γραφή μιας Καμπύλης Bezier

Οι προηγούμενες σχέσεις ενσωματώνονται σε μια βολική μητρική γραφή η οποία καταλήγει να δίνει κάθε σημείο \vec{r}_N της καμπύλης Bézier ως

$$\vec{r}_N(t) \equiv \vec{r}(t) = \sum_{i=0}^N C_i(t) \vec{r}_i \quad (9.26)$$

δηλαδή

$$\begin{aligned} x(t) &= \sum_{i=0}^N C_i(t) x_i \\ y(t) &= \sum_{i=0}^N C_i(t) y_i \\ z(t) &= \sum_{i=0}^N C_i(t) z_i \end{aligned} \quad (9.27)$$

όπου

$$\begin{bmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \\ C_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{0,0} & m_{0,1} & \dots & m_{0,N} \\ m_{1,0} & m_{1,1} & \dots & m_{1,N} \\ & & \ddots & \\ m_{N,0} & m_{N,1} & \dots & m_{N,N} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} t^0 \\ t^1 \\ \vdots \\ t^N \end{bmatrix} \quad (9.28)$$

με στοιχεία που ορίζονται ως

$$m_{i,j} = (-1)^{j-i} \binom{N}{j} \binom{j}{i} \quad (9.29)$$

Ακολουθούν ορισμένες βασικές μορφές του μητρώου με στοιχεία $m_{i,j}$ για τις πιο συνηθισμένες τιμές του N (αυτές τουλάχιστον για τις οποίες ο μηχανικός μπορεί να χρειαστεί να κάνει υπολογισμό 'στο χέρι'. Έτσι:

- Για $N = 2$, δηλαδή για 3 σημεία ελέγχου Bézier–Bernstein:

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (9.30)$$

- Για $N = 3$, δηλαδή για 4 σημεία ελέγχου Bézier–Bernstein:

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 3 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (9.31)$$

- Για $N = 4$, δηλαδή για 5 σημεία ελέγχου Bézier–Bernstein:

$$\begin{bmatrix} 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & 4 & -12 & 12 & -4 \\ 0 & 0 & 6 & -12 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (9.32)$$

- Για $N = 5$, δηλαδή για 6 σημεία ελέγχου Bézier–Bernstein:

$$\begin{bmatrix} 1 & -5 & 10 & -10 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -20 & 30 & -20 & 5 \\ 0 & 0 & 10 & -30 & 30 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & -20 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (9.33)$$

Έστω ότι χρησιμοποιώντας $N + 1$ σημεία ελέγχου δημιουργούμε, κατά τα γνωστά πλέον, την αντίστοιχη καμπύλη Bézier. Η μητρική γραφή που παρουσιάσαμε παραπάνω δείχνει εύκολα ότι

$$\vec{r}_N(t=0) = \vec{r}(0) = \vec{r}_0 \quad (9.34)$$

και

$$\vec{r}_N(t=1) = \vec{r}(1) = \vec{r}_N \quad (9.35)$$

δηλαδή ότι η καμπύλη Bézier ξεκινά από το πρώτο και καταλήγει στο τελευταίο σημείο ελέγχου.

Με οδηγό το μητρώο 9.24 και για $N + 1$ σημεία ελέγχου δίνουμε την έκφραση της καμπύλης Bézier ως

$$\vec{r}_N(t) = \vec{r}(t) = (1-t)^N \vec{r}_0 + Nt(1-t)^{N-1} \vec{r}_1 + O(t^2) \quad (9.36)$$

οπότε, παραγωγίζοντας ως προς t , έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}(t)}{dt} &= -N(1-t)^{N-1}\vec{r}_0 + \\ &+ N[(1-t)^{N-1} - (N-1)t(1-t)^{N-2}] \vec{r}_1 + O(t) \end{aligned} \quad (9.37)$$

από την οποία προκύπτει ότι, για $t = 0$, είναι

$$\frac{d\vec{r}(0)}{dt} = N(\vec{r}_0 - \vec{r}_1) \quad (9.38)$$

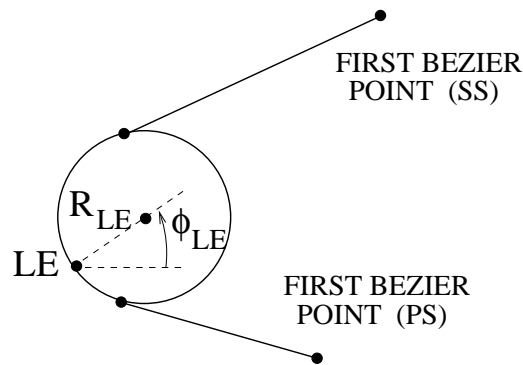
ενώ, για $t = 1$, είναι

$$\frac{d\vec{r}(1)}{dt} = N(\vec{r}_N - \vec{r}_{N-1}) \quad (9.39)$$

Οι σχέσεις 9.38 και 9.39 είναι χρήσιμες αφού αποδεικνύουν, ότι σε πρώτης τάξης ακρίβεια, το ευθύγραμμο τμήμα που συνδέει τα δύο πρώτα σημεία ελέγχου καθορίζει την κλίση της καμπύλης Bézier στην αφετηρία της ($t = 0$) και το ευθύγραμμο τμήμα που συνδέει τα δύο τελευταία σημεία ελέγχου καθορίζει την κλίση της στο τέλος της ($t = 1$).

Πέραν των μαθηματικών διατυπώσεων, τα σημεία ελέγχου μιας καμπύλης Bézier πρέπει να γίνουν κατανοητά ως *πόλοι έλξης* της καμπύλης. Μετακινώντας ένα οποιοδήποτε σημείο ελέγχου υπάρχει επίδραση σε ολόκληρη την καμπύλη ενώ η τάση είναι να παρατηρούμε την καμπύλη να μετακινείται (κυρίως τοπικά) προς τη νέα θέση του σημείου ελέγχου που μετακινήθηκε. Η καθολική επίδραση που έχει η μετακίνηση έστω και ενός σημείου ελέγχου στην καμπύλη Bézier αποτελεί συγχρόνως πλεονέκτημα και μειονέκτημα, ανάλογα πάντοτε με το σκοπό που χρησιμοποιεί κάποιος τις καμπύλες Bézier. Για παράδειγμα, αν το πολύγωνο Bézier έχει μια 'λογική λειότητα' με εξαίρεση ένα εσωτερικό του σημείο, το πλεονέκτημα είναι ότι το σημείο αυτό δεν θα επηρεάσει καθόλου τη λειότητα της καμπύλης Bézier (πάντοτε σε αναλογία με την αποσκοπούμενη χρήση) αναφέρεται το γεγονός ότι επιθυμώντας να τροποποιήσουμε κατά κάποιο τρόπο την καμπύλη Bézier αυτό αυτόματα υπαγορεύει την ανάγκη να μετακινήσουμε πολλά σημεία ελέγχου, όχι πάντοτε με προφανή τρόπο.

Κατά το σχεδιασμό (βέλτιστων) αεροτομών με παραμετροποίηση που χρησιμοποιεί πολυώνυμα Bézier, επειδή σχεδόν πάντα η ακμή προσβολής και η ακμή εκφυγής είναι δεδομένες (λ.χ. εργαζόμενοι με μοναδιαίο μήκος χορδής, η ακμή προσβολής είναι το σημείο $(0, 0)$ και η ακμή εκφυγής το σημείο $(1, 0)$) είναι βολική η χρήση δύο πολυωνύμων Bézier, άρα δύο συνόλων σημείων ελέγχου: ενός για την πλευρά υποπίεσης και του άλλου για την πλευρά υπερπίεσης. Ο κύριος λόγος που βολεύει αυτή η διάταξη είναι ότι εκμεταλλεύεται πλήρως την ιδιότητα κάθε καμπύλης Bézier να διέρχεται από το πρώτο και το τελευταίο σημείο ελέγχου. Έτσι, εξασφαλίζονται οι θέσεις των σημείων προσβολής και εκφυγής. Ακόμη, την ιδιότητα τα δύο πρώτα (ή τα δύο τελευταία) σημεία να καθορίζουν την κλίση της καμπύλης στην αρχή (ή στο τέλος, αντίστοιχα) μπορεί να εκμεταλλευθεί κατάλληλα ο σχεδιαστής μηχανικός ώστε να ελέγξει το πάχος της



Σχήμα 9.3: Συνδυασμένη χρήση δύο πολυωνύμων Bézier, χωριστά για την πλευρά υποπίεσης και την πλευρά υπερπίεσης και τόξου κύκλου στην περιοχή της ακμής προσβολής.

αεροτομής στα δύο αυτά σημεία. Σε έναν τέτοιο σχεδιασμό, ο έλεγχος της συνέχειας πρώτης και δεύτερης παραγώγου (καμπυλότητας) κυρίως στην ακμή προσβολής είναι σημαντικός. Γι' αυτό, συχνά θα συναντήσουμε να χρησιμοποιείται η παραμετροποίηση Bézier σε συνδυασμό με απλά γεωμετρικά σχήματα (τόξα κύκλων ή ελλείψεων) για τη μοντελοποίηση (και κυρίως τον εύκολο έλεγχο) των ακμών προσβολής και εκφυγής. Το σχήμα 9.3 παρουσιάζει μια ενδεικτική περίπτωση.

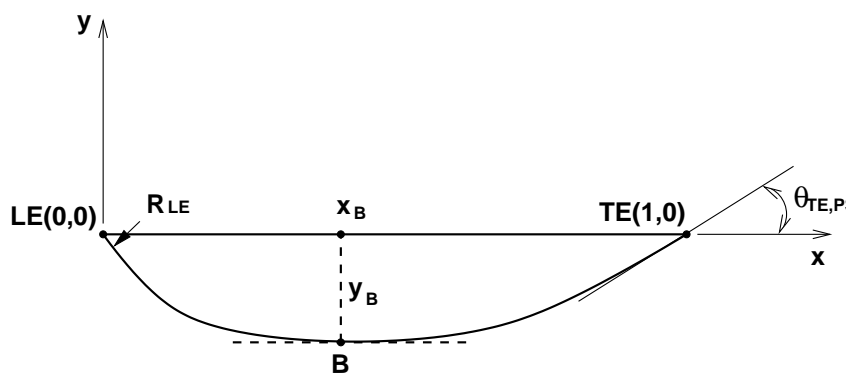
9.3 Παραμετροποίηση PARSEC

Μια από τις, πιά ειδικές αλλά ενδιαφέρουσες, παραμετροποιήσεις αεροτομών (η οποία χρησιμοποιείται για διδιάστατες αεροτομές αλλά έχει επίσης επεκταθεί για χρήση και στο σχεδιασμό τριδιάστατων πτερυγών) είναι η λεγόμενη παραμετροποίηση *PARSEC*. Στηρίζεται σε πολυωνυμικές εκφράσεις για τις δύο πλευρές της αεροτομής και το κυριότερο πλεονέκτημά της είναι ότι χρησιμοποιεί μικρό αριθμό μεταβλητών σχεδιασμού. Υπενθυμίζεται ότι, ανάλογα με τη μέθοδο βελτιστοποίησης που κάποιος επιλέγει να χρησιμοποιήσει, η μείωση του αριθμού των μεταβλητών σχεδιασμού μπορεί να είναι λίγο ή και ιδιαίτερα σημαντική.

Με την τεχνική *PARSEC* κάθε πλευρά μιας αεροτομής μοντελοποιείται χωριστά. Έτσι λ.χ. το μοντέλο *PARSEC* για την πλευρά υπερπίεσης μιας αεροτομής γράφεται

$$y(x) = \sum_{i=1}^6 a_i x^{i-\frac{1}{2}} \quad (9.40)$$

όπου a_i , $i = 1, 6$ είναι οι 6 βαθμοί ελευθερίας της πλευράς αυτής. Η αεροτομή μοντελοποιείται αδιάστατα, έτσι είναι τυπικό να θεωρήσουμε ότι το σημείο πρόσπτωσης (δείκτης *LE*) είναι στο $(0, 0)$ και το σημείο εκφυγής (δείκτης *TE*) στο $(1, 0)$. Για την περίπτωση που η παραμετροποίηση αφορά αεροτομή πτερυγίου στροβιλομηχανής, θα μπορούσε να ισχύει ακριβώς το ίδιο, θεωρώντας βέβαια ότι η παραμετροποίηση γίνεται πριν τη στροφή της αεροτομής στη γωνία κλίσης της.



Σχήμα 9.4: Η παραμετροποίηση *PARSEC* για την πλευρά υπερπίεσης μιας μεμονωμένης αεροτομής.

Ενδεικτικά η παραμετροποίηση παρουσιάζεται στο σχήμα 9.4, για την πλευρά υπερπίεσης μιας μεμονωμένης αεροτομής. Οι ελεύθερες μεταβλητές για την πλευρά αυτή είναι η κλίση του περιγράμματος της αεροτομής στο TE (δηλαδή η γωνία $\theta_{TE,PS}$), οι συντεταγμένες (x_B, y_B) του σημείου B με τη μέγιστη απόσταση από τη χορδή, η δεύτερη παράγωγος (συμβολίζεται με S_B) του y στη θέση B και η ακτίνα καμπυλότητας R_{LE} στο σημείο LE .

Με βάση την εξίσωση 9.40 προκύπτει

$$\begin{aligned}
 y(1) &= 0 \\
 \tan(\theta_{TE,PS}) &= \left(\frac{dy}{dx}\right)_{x=1} = \sum_{i=1}^6 \left(i - \frac{1}{2}\right) a_i \\
 y_B &= y(x_B) = \sum_{i=1}^6 a_i x_B^{i-\frac{1}{2}} \\
 0 &= \left(\frac{dy}{dx}\right)_{x=x_B} = \sum_{i=1}^6 \left(i - \frac{1}{2}\right) a_i x_B^{i-\frac{3}{2}} \\
 S_B &= \left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)_{x=x_B} = \sum_{i=1}^6 \left(i - \frac{1}{2}\right) \left(i - \frac{3}{2}\right) a_i x_B^{i-\frac{5}{2}} \\
 R_{LE} &= \left[\frac{d^2y/dx^2}{(1 + (dy/dx)^2)^{3/2}} \right]_{x=x_B} = \frac{a_1^2}{2}
 \end{aligned}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις δείχνουν ότι η ποσότητα a_1 μπορεί να υπολογισθεί άμεσα και, στη συνέχεια, να απομείνουν πέντε άγνωστες ποσότητες (από a_2 ως και a_6 οι τιμές των οποίων προκύπτουν από την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_B^{3/2} & x_B^{5/2} & x_B^{7/2} & x_B^{9/2} & x_B^{11/2} \\ 3/2 & 5/2 & 7/2 & 9/2 & 11/2 \\ \frac{3}{2}x_B^{1/2} & \frac{5}{2}x_B^{3/2} & \frac{7}{2}x_B^{5/2} & \frac{9}{2}x_B^{7/2} & \frac{11}{2}x_B^{9/2} \\ \frac{3}{4}x_B^{-1/2} & \frac{15}{4}x_B^{1/2} & \frac{35}{4}x_B^{3/2} & \frac{63}{4}x_B^{5/2} & \frac{99}{4}x_B^{7/2} \end{vmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a_1 \\ y_B - a_1 * x_B^{1/2} \\ \tan(\theta_{TE,PS}) - \frac{1}{2}a_1 \\ S_B + \frac{1}{2}x_B^{-\frac{1}{2}} a_1 \\ \frac{1}{4}x_B^{-\frac{3}{2}} a_1 \end{bmatrix} \quad (9.41)$$

Αντίστοιχο γραμμικό σύστημα διατυπώνεται και για την πλευρά υποπίεσης (SS) της αεροτομής. Το σύστημα 9.41 γενικεύεται εύκολα καλύπτοντας περιπτώσεις με μη-μοναδιαίο μήκος χορδής και όπου το σημείο TE δεν έχει $y = 0$.

Κεφάλαιο 10

Ασκήσεις

ΑΣΚΗΣΗ 1

Εικάζεται, ότι η μονοδιάστατη κατανομή θερμοκρασίας $T = T(x)$ σε εξωτερική αντένα διαστημικού οχήματος κατά την περιστροφή περί τον πλανήτη Αφροδίτη από τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{dT}{dx} = \frac{dS}{dx} \frac{\cos x}{x} - S \frac{\sin x}{x} - S \frac{\cos x}{x^2} \quad (10.1)$$

Η αντένα είναι αξονοσυμμετρική, διατομής $S = S(x)$ και, έτσι, μπορεί να μοντελοποιηθεί μονοδιάστατα ως προς το μήκος του x . Η αντένα έχει μοναδιαίο μήκος ($0 \leq x \leq 1$), με το ελεύθερο άκρο της να αντιστοιχεί σε $x = 0$, όπου είναι γνωστή η θερμοκρασία $T(x = 0) = 0$ (η θερμοκρασία μετράται διαφορικά ως προς τη θερμοκρασία περιβάλλοντος, όπου προφανώς αντιστοιχεί η $T = 0$). Το άκρο $x = 1$ είναι το σημείο στήριξης της αντένας στο διαστημικό όχημα.

Για λειτουργικούς λόγους, είναι επιθυμητή κατανομή θερμοκρασίας, κατά μήκος της αντένας, ίση με

$$T_{tar} = x \cos x \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (10.2)$$

Η διατομή $S = S(x)$ παραμετροποιείται με πολυώνυμα Bezier τριών σημείων ελέγχου. Ας τα συμβολίσουμε με $\vec{r}_0 = (X_0, Y_0) = (0, 0)$, $\vec{r}_1 = (X_1, Y_1) = (0.5, Y_1)$, $\vec{r}_2 = (X_2, Y_2) = (1, 1)$. Μοναδική άγνωστη παράμετρος σχεδιασμού είναι η τιμή του Y_1 , η οποία πρέπει να υπολογισθεί ώστε η προκύπτουσα αντένα να δίνει την επιθυμητή κατανομή θερμοκρασίας.

- (α) Διατυπώστε την (προφανή) αντικειμενική συνάρτηση την οποία θα διαχειριστεί η μέθοδος βελτιστοποίησης.
- (β) Διατυπώστε ξανά την εξίσωση της θερμοκρασίας 10.1, εμφανίζοντας σε αυτή τη μοναδική παράμετρο σχεδιασμού αντί της διατομής S . Λύστε την αναλυτικά, προσέχοντας να υπολογίσετε σωστά τη σταθερά ολοκλήρωσης με βάση τη γνωστή οριακή συνθήκη. Δείξτε ότι η αναλυτική λύση είναι η

$$T(x) = 2(1 - x)Y_1 \cos x + x \cos x - 2Y_1 \quad (10.3)$$

- (γ) Διατυπώστε τη συζυγή εξίσωση για το παραπάνω πρόβλημα και τις οριακές της συνθήκες. Δείξτε ότι η εξίσωση αυτή είναι η

$$\frac{d\Psi}{dx} = u - x \cos x \quad (10.4)$$

με $\Psi(1) = 0$. Λύστε την αναλυτικά. Δείξτε ότι η αναλυτική λύση είναι η

$$\Psi(x) = 2Y_1(\sin x - x \sin x - \cos x) + K_1 x + K_2 \quad (10.5)$$

με $K_1 = -2Y_1$, $K_2 = 2Y_1(1 + \cos 1)$, .

- (δ) Με βάση τους προηγούμενους υπολογισμούς, υπολογίστε τελικά τη (μοναδική) παράγωγο ευαισθησίας, ώστε να μπορέσετε λ.χ. στη συνέχεια να τη χρησιμοποιήσετε σε μέθοδο κλίσης για την εύρεση της τιμής του Y_1 που ικανοποιεί το στόχο σας. Δείξτε ότι αυτή η παράγωγος είναι ίση με

$$\frac{dF_{aug}}{dY_1} = \int_0^1 \Psi(x) [2\cos x + 2(1-x) * \sin x] dx \quad (10.6)$$

Υπολογίστε το ολοκλήρωμα. Δείξτε ότι ισούται με

$$\frac{dF_{aug}}{dY_1} = 1.5344Y_1 \quad (10.7)$$

- (ε) Λύστε το πρόβλημα με τη μέθοδο της απότομης κλίσης και εντοπίστε τη βέλτιστη τιμή του Y_1 .
- (στ) Αν όλα τα προηγούμενα έγιναν σωστά, η βέλτιστη διατομή της αντένας θα είναι η $S_{opt}(x) = x^2$. Δείξτε ότι η επιλογή πολυωνύμου Bezier με τρία μόνο σημεία ελέγχου επαρκούσε για την παραμετροποίηση της βέλτιστης γεωμετρίας.

Δίνονται οι εκφράσεις για μια σειρά ολοκληρωμάτων που, ενδεχομένως, θα χρειαστείτε

κατά την επίλυση (η σταθερά ολοκλήρωσης παραλείπεται):

$$\begin{aligned} \int \sin x \cos x dx &= -\frac{1}{2} \cos^2 x \\ \int \sin^2 x dx &= -\frac{1}{2} \sin x \cos x + \frac{1}{2} x \\ \int \cos^2 x dx &= \frac{1}{2} \sin x \cos x + \frac{1}{2} x \\ \int x \sin^2 x dx &= -\frac{x}{2} \sin x \cos x + \frac{x^2}{4} - \frac{\cos^2 x}{4} \\ \int x^2 \sin^2 x dx &= -\frac{x^2}{2} \sin x \cos x - \frac{x}{2} \cos^2 x - \frac{\cos x \sin x}{4} + \frac{x}{4} + \frac{x^3}{6} \\ \int x \cos^2 x dx &= \frac{x}{2} \sin x \cos x + \frac{x^2}{4} + \frac{\cos^2 x}{4} \\ \int x^2 \cos^2 x dx &= \frac{x^2}{2} \sin x \cos x + \frac{x}{2} \cos^2 x - \frac{\cos x \sin x}{4} - \frac{x}{4} + \frac{x^3}{6} \\ \int x \sin x dx &= \sin x - x \cos x \\ \int x \cos x dx &= \cos x + x \sin x \\ \int x^2 \sin x dx &= -x^2 \cos x + 2 \cos x + 2x \sin x \\ \int x \sin x \cos x dx &= -\frac{1}{2} x \cos^2 x + \frac{1}{4} \cos x \sin x + \frac{x}{4} \end{aligned}$$

ΑΣΚΗΣΗ 2

Επαναλάβετε την προηγούμενη άσκηση αν, εκτός από το Y_1 , ελεύθερη παράμετρος ήταν και το Y_2 . Στην περίπτωση αυτή, καλείστε να υπολογίσετε δύο παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης (ως προς τις δύο παραμέτρους σχεδιασμού). Είναι σημαντικό να λύσετε την άσκηση αυτή κάνοντας τις ελάχιστες δυνατές παρεμβάσεις στη διαδικασία λύσης της προηγούμενης άσκησης.

ΑΣΚΗΣΗ 3

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι, στην ‘παραδοσιακή’ τους διατύπωση, χρησιμοποιούν δυαδική κωδικοποίηση των παραμέτρων σχεδιασμού.

- (α) Εντοπίστε και σχολιάστε την αδυναμία της δυαδικής κωδικοποίησης που σχετίζεται με τη συνέχεια της αντιστοίχισης μεταξύ τιμών των παραμέτρων σχεδιασμού

και της δυαδικής γραφής τους. Ως αφετηρία για τη σκέψη σας, μπορείτε να χρησιμοποιήσετε δύο δυαδικά κωδικοποιημένες μεταβλητές, τις $\vec{s}_1 = (00001000)$ και $\vec{s}_2 = (00000111)$, οι οποίες αντιστοιχούν στις διαδοχικές ακέραιες τιμές 8 και 7, αντίστοιχα. Τι παρατηρείτε; Τι αντίκτυπο περιμένετε να έχει αυτή η αδυναμία;

- (β) Στη βιβλιογραφία προτείνεται η χρήση της λεγόμενης Gray, αντί της κλασικής, δυαδικής κωδικοποίησης, ως θεραπεία της παραπάνω αδυναμίας. Η νέα τεχνική προτείνει τη διαχείριση δυαδικών στοιχειοσειρών οι οποίες πολλαπλασιάζονται με το μητρώο G , όπου (λ.χ. για το παράδειγμα στοιχειοσειράς με οκτώ δυαδικά ψηφία) το G ορίζεται ως

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Δείξτε, συνεχίζοντας το παραπάνω παράδειγμα, πως θα λειτουργήσει η χρήση της Gray δυαδικής κωδικοποίησης. Ο πολλαπλασιασμός με το G νοείται ως $G\vec{s}^T$ (που θα χρησιμοποιείται αντί του \vec{s}). Μετά τον πολλαπλασιασμό, κάθε στοιχείο της στοιχειοσειράς της Gray κωδικοποίησης που ισούται με 2 τροποποιείται σε 0.

- (γ) Τι επεμβάσεις χρειάζονται να γίνουν σε υπάρχοντα κώδικα Γενετικών Αλγορίθμων για να συμπεριλάβει και την Gray δυαδική κωδικοποίηση;
- (δ) Σε μια τέτοια περίπτωση, προτείνετε αλγόριθμο αποκωδικοποίησης (η οποία επίσης είναι απαραίτητη).

ΑΣΚΗΣΗ 4

Σε μεγάλο ποσοστό, ο σχεδιασμός αεροτομών στηρίζεται σε πολυώνυμα Bezier. Για $N + 1$ σημεία ελέγχου \vec{r}_i , επαναλαμβάνουμε συνοπτικά τις βασικές σχέσεις που διέπουν τη σχετική παραμετροποίηση

$$\vec{r}(t) = \sum_{i=0}^N \vec{r}_i B_i^N(t), \quad B_i^N(t) = \binom{N}{i} t^i (1-t)^{N-i}, \quad \binom{\alpha}{i} = \frac{\alpha!}{i!(\alpha-i)!}$$

(α) Αποδείξτε ότι, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις

$$\vec{R}_0 = \vec{r}_0 \quad (10.8)$$

$$\vec{R}_i = \frac{i}{N+1} \vec{r}_{i-1} + \left(1 - \frac{i}{N+1}\right) \vec{r}_i, \quad 1 \leq i \leq N \quad (10.9)$$

$$\vec{R}_{N+1} = \vec{r}_N \quad (10.10)$$

θα παραχθεί μια νέα καμπύλη (αεροτομή) με το ίδιο ακριβώς σχήμα αλλά ένα περισσότερο σημείο ελέγχου.

(β) Γνωρίζετε ότι το υπολογιστικό κόστος ορισμένων μεθόδων βελτιστοποίησης (ποιών;) εξαρτάται από τον αριθμό των παραμέτρων σχεδιασμού ενώ άλλων (ποιών;) είναι πρακτικά ανεξάρτητο από το πόσες είναι οι ελεύθερες παράμετροι. Με βάση αυτήν την παρατήρηση, εντάξετε τη διαδικασία αύξησης της βαθμύ της παραμετροποίησης του ερωτήματος (α), στο πλαίσιο μιας εξυπνότερης μεθόδου βελτιστοποίησης. Αυτοσχεδιάστε, το πρόβλημα αντιμετωπίζεται με πολλούς τρόπους.

ΑΣΚΗΣΗ 5

Στο βιβλίο αυτό υπάρχει, με κάθε λεπτομέρεια, η διατύπωση του συζυγούς προβλήματος, για τον αντίστροφο σχεδιασμό αεροτομής με στόχο μια δεδομένη κατανομή πίεσης στην περίμετρό της. Θεωρείστε ότι η ροή είναι ατριβής (εξισώσεις Euler) και διατυπώστε αντίστοιχη μέθοδο για το σχεδιασμό αεροτομής που θα εξασφαλίζει ελάχιστη τιμή του συντελεστή οπισθέλκουσας C_D και επιθυμητή τιμή του συντελεστή άνωσης $C_L = C_{L,tar}$. Το πρόβλημα να αντιμετωπισθεί ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης της αντικειμενικής συνάρτησης (β είναι συντελεστής βαρύτητας που καθορίζει ο χρήστης)

$$F = (C_L - C_{L,tar})^2 + \beta C_D^2$$

Οι δύο αεροδυναμικοί συντελεστές να εκφραστούν ως

$$C_D = \frac{1}{\varpi} \int (p n_x \cos a + p n_y \sin a) ds \quad (10.11)$$

$$C_L = \frac{1}{\varpi} \int (p n_y \cos a - p n_x \sin a) ds \quad (10.12)$$

με το ολοκλήρωμα να νοείται στην περίμετρο της αεροτομής, a είναι η γωνία της αδιάτακτης ροής ενώ ϖ είναι ο (αδιάφορος) παρονομαστής κατά τον ορισμό των αδιάστατων αυτών ποσοτήτων.

ΑΣΚΗΣΗ 6

Δύο ελατήρια τοποθετούνται διαδοχικά ώστε να ενώνουν δύο σταθερά σημεία σε κατακόρυφη απόσταση 20cm . Χωρίς φόρτιση, το συνδετικό τους σημείο ισαπέχει των δύο σταθερών σημείων στήριξης. Η σταθερά του πάνω ελατηρίου είναι 8Nt/cm και του κάτω 1Nt/cm . Ξαφνικά, στο συνδετικό τους σημείο ασκείται σταθερή δύναμη με οριζόντια και κατακόρυφη προς τα πάνω συνιστώσες ίσες με 5Nt , η καθεμιά. Τα ελατήρια προφανώς παραμορφώνονται και ισορροπούν σε μια νέα θέση. Υπολογίστε τη νέα θέση του συνδετικού τους σημείου (σχετικά με την αρχική του θέση), λύνοντας το πρόβλημα ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης της ολικής δυναμικής ενέργειας του συστήματος των ελατηρίων. Χρησιμοποιήστε μέθοδο απότομης καθόδου και μέθοδο Fletcher-Reeves.

ΑΣΚΗΣΗ 7

Ποιό είναι το μέτωπο Pareto του προβλήματος δύο στόχων

$$\min F_1(x_1, x_2) = x_1 \quad (10.13)$$

$$\min F_2(x_1, x_2) = g(x_2)/x_1 \quad (10.14)$$

Σχεδιάστε τη μορφή του στο επίπεδο (x_1, x_2) αλλά και στο (F_1, F_2) . Θεωρείστε ότι μας ενδιαφέρει μόνο ο ημιχώρος λύσεων $x_1 > 0$ και $x_2 > 0$.

ΑΣΚΗΣΗ 8

Σε ένα πρόβλημα δύο ($K = 2$) στόχων στην αεροδυναμική, διατυπωμένο στη μορφή $\min F_i(\vec{x})$, $i = 1, K$, απλοποιούμε τους δύο στόχους στη μορφή των συναρτήσεων $F_1(\vec{x}) = (x_1 - 1)^2 + x_2^2$ και $F_2(\vec{x}) = (x_2 - 1)^2 + x_1^2$. Αναφερόμαστε, δηλαδή, σε πρόβλημα δύο μεταβλητών $\vec{x} = (x_1, x_2)$.

- (α) Βρείτε το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων με απλές μαθηματικές πράξεις και την κρίση σας. Προτείνεται να αναζητήσετε το μέτωπο μέσω της ελαχιστοποίησης της $F_{tot}(\vec{x}) = F_1(\vec{x}) + wF_2(\vec{x})$ για 'κάθε' τιμή του w . Σχεδιάστε το μέτωπο στο χώρο των μεταβλητών και στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων.
- (β) Με αρχή το $\vec{x}^0 = (2, 1)$ και μέθοδο Fletcher-Reeves προχωρήστε την ελαχιστοποίηση της $F_{tot}(\vec{x})$ για $w = 1$.
- (γ) Οι αναγκαίες συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker για να είναι το μια κατά Pareto βέλτιστη λύση σε προβλήματα πολλών στόχων χωρίς περιορισμούς απαιτούν να υπάρχουν $\mu_i \leq 0$ ώστε $\sum_{i=1}^K \mu_i \nabla(F_i(\vec{x}^*)) = 0$. Κάντε μια επίδειξη-εφαρμογή αυτού στο μέτωπο που βρήκατε προηγουμένως.

ΑΣΚΗΣΗ 9

(α) Έστω ότι έχετε στον υπολογιστή σας λογισμικό εξελικτικών αλγορίθμων που λύνει προβλήματα πολλών στόχων και υπολογίζει το μέτωπο Pareto. Θέλετε να λύσετε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης κόστους με έναν περιορισμό ανισότητας. Υπάρχει η ιδέα να αναβαθμίσετε τον περιορισμό σε δεύτερο στόχο και, στη συνέχεια, να χρησιμοποιήσετε το υπάρχον λογισμικό αυτό για να λυθεί το πρόβλημα. Αυτοσχεδιάστε ώστε να κάνετε πράξη την ιδέα αυτή. Σχολιάστε, ενδεχομένως πάνω σε ένα σκαρίφημα του μετώπου Pareto, πως (ως μηχανικοί) θα εκμεταλλευτείτε τις λύσεις που θα βρείτε.

(β) Αν για τον αεροδυναμικό σχεδιασμό μιας αεροτομής, διαθέτατε και ένα πολύ πιο γρήγορο, προσεγγιστικό μοντέλο ανάλυσης (πέραν του επιλύτη των εξισώσεων Navier-Stokes, πως θα μπορούσατε να το εντάξετε στη μέθοδο βελτιστοποίησης ;

(γ) Λύνετε πρόβλημα βελτιστοποίησης διδιάστατης περυγώσης μοντέρνου υπερηχητικού συμπιεστή με υπερηχητική την είσοδο και την έξοδο στο πεδίο ροής. Στην είσοδο ή την έξοδο του πεδίου θα βάλετε οριακές συνθήκες (και πόσες) για τις συζυγές μεταβλητές και γιατί ; Απαντήστε με την ελάχιστη δυνατή παράθεση τύπων, πάνω στην ουσία και τη φυσική του προβλήματος.

(δ) Δώστε την αρχή της Gray κωδικοποίησης στους εξελικτικούς αλγορίθμους. Την ιδέα ζητάμε, όχι τους τύπους!

ΑΣΚΗΣΗ 10

Η άσκηση αυτή διαπραγματεύεται τον αντίστροφο σχεδιασμό ενός μονοδιάστατου αγωγού μοναδιαίου μήκους ($0 \leq x \leq 1$) ο οποίος δίνει μια δεδομένη κατανομή ταχύτητας κατά μήκος του x . Για λόγους απλότητας παρακάμπουμε το πως παραμετροποιείται η γεωμετρία του αγωγού και ενσωματώνουμε την παραμετροποίηση απευθείας στην εξίσωση ροής. Έστω, λοιπόν, ότι η εξίσωση ροής είναι η

$$\frac{du}{dx} = \alpha x + \beta \quad (10.15)$$

με οριακή συνθήκη ταχύτητας την $u(x=0) = 1$. Στην εξίσωση 10.15 αναγνωρίζουμε τις δύο μεταβλητές σχεδιασμού α και β . Κάθε ζεύγος τιμών των δύο αυτών μεταβλητών, καθορίζει μια νέα γεωμετρία αγωγού στην οποία η κατανομή ταχύτητας δίνεται από τη σχέση 10.15.

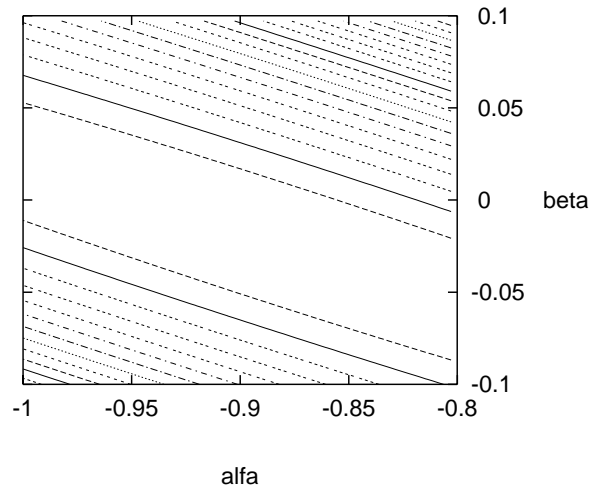
(α) Ποιά η αναλυτική λύση $u = u(x)$ της ταχύτητας, για την παραπάνω εξίσωση ροής και οριακή συνθήκη;

(β) Δείξτε ότι η συζυγής εξίσωση που αντιστοιχεί στο πρόβλημα σχεδιασμού ενός τέτοιου αγωγού, όταν επιθυμητή είναι ταχύτητα-στόχος με κατανομή

$$u_{tar} = \cos x \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (10.16)$$

είναι η

$$\frac{d\Psi}{dx} = u - \cos x \quad (10.17)$$



Σχήμα 10.1: Πεδίο ισοϋψών της αντικειμενικής συνάρτησης.

Βρείτε την οριακή εξίσωση που πρέπει να επιβληθεί στην εξίσωση 10.17, σχολιάζοντας την επιλογή σας. Ποιά είναι η αντικειμενική συνάρτηση;

(γ) Βρείτε την αναλυτική λύση της συζυγούς εξίσωσης 10.17, ως συνάρτηση των α και β . Προφανώς, θα πάρετε υπόψη την οριακή της συνθήκη και θα υπολογίσετε τη σταθερά ολοκλήρωσης που αναμένεται να εμφανιστεί.

(δ) Δείξτε ότι η παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς α δίνεται από τη σχέση

$$\frac{dF_{aug}}{d\alpha} = \frac{\alpha}{20} + \frac{\beta}{8} + \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\sin(1) - \cos(1) \quad (10.18)$$

(προφανώς οι γωνίες μετρώνται σε ακτίνια). Θυμηθείτε ότι $\int x \sin x dx = \sin x - x \cos x$.

(ε) Βρείτε, αντίστοιχα, την παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς β .

(στ) Βρείτε αναλυτικά τα βέλτιστα α και β .

(ζ) Με αρχικές τιμές $\alpha = -1$ και $\beta = -0.1$, κάντε ένα βήμα της μεθόδου της απότομης καθόδου, χρησιμοποιώντας τις παραγώγους που ήδη υπολογίσατε. Χρησιμοποιήστε $\eta = 1$.

(η) Σας δίνεται το πεδίο ισοϋψών της αντικειμενικής συνάρτησης του προβλήματός μας, στο παρακάτω γράφημα του σχήματος 10.1.

Το βήμα σχεδίασης ισογραμμών είναι σταθερό. Οι ισογραμμές μοιάζουν πολύ, αλλά δεν είναι ευθείες. Οι μικρότερες (ίδιες) τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης αντιστοιχούν στις δύο εσωτερικές ισογραμμές, αυτές δηλαδή που περιβάλλουν τη μεσαία 'κενή' ζώνη. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης αυξάνει από το κέντρο προς

την πάνω–δεξιά ή την κάτω–αριστερά γωνία. Εξάλλου, τοποθετήστε στο γράφημα τη βέλτιστη λύση που βρήκατε αναλυτικά και θα κατανοήσετε ακόμα καλύτερα το σχήμα αυτό. Σχολίαστε το πως θα συμπεριφερθεί η μέθοδος της απότομης καθόδου σε μια τέτοια περίπτωση. Τα σχόλια σας να αφορούν την αρχικοποίηση, την επιλογή του η , το αν σας μοιάζει για εύκολο ή δύσκολο πρόβλημα, κλπ. Μπορείτε να σκιαγραφήσετε πάνω στο σχήμα πως θα κινούνταν η ανίχνευση της λύσης με τη μέθοδο αυτή.

ΑΣΚΗΣΗ 11

Η μόνιμη, ασυμπίεστη, στρωτή ροή ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, που βρίσκονται σε μοναδιαία απόσταση (η μια στο $y = 0$ και η άλλη στο $y = 1$), είναι γνωστή ως ροή Couette και δέχεται αναλυτική λύση. Έτσι, η ροή αυτή διέπεται από τη σχέση $dp/dx = 0$ και $du/dx = 0$ (x είναι η διαμήκης κατεύθυνση, p είναι η στατική πίεση, u είναι η διαμήκης ταχύτητα–η μοναδική μη–μηδενική συνιστώσα της ταχύτητας), έχει δηλαδή την ίδια παραβολική κατανομή ταχύτητας σε κάθε διαμήκη θέση. Αυτή δίνεται από τη λύση της εξίσωσης

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - k = 0 \quad (10.19)$$

όπου $k = dp/dx$ είναι η διαμήκης κλίση της πίεσης, που προφανώς ισούται με

$$k = \frac{dp}{dx} = \frac{p_2 - p_1}{L} \quad (10.20)$$

όπου p_1 και p_2 είναι οι στατικές πιέσεις στην είσοδο και την έξοδο του αγωγού που σχηματίζουν οι δύο πλάκες και ο οποίος έχει (γνωστό) μήκος L (σχήμα 10.2).

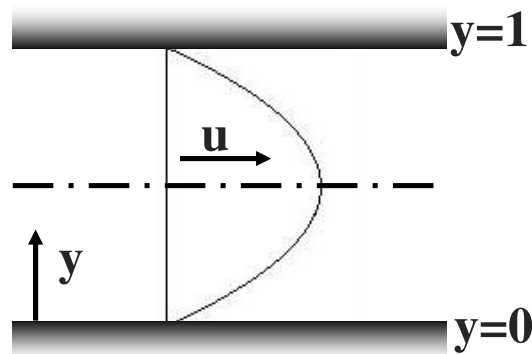
(α) Θεωρώντας ως εξίσωση ροής την 10.19 (αυτή είναι η εξίσωση κατάστασης, state equation), μεταβλητές σχεδιασμού το συντελεστή συνεκτικότητας μ (ο οποίος είναι σταθερός σε όλο το πεδίο, έχει μια τιμή δηλαδή) και την κλίση πίεσης k , διατυπώστε τη συζυγή μέθοδο που υπολογίζει την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις δύο μεταβλητές ελέγχου (μ και k , αν στόχος είναι μια επιθυμητή κατανομή ταχύτητας στη μορφή δοσμένης συνάρτησης $u_{tar}(y)$, σε κάθε διαμήκη θέση. Συγκεκριμένα, γράψτε την αντικειμενική συνάρτηση, τη μεταβολή της επαυξημένης αντικειμενικής συνάρτησης με την οποία θα ξεκινήσει η διατύπωση του συζυγούς προβλήματος, διατυπώστε τη συζυγή εξίσωση και τις οριακές της συνθήκες στα $y = 0$ και $y = 1$ και τις δύο παραγώγους ευαισθησίας. Για τη διευκόλυνσή σας δίνεται ότι η μια από τις δύο παραγώγους είναι η

$$\frac{\delta F_{aug}}{\delta k} = - \int_0^1 \Psi dy \quad (10.21)$$

(αποδείξτε την).

(β) Αν η αναλυτική λύση της 10.19 είναι η

$$u(y) = \frac{k}{2\mu} y(y - 1) \quad (10.22)$$



Σχήμα 10.2: Μόνιμη, ασυμπέσθη, στρωτή ροή ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, που βρίσκονται σε μοναδιαία απόσταση (η μια στο $y = 0$ και η άλλη στο $y = 1$), γνωστή ως ροή Couette.

και η κατανομή ταχύτητας που στοχεύουμε είναι η

$$u_{tar}(y) = 50y - 50y^2 \quad (10.23)$$

βρείτε την αναλυτική λύση της συζυγούς εξίσωσης και τις αναλυτικές εκφράσεις για τις παραγώγους ευαισθησίας.

ΑΣΚΗΣΗ 12

Λύνουμε ένα πρόβλημα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης ενός στόχου με εξελικτικούς αλγορίθμους. Το πρόβλημα έχει μια μεταβλητή σχεδίασης, το πάχος μιας πτέρυγας σε mm. Οι ελάχιστες και μέγιστες επιτρεπόμενες τιμές πάχους είναι 28mm και 90mm. Χρησιμοποιούνται πέντε δυαδικά ψηφία για την κωδικοποίηση της μεταβλητής. Από την εξέλιξη, μετά από κάποιες γενεές, έχουν επιβιώσει μόνο δύο λύσεις, οι

$$(1, 0, 1, 1, 0) \quad , \quad (0, 0, 0, 1, 0)$$

Προσέξτε ότι το πρώτο (αριστερό) δυαδικό ψηφίο κάθε δυαδικής στοιχειοσειράς είναι το πιο σημαντικό, δηλαδή ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμης του 2. Αν η βέλτιστη λύση είναι η τιμή πάχους 44 και οι χρησιμοποιούμενοι εξελικτικοί τελεστές είναι η επιλογή γονέων και η διασταύρωση, εξηγήστε αν μπορεί ή δεν μπορεί να 'πιάσει' τη βέλτιστη λύση.

ΑΣΚΗΣΗ 13

Επιθυμούμε να ελαχιστοποιήσουμε το παρακάτω συναρτησιακό

$$F = \int_0^1 p dx \quad (10.24)$$

όπου p είναι η μεταβλητή κατάσταση, δηλαδή η λύση του φυσικού προβλήματος, το οποίο περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση κατάστασης :

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = a \sin x \quad (10.25)$$

όπου a είναι η μοναδική μεταβλητή σχεδίασης. Οι οριακές συνθήκες που 'κλείνουν' το πρόβλημα είναι ομογενείς Dirichlet, δηλαδή $p=0$ για $x=0$ και για $x=1$. Προσδιορίστε τη συζυγή εξίσωση, τις οριακές συνθήκες αυτής καθώς και την έκφραση της παραγώγου ευαισθησίας $\frac{dF}{da}$ (με χρήση της συζυγούς τεχνικής).

Κεφάλαιο 11

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία

Η βιβλιογραφία σε θέματα βελτιστοποίησης είναι εκτενής και, στην πλειοψηφία της, σύγχρονη, γεγονός που πιστοποιεί ότι είναι **θέμα αιχμής** στην αεροδυναμική αλλά και σε οποιαδήποτε άλλη επιστημονική περιοχή.

Ακολουθεί ένας κατάλογος βιβλίων, με σύντομα σχόλια, που θα μπορούσε να φανεί χρήσιμος σε φοιτητές που θα αποφασίσουν να αναζητήσουν περισσότερα στοιχεία για τις μεθόδους βελτιστοποίησης:

- Το βιβλίο **Numerical Optimization Techniques for Engineering Design: With Applications** των G.N. Vanderplaats από τις εκδόσεις McGraw–Hill (1984) (ISBN 0–07–066964–3) είναι από τα πρώτα, κλασικά πλέον, βιβλία βελτιστοποίησης. Παρουσιάζει εισαγωγικά τις βασικότερες μεθόδους αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης, με πολλά παραδείγματα κυρίως από την περιοχή των κατασκευών.
- Ένα άλλο κλασικό βιβλίο βελτιστοποίησης είναι το **Practical Optimization** των P.E. Gill, W. Murray, M.H. Wright από τις εκδόσεις Academic Press (1981) (ISBN 0–12–283952–8). Είναι προσανατολισμένο περισσότερο στη μαθηματική θεμελίωση των αιτιοκρατικών μεθόδων βελτιστοποίησης. Αποτελούσε τη βασική αναφορά για σχετικές εργασίες για μια τουλάχιστον δεκαετία.
- Το βιβλίο **Numerical Optimization** των J. Nocedal, M.H. Wright από τις εκδόσεις Springer (1999) (ISBN 0 – 387 – 98793 – 2) αποτελεί ουσιαστικά μια εμπλουτισμένη, επεκτεταμένη επανέκδοση του προηγούμενου βιβλίου (ο βασικός συγγραφέας είναι ο ίδιος). Είναι εξαιρετικό βοήθημα για όσους θέλουν να κατανοήσουν τις αιτιοκρατικές μεθόδους σε βάθος. Η ανάγνωση του βιβλίου απαιτεί καλό μαθηματικό υπόβαθρο.
- Το βιβλίο **Nonlinear Multiobjective Optimization** της K. Miettinen από τις εκδόσεις Kluwer Academic Publishers (1999) εστιάζει αποκλειστικά σε προβλήματα πολλών στόχων. Είναι γραμμένο από μαθηματικό και απαιτεί καλό μαθηματικό υπόβαθρο από τον αναγνώστη.
- Το βιβλίο **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning** του D. Goldberg από τις εκδόσεις Addison–Wesley (1989) (ISBN

0 – 201 – 15767 – 5) είναι το κλασικό ανάγνωσμα για όσους επιθυμούν μια βαθειά γνωριμία με τους γενετικούς αλγόριθμους. Σε πολλά σημεία του, το βιβλίο αγγίζει το όρια της φιλοσοφικής προσέγγισης των μεθόδων αυτών. Αξίζει, κατά τη γνώμη του γράφοντος, να το μελετήσει κανείς αφού πρώτα γνωρίσει και προγραμματίσει, ως κάποιο επίπεδο, τους γενετικούς αλγόριθμους.

- Το βιβλίο **Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs** του Z. Michalewicz από τις εκδόσεις Springer-Verlag (1992) (ISBN 3 – 540 – 58090 – 5) είναι καλογραμμένο, πολύ αναλυτικό και συνιστάται για όσους επιθυμούν να μάθουν και να προγραμματίσουν γενετικούς αλγόριθμους.
- Το βιβλίο **Evolutionary Computation: Toward a New Philosophy of Machine Intelligence** του D. Fogel από τις εκδόσεις IEEE Press (1998) (ISBN 0 – 7803 – 5379 – X) επιχειρεί να αναλύσει σε βάθος θέματα που αφορούν εξελικτικούς υπολογισμούς.
- Το βιβλίο **How to Solve it: Modern Heuristics** των Z. Michalewicz, D.B. Fogel από τις εκδόσεις Springer (2000) (ISBN 3 – 540 – 66061 – 5) είναι ένας σύγχρονος, μη-μαθηματικός οδηγός στο τι πρέπει να κάνει κάποιος για να αντιμετωπίσει προβλήματα βελτιστοποίησης. Το βιβλίο είναι εξαιρετικά καλογραμμένο και ξεφεύγει από τα στενά όρια της βελτιστοποίησης.
- Το βιβλίο **Mathematical Methods of Airfoil Design** των A.M. Elizarov, N.B. Il'inskiy, A.V. Potashev από τις εκδόσεις Akademie-Verlag (1997) (ISBN 3 – 05 – 501701 – 3) παρουσιάζει μια πλήρη (ειδική ίσως) μαθηματική διαδικασία για τη σχεδίαση αεροτομών.

Τέλος, μια πρόσφατη ανασκόπηση των τρόπων χρήσης των εξελικτικών αλγόριθμων, και μάλιστα σε συνδυασμό με μεθόδους υπολογιστικής ευφυΐας, για τη σχεδίαση βέλτιστων αεροδυναμικών μορφών περιέχεται στην εργασία ανασκόπησης (review paper) με τίτλο: **Design of Optimal Aerodynamic Shapes using Stochastic Optimization Methods and Computational Intelligence**, υπό K.C. Giannakoglou, που έχει δημοσιευθεί στο περιοδικό International Review Journal Progress in Aerospace Sciences, Vol. 38, pp. 43 – 76, 2002.