

Praca magisterska

Analiza czułości niestacjonarnych układów turbulentnych

Adam Marek

16 sierpnia 2019

Spis treści

1	Wprowadzenie	3
1.1	Ogólna charakterystyka	3
1.2	Tło literaturowe badanego problemu	3
1.3	Układ pracy	3
2	Elementy teorii gładkich układów dynamicznych	5
2.1	Pojęcia podstawowe	5
2.2	Stabilność rozwiązań	11
2.3	Chaos deterministyczny	18
3	Wybrane metody optymalizacji lokalnej stosowane w technice	20
3.1	Metoda różnic skończonych	20
3.2	Metoda Tangent (???)	20
3.3	Metoda Operatora Sprzężonego	20
4	Metoda Trajektorii Cienia	21
4.1	Wstęp	21
4.2	Metoda Operatora Cienia	21
4.3	LSS - podejście bazujące na intuicji	22
5	Implementacja metody LSS	23
5.1	Scenariusz I - konceptualne preliminarium	23
5.1.1	Model matematyczny	23
5.1.2	Wyniki symulacji numerycznej	24
5.2	Scenariusz II - oblicze chaosu	34
5.2.1	Słowo wstępne	34
5.2.2	Metoda Siatek Boltzmanna	35
5.2.3	Model matematyczny	35

1 Wprowadzenie

1.1 Ogólna charakterystyka

Istotę niniejszej pracy stanowi opracowanie oraz implementacja metody wyznaczania wrażliwości dla pewnej klasy funkcji celu stanowiących długookresowe wartości średnie w przypadku układów dynamicznych, których rozwiązania przejawiają skomplikowane zachowania. Analiza taka jest niezbędna w wielu praktycznych zastosowaniach, takich jak optymalizacja kształtu elementów maszyn i urządzeń cieplno-przepływowych [1], sterowanie z przesuwym horyzontem czasowym (predykcyjne) [2], adaptacja siatek obliczeniowych [3], szacowanie błędów i niepewności [4]. Mimo że praca ta skupia się głównie na zastosowaniach związanych z mechaniką płynów, przedstawione algorytmy mogą być pomocne do rozwiązywania szerszej klasy problemów związanych z układami dynamicznymi.

W ostatnich latach powstało kilka prac sugerujących sposób rozwiązania postawionego problemu (zobacz Rozdział 1.2), jednakże wspólną ich cechą jest wysoki koszt numeryczny. W niniejszej pracy wykorzystuje się podstawowe ich idee - w szczególności zaimplementowana została Metoda Trajektorii Cienia (ang. *Least Squares Shadowing*) w formie wariacyjnej. Całość została zaimplementowana w języku skryptowym *MATLAB* oraz w języku wysokiego poziomu: *C++*. Nowością stanowi sposób dyskretyzacji równań mechaniki płynów - zastosowana została Metoda Siatkowa Boltzmanna. Poza tym wykorzystane zostało narzędzie do automatycznego różniczkowania kodu.

1.2 Tło literaturowe badanego problemu

Opracowane do tej pory klasyczne metody estymacji czułości bazujące na wyznaczaniu gradientu funkcji celu pozostają nieskuteczne wobec istotnych z punktu widzenia techniki układów niestacjonarnych, których dynamika (silnie nieliniowa) przekłada się na praktycznie nieprzewidywalne zachowanie. Mówi się wówczas o układach chaotycznych (patrz Rozdział). Świetną pozycję opisującą historię odkryć takich układów, związane z nimi problemy oraz pierwsze próby ich matematycznego opisu stanowi książka [6]. Trudności polegające na załamaniu się klasycznych metod wyznaczania wrażliwości zwały po raz pierwszy zauważone w pracy [8] przy badaniu układu Lorenza (1963) stanowiącego skrajnie uproszczony model termicznej konwekcji naturalnej w atmosferze. Ci sami autorzy w pracy [9] zaproponowali sposób regularyzacji poprzez uśrednianie całkowe w przestrzeni fazowej dla skal czasowych zdeterminowanych poprzez największą wartość wykładników Lyapunowa. Uzasadnienie takiego postępowania stanowi pozycja [15], w której autor dowodzi poprawności sformułowania problemu (tj. pokazuje, że poszukiwana pochodna istnieje i jest ograniczona przy pewnych ogólnych założeniach) oraz podaje *explicite* jej wzór. Podejście takie bez znaczących modyfikacji jest niepraktyczne ze względu na koszt numeryczny, co zostało pokazane w pracy [4].

1.3 Układ pracy

W Rozdziale 2 przedstawiono wybrane metody klasyczne wyznaczania gradientu funkcji celu, na których bazują algorytmy optymalizacji lokalnej stosowane w technice. Rozdział 3

zawiera przegląd definicji oraz niezbędnych faktów dotyczących teorii układów dynamicznych i chaosu deterministycznego wykorzystywanych w dalszych rozdziałach. Rozdział 4 prezentuje metodę najmniejszych kwadratów dla trajektorii cienia (ang. *Least Squares Shadowing*, oznaczana dalej jako LSS). W rozdziale 5 zestawiono wyniki dla dwóch przypadków:

2 Elementy teorii gładkich układów dynamicznych

Dla zrozumienia problemów związanych ze stabilnością układów ewoluujących w czasie konieczne jest zapoznanie się z nomenklaturą obowiązującą w matematycznym opisie takich układów. W rozdziale tym przedstawione zostały podstawowe definicje i fakty dotyczące zagadnień stabilności równań różniczkowych zwyczajnych oraz chaosu deterministycznego. Na wstępie należy zaznaczyć, że nie należy mylić tego pojęcia z terminem chaotyczności przywołanym na wstępie pracy, który oznacza skomplikowane zachowanie rozwiązań i w ogólności nie musi zależeć od wartości wykładników Lyapunowa stanowiących formalne kryterium chaotyczności w sensie układów dynamicznych. Mimo że w tej pracy przedstawiona została między innymi metoda analizy wrażliwości na przykładzie układu Lorentza, który w istocie jest chaotyczny (dodatnie wykładniki Lyapunowa), celem zainteresowań będzie szersza klasa problemów, o których (w większości) nie ma informacji związanych z ich przynależnością do tej klasy problemów (w szczególności nie jest udowodniona chaotyczność układu równań Naviera-Stokesa). Zaproponowana metoda jest jednak dogodna do dużej klasy układów przejawiających skomplikowane zachowania, które w dalszej części pracy określa się mianem chaotycznych.

2.1 Pojęcia podstawowe

Niech M oznacza rozmaitość różniczkową z metryką Riemanna oznaczaną symbolem d . W dalszej części pracy (w przypadku braku konfliktu oznaczeń) przetrzeń metryczna (M, d) będzie oznaczana przez M . Niech dany będzie homeomorfizm $\mathbf{f}: M \mapsto M$. Załóżmy również, że dany jest układ autonomicznych równań różniczkowych zwyczajnych postaci

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}; \mathbf{s}), \quad (1)$$

z warunkiem początkowym

$$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_s \quad (2)$$

gdzie $t \in (0, T]$ oznacza czas ($T > 0$ - rozpatrywany okres), \mathbf{s} oznacza wektor zmiennych decyzyjnych (w problemach optymalizacyjnych nazywany wektorem parametrów projektowych - nie stanowi on zmiennej niezależnej, należy go traktować jako parametr), zaś \mathbf{u}_0 oznacza funkcję wektorową, której regularność uzależniona jest od struktury równania 1 (przykładowo w analizie równań Naviera-Stokesa przyjęlibyśmy założenie, że $u_0 \in V$, gdzie V oznacza domknięcie funkcji gładkich o zerowej dywergencji w odpowiedniej przestrzeni Sobolewa¹). Autonomiczność układu oznacza, że jego prawa strona nie zależy *explicite* od czasu t .

W tym momencie poczynione zostaną uwagi o charakterze technicznym, które pozostają w mocy do końca bieżącego rozdziału:

- Równanie (1) jest w ogólności określone na przestrzeni funkcji (tj. na pewnej nieskończonej wymiarowej przestrzeni Banacha). Jednakże jakościowe warunki dotyczące

¹Więcej informacji na ten temat Czytelnik znajdzie na przykład w [Teman]

istnienia i jednoznaczności rozwiązań takich równań zachodzą i w takich przypadkach (tj. twierdzenia: Peano oraz Picarda-Lindelöfa mają analogiczną postać do swoich skończenie wymiarowych odpowiedników).

- Funkcję określoną na przestrzeni nieskończenie wymiarowej określa się często mianem operatora. W tej pracy konwencja ta nie będzie obowiązywała, aby nie zaciemniać istoty rzeczy.
- Poprzez rozmaitość różniczkową M generowaną na pewnej przestrzeni Hilberta H rozumie się przestrzeń topologiczną Hausdorffa, w której każdy punkt ma otoczenie dyfeomorficzne z pewnym zbiorem otwartym w H (w przypadku skończenie wymiarowym każdy punkt ma otoczenie dyfeomorficzne z pewną kulą).
- Metryka Riemanna jest w ogólności pojęciem bardzo abstrakcyjnym. Jej precyzyjna definicja wymaga pojęć takich jak: ..., których wprowadzanie pozostaje poza zakresem tej pracy. W związku z tym przedstawiona zostanie intuicja stojąca za tym pojęciem odsyłając zainteresowanego Czytelnika do literatury²
- Pełne dookreślenie układu dynamicznego wymaga zdefiniowania niezmienniczej względem homeomorfizmu \mathbf{f} miary. Oczywiście 'zwykła' miara Lebesgue'a nie jest odpowiednia ze względu na brak niezmienniczości (w większości przypadków objętości, pod wpływem dynamiki, redukują się do tworów niższej wymiarowych). W związku z czym wprowadzona została miara SRB (nazwa pochodzi od nazwisk jej twórców: Sinai, Ruelle, Bowen). Miara ta konieczna jest jedynie do zdefiniowania własności układu zwaną ergodycznością, która zostanie wytłumaczona na gruncie intuicji, wobec czego formalna definicja miary SRB nie zostanie sformułowana. Można ją znaleźć w pracach [1].

Równanie (1) można interpretować jako ewolucję w czasie wielkości wektorowej, na przykład pola prędkości przy zadanych warunkach brzegowych, które w ogólności zależą od czasu, współrzędnych przestrzennych oraz od wektora zmiennych decyzyjnych:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(t, \mathbf{x}; \mathbf{s}). \quad (3)$$

Realizacja numeryczna równania (1) z warunkiem początkowym (2) wyraża się poprzez procedurę iteracyjną postaci

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{f}^s(\mathbf{u}_i) \quad (4)$$

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_s, \quad (5)$$

gdzie \mathbf{f}^s oznacza zdyskretyzowany homeomorfizm \mathbf{f} sparametryzowany wektorem \mathbf{s} . Wobec postaci równań (1) i (4) można opisywane przez nie układy dynamiczne identyfikować z funkcjami prawych stron (zadającymi dynamikę). W dalszej części pracy o powyższych zagadnieniach zakłada się, iż mają jednoznaczne rozwiązanie dla $t \in (0, T]$, tzn. spełniają one założenia twierdzenia Picarda-Lindelöfa (dla przestrzeni M). Jednym z najistotniejszych pojęć pozwalających na jakościową analizę układów dynamicznych jest *przestrzeń fazowa*.

²Nonlinear Dynamical Systems Of Mathematical Physics: Spectral And Symplectic

Definicja 1. Przestrzenią fazową $M_{ph} \subseteq M$ równania (1) nazywamy zbiór wszystkich stanów tego układu traktowanych jako punkty tej przestrzeni.

W dalszym ciągu pracy o przestrzeni fazowej M_{ph} zakłada się, iż ma odpowiednią strukturę topologiczną. Aby uściślić to pojęcie założmy o \mathbf{f} , iż jest dyfeomorfizmem określonym na przestrzeni fazowej ($\mathbf{f}: M_{ph} \mapsto M_{ph}$) która jest zbiorem zwartym, bez brzegu³. Przy tych założeniach można przyjąć następujące definicje.

Definicja 2. Przestrzenią styczną $T_x M_{ph}$ do przestrzeni fazowej w punkcie $x \in M_{ph}$ nazywamy zbiór $\{x\} \times \phi'(u) \cdot E \subset \{x\} \times M$, gdzie $\phi(U)$ jest parametryzacją otoczenia punktu $x \in M_{ph}$ (istniejąca na mocy założeń o M) taką, że $\phi(u) = x$

Definicja 3. Wiązkę styczną TM_{ph} do przestrzeni fazowej $M_{ph} \subseteq M$ nazywamy rodzinę przestrzeni stycznych $TM_{ph} = \{(x, y) | x \in M_{ph}, y \in T_x M_{ph}\}$.

Tak zdefiniowana wiązka stanowi dziedzinę pochodnej odwzorowania \mathbf{f} , tj. $D\mathbf{f}: TM_{ph} \mapsto TM_{ph}$. Wizualizację wiązki stycznej dla prostych kształtów geometrycznych ilustruje Rysunek.

³Zwartość jest stosunkowo mocnym założeniem, które często będzie pomijane. Niemniej dla ścisłości rozumowania jest ono konieczne



Rysunek 1: Wizualizacja pojęcia wiązki stycznej dla okręgu

Jednym z dwóch najważniejszych

założeń o rozpatrywanych układach dynamicznych jest możliwość dekompozycji ich przestrzeni fazowych na sumę prostą dwóch podprzestrzeni, których wektory cechują się podobnymi właściwościami dynamicznymi.

Definicja 4. Powiemy, że zbiór M_{ph} ma strukturę hiperboliczną, o ile istnieją zbiory $E^s, E^u \subseteq TM_{ph}$ (nazywane wiązką stabilną i niestabilną, odpowiednio) takie, że $TM_{ph} = E^s \oplus E^u$ i spełniające warunki:

- $Df|_{E^s}$ jest kontrakcją,
- $Df|_{E^u}$ jest ekspansją.

Istnieją wówczas stałe $\lambda \in (0, 1), c \in (0, +\infty)$ takie, że:

- $\|Df^i x_s\| \leq c\lambda^i \|x_s\|$ dla dowolnych $x_s \in E^s$ oraz $0 < i \in \mathbb{N}$,

- $\|D\mathbf{f}^{-i}x_u\| \leq c\lambda^i\|x_u\|$ dla dowolnych $x_u \in E^u$ oraz $0 < i \in \mathbb{N}$.

Układ dynamiczny, którego przestrzeń fazowa ma strukturę hiperboliczną będzie nazywany układem hiperbolicznym. Ostatnie dwa warunki w Definicji grupują wektory przestrzeni stycznej ze względu na jakościowe zachowanie ich norm wraz z rozwojem układu. Jak się przekonamy w późniejszych rozdziałach jest to niezbędne założenie warunkujące użyteczność różnych metod regularyzacji pozwalających na wyznaczanie wrażliwości w rozważanych układach.

Drugie, równie istotne założenie dotyczy pośrednio funkcji, której gradient jest poszukiwany. Istotnymi z punktu widzenia techniki pozostają długookresowe wartości średnie, tj. funkcje postaci

$$\bar{J}(u; s) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T J(u; s) dt, \quad (6)$$

gdzie $J(u; s)$ oznacza chwilową wartość funkcji będącej obiektem zainteresowań. Może ona oznaczać przykładowo opór aerodynamiczny, siłę nośną, ciąg silnika lub współczynnik przejmowania ciepła na powierzchniach wymiennika ciepła. W praktyce dysponujemy oczywiście jedynie skończonymi przybliżeniami granicy (6), tj.

$$\bar{J}(u; s) \approx \frac{1}{\Delta T} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{J(u_{i+1}; s) + J(u_i; s)}{2} (T_{i+1} - T_i), \quad (7)$$

gdzie ΔT oznacza przyjętą (odpowiednio dużą) długość okresu uśredniania, $(T_{i+1} - T_i)$ określa długość kroku czasowego w danym kroku (przyjęty został w tym przypadku schemat trapezów dla całkowania numerycznego).

Aby zastosować odpowiedni aparat matematyczny w dalszym ciągu rozpatrywana będzie formuła postaci (6) pozostawiając jej numeryczną realizację (7) na moment opisu implementacji odpowiedniej metody. Poprzez wrażliwość tak zdefiniowanej funkcji będziemy rozumieli jej gradient względem wektora parametrów \mathbf{s} . Klasyczne metody wyznaczania takiej wielkości przedstawione zostały w Rozdziale, zaś problemy z nich wynikające przy aplikacji do układów chaotycznych wyjaśnia Rozdział. Należy przy tym zaznaczyć, że aby cały ten aparat mógł być użyty należy przyjąć kolejne, bardzo istotne założenie dotyczące rozpatrywanego układu, które będzie rzutowało na regularność takiej funkcji: ergodyczność systemu.

Definicja 5. Niech dany będzie układ dynamiczny $\mathbf{f}: M_{ph} \mapsto M_{ph}$ z niezmienniczną miarą μ . O przekształceniu \mathbf{f} powiemy, że jest ergodyczne o ile dla każdego zbioru mierzalnego $A \subset M_{ph}$ zachodzi implikacja $T^{-1}(A) = A \implies \mu(A) = 0$ lub $\mu(M_{ph} - A) = 0$.

Zauważmy, że wobec założenia dotyczącego różniczkowalności $\mathbf{f}: M_{ph} \mapsto M_{ph}$ przeciwobraz dowolnego zbioru mierzalnego można podmienić na obraz tegoż zbioru. A więc przekształcenie ergodyczne to takie, dla którego jedynymi zbiorami niezmienniczymi są te pełnej miary lub zbiory miary zero.

Formalna definicja ergodyczności wydawać się może abstrakcyjna, niemniej wprowadzenie tego pojęcia wynikało pierwotnie z potrzeb fizyki, a dokładnie z mechaniki statystycznej i ma ono praktyczną interpretację. Załóżmy bowiem, że chcielibyśmy wyznaczyć temperaturę gazu w danym pomieszczeniu. Patrząc na to z eksperymentalnego punktu widzenia

nie ma w tym nic nadzwyczajnego - wystarczy w dowolnym miejscu dokonać pomiaru za pomocą termometru. Należy przy tym odczekać odpowiednią ilość czasu związaną z termiczną bezwładnością przyrządu. Na ten oczywisty fakt można spojrzeć z punktu widzenia układów dynamicznych - temperatura jest miarą średniej energii kinetycznej ruchu postępowego cząstek gazu w pomieszczeniu (przyjmujemy tutaj model gazu doskonałego jako dobre przybliżenie). Pomiar za pomocą termometru mierzy energie kinetyczne cząstek, których wartości różnią się. Stąd, aby pomiar był poprawny, należy zapewnić odpowiednio długi okres uśredniania. Dodatkowo należy zwrócić uwagę, że nie ma znaczenia w którym miejscu tego pomiaru dokonamy (gaz jest w równowadze termodynamicznej). Mimo, że z mikroskopowego punktu widzenia w każdej chwili cząstki poruszają się chaotycznie ich średnia wartość pewnych wielkości (w tym przypadku energii kinetycznej) nie zmienia się. Analizując to zadanie, ale tym razem na drodze teorii napotyka się pewien problem. Rozwiązanie równań dynamiki dla tak złożonego układu jest zbyt kosztowne w sensie czasu obliczeń. Z mechaniki statystycznej wiadomo jednakże, że istnieje w stanie równowagi funkcja rozkładu prędkości cząstek (rozkład Maxwella-Boltzmanna). Jest to funkcja gęstości prawdopodobieństwa i dzięki niej można bez większych problemów (tj. całkując po przestrzeni fazowej) wyznaczyć poszukiwaną średnią wartość energii kinetycznej przypadającej na cząstkę a w konsekwencji temperaturę gazu. Kryje się za tym jednak pewna subtelność - wykorzystane zostało uśrednianie po przestrzeni fazowej (po wszystkich możliwych prędkościach z wagami odpowiadającymi rozkładowi Maxwella-Boltzmanna). Jest to abstrakcyjny zabieg, który można sobie wyobrazić jako mierzenie parametrów jednej cząstki 'rozmażanej' przez funkcję rozkładu po wszystkich możliwych jej stanach. W tym momencie dochodzimy do istoty problemu: kiedy można powiedzieć, że losowo wybrana cząsta jest reprezentatywna w tym sensie, że (po odpowiednio długim czasie) wartość średnia mierzonej dla niej wielkości będzie odpowiadała wartości oczekiwanej tej samej wielkości dla zespołu cząstek? Kierując się intuicją można dojść do wniosku, że owa cząstka z pewnością winna przyjmować każdą z możliwych wartości prędkości z odpowiednią częstością dyktowaną rozkładem. Innymi słowy: powinna ona przejść przez (prawie) każdy punkt przestrzeni fazowej, przy czym okres 'przebywania' w różnych jej obszarach nie może być jednorodny. Aby to mogło zajść układ powinien wykazywać brak stałych tendencji, a więc przejawiać własności chaotyczne, w powszechnym tego słowa znaczeniu. Jako pierwszy do takiego wniosku doszedł sam Boltzmann, który opisał to słowami: "Duża nieregularność ruchu cieplnego i zmienność sił wewnętrznych działających na ciało stwarza duże prawdopodobieństwo, że atomy w ruchu cieplnym mogą przyjmować wszystkie wartości położeń i pędów zgodnie z ustaloną energią wewnętrzną ciała" [17]. Wniosek taki nie jest ścisły, ale jest bardzo bliski prawdy. Okazuje się bowiem, że warunkiem koniecznym i dostatecznym ergodyczności układu jest brak możliwości podzielenia przestrzeni fazowej na dwa podzbiory o niezerowych miarach, niezmienniczych względem dynamiki układu (jest to nieformalne sformułowanie słynnych twierdzeń ergodycznych autorstwa George'a Birkhoffa). Stąd (i z definicji ergodyczności) można już dojść do wniosku, że brak takich obszarów przestrzeni fazowej wymusza pokrywanie przez μ -prawie każdą trajektorię całej przestrzeni fazowej (nie wszystkie, bo mogą bowiem istnieć orbity cykliczne, o których będzie mowa w następnym rozdziale). Co więcej funkcja rozkładu statystycznego takich układów jest ustalona i niezmienna względem czasu, a więc

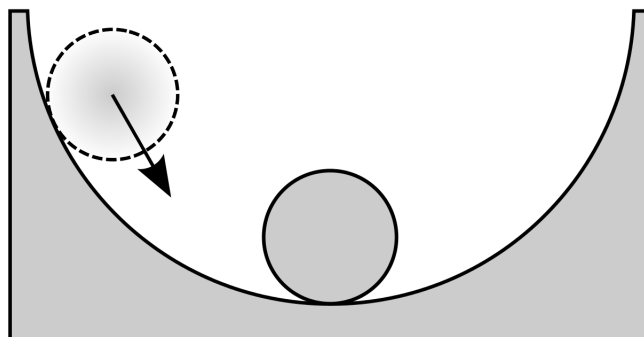
średnie długookresowe istnieją i są (przynajmniej w przejściu granicznym) sobie równe. Wobec powyższego rozumowania można dojść do wniosku, że własność ta implikuje istotną cechę rozpatrywanych układów: długookresowe wartości średnie są niezależne od warunków początkowych (uściślając: są one takie same dla prawie wszystkich warunków początkowych) i ich wartość można równoważnie uzyskać poprzez uśrednianie po przestrzeni fazowej układu (względem miary probabilistycznej, która w takich układach jest niezmiennicza). Jak się później przekonamy (Rozdział) całkowanie w przestrzeni możliwych stanów układu ma działanie regularyzujące.

2.2 Stabilność rozwiązań

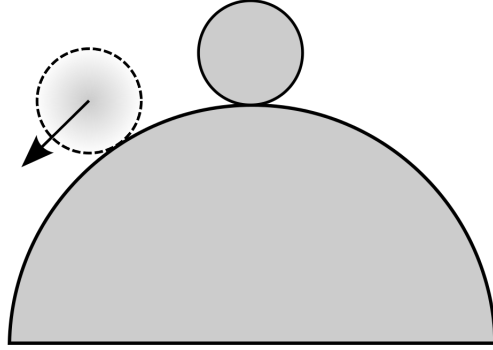
Zagadnienie stabilności związane jest z odpowiedzią na pytanie jak zmieni się globalny przebieg rozwiązania pod wpływem małych (w odpowiednim sensie) perturbacji warunków początkowych lub funkcji określającej dynamikę układu, który jest zidentyfikowany poprzez (wektorowe) równanie różniczkowe zwyczajne.

Definicja 6. Punkt $\mathbf{u}_c \in M_{ph}$ nazywamy położeniem równowagi równania (1), o ile jest to punkt krytyczny odwzorowania \mathbf{f} , tzn. $\mathbf{f}(\mathbf{u}_c) = 0$.

Zauważamy, że położenie równowagi jest (stałym) rozwiązaniem równania (1) z takim samym warunkiem początkowym. Punkty takie jakościowo mogą istotnie się różnić ze względu na ewolucję w czasie swojego otoczenia. Ilustrację tej uwagi stanowi Rysunek przedstawiający ideę stabilnych punktów równowagi oraz analogiczny Rysunek dla punktów niestabilnych (pojęcia te i ich znaczenie jest analogiczne dla rodzajów równowagi termodynamicznej: trwałej i chwiejnej, odpowiednio).



Rysunek 2: Ilustracja stabilnego punktu równowagi



Rysunek 3: Ilustracja niestabilnego punktu równowagi

Jak już zostało wspomniane narzucenie warunku początkowego w postaci punktu równowagi implikuje stałe rozwiązanie układu (1). Powstaje naturalne pytanie jak zachowują się rozwiązania owego układu dla warunków początkowych $\mathbf{u}_0 \in M_{ph}$ takich, że

$$\|\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_0\|_X \leq \epsilon, \quad (8)$$

gdzie $\epsilon \in \mathbb{R}_+$.

Dla lepszego zrozumienia problemu oraz wytyczenia kierunku dalszych rozważań przytoczone zostaną dwa proste przykłady (w przypadku gdy $M = \mathbb{R}$) ilustrujące zachowanie obrazu otoczenia punktów równowagi w przypadku zaburzenia warunków początkowych oraz przekształcenia \mathbf{f} (poprzez perturbację wektora parametryzującego wspomnianą funkcję).

Przykład 1. *Rozważmy układ postaci*

$$\frac{dx}{dt} = x^2 - 1, \quad (9)$$

z warunkiem początkowym postaci

$$x(0) = x_0 \quad (10)$$

Układ taki można rozwiązać analitycznie. Rodzina krzywych całkowych w tym przypadku określona jest wzorem

$$x(t) = \frac{1 - e^{2C+2t}}{1 + e^{2C+2t}}, \quad (11)$$

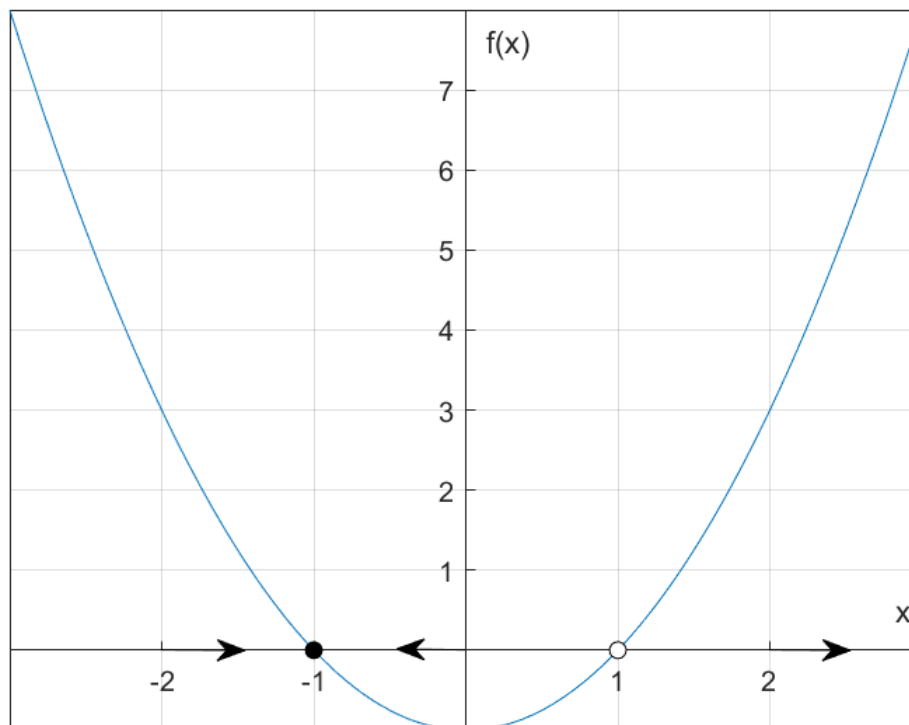
gdzie

$$C = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - x_0}{1 + x_0}. \quad (12)$$

Zauważmy jednak, że powyższy wzór ma sens jedynie w przypadku, gdy $x_0 \in (-1, 1)$. Dla $x_0 = -1$ lub $x_0 = 1$ otrzymujemy stałe rozwiązanie równe x_0 (punkt równowagi), zaś przy $\|x_0\| > 1$ należy rozpatrzyć osobno.

Powyższa analiza pokazuje, że jakościowe badanie równań wymaga dodatkowych technik

(nawet w przypadku obecności analitycznego rozwiązania). Dużo lepsze efekty uzyskuje się poprzez podejście geometryczne z użyciem tzw. portretów fazowych. Otrzymuje się je poprzez zwiualizowanie funkcji zadającej dynamikę w rozpatrywanym układzie. Następnie analizuje się ewolucję dowolnego punktu reprezentującego warunek początkowy w zależności od znaku funkcji. Idea ta została przedstawiona na Rysunku.



Rysunek 4: Portret fazowy układu z Przykładu 1

Dla dowolnego punktu $x_0 \in (-1, 1)$ odpowiadająca mu wartość funkcji $f(x) = x^2 - 1$ jest ujemna, wobec czego pochodna rozwiązania jest ujemna i w 'następnym kroku czasowym' będzie miało ono niższą wartość. Zostało to przedstawione za pomocą strzałki o grocie skierowanym w lewą stronę. Analogiczne rozumowanie pozwala dojść do wniosku, że dla $x_0 \in (-\infty, -1) \cup (1, \infty)$ rozwiązanie będzie zwiększało swoją wartość wraz z upływem czasu, co ilustrują strzałki skierowane w prawą stronę. Oczywiście dla $x_0 = -1$ lub $x_0 = 1$ rozwiązanie nie będzie się zmieniało, ponieważ są to punkty równowagi. Na koniec zauważmy, że niewielka perturbacja pierwszego z tych punktów 'sprowadzi' rozwiązanie (po pewnym czasie) do warunku początkowego, podczas gdy dowolna zmiana drugiego punktu powoduje rozbieżność rozwiązania. Wobec tego punkty równowagi można podzielić na (lokalnie) stabilne ($x_0 = -1$) i niestabilne ($x_0 = 1$). Formalna definicja tych pojęć podana zostanie później w tym rozdziale.

Przykład 2.

Powyższe przykłady sugerują następującą definicję.

Definicja 7. Niech $\bar{\mathbf{u}} \in M_{ph}$ będzie rozwiązaniem układu (1). Powiemy, że jest ono stabilne w sensie Lyapunowa o ile $\forall \epsilon > 0 \exists t_0 \geq 0 \exists \eta > 0 \forall t > t_0$ zachodzi implikacja:

$$\|\bar{\mathbf{u}}(t_0) - \mathbf{u}(t_0)\|_X \leq \eta \Rightarrow \|\bar{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)\|_X \leq \epsilon,$$

gdzie symbolem \mathbf{u} oznaczono dowolne rozwiązanie układu (1).

Ponadto jeśli

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\bar{\mathbf{u}}(t) - \mathbf{u}(t)\|_X = 0,$$

to rozwiązanie $\bar{\mathbf{u}} \in M_{ph}$ nazywamy asymptotycznie stabilnym.

Taka definicja stabilności jest szeroko stosowana w wielu zastosowaniach technicznym. Dobrym przykładem mogą być układy automatycznej regulacji, w których praktyczne kryteria (takie jak kryterium Rutha lub Hurwitza) wyprowadza się bazując na stabilności określonej w powyższym sensie.

Zazwyczaj oczywiście nie dysponujemy rozwiązaniami. Z tego powodu konieczne są inne techniki służące jakościowemu badaniu równań. Jednym z takich pomysłów jest zdefiniowanie specjalnej funkcji związanej z nazwiskiem Lyapunowa.

Definicja 8. Funkcję Lyapunowa dla układu postaci (1) nazywamy dyfeomorfizm $V : M_{ph} \rightarrow \mathbb{R}$, który spełnia warunki:

- $\forall x \in M_{ph} V(x) \geq 0$,
- $V(u) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy u jest punktem równowagi,
- dla dowolnego rozwiązania $u(t)$ zachodzi $\frac{d}{dt} V(u(t)) \leq 0$

Zauważmy, że nie trzeba dysponować rozwiązaniem, gdy znaleziona zostanie odpowiadająca mu funkcja Lyapunowa (co zazwyczaj jest zadaniem dużo łatwiejszym). Ostatni warunek Definicji mówi, że funkcja Lyapunowa na krzywych całkowych jest nierosnąca. W związku z tym prawdziwe jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 1. Niech dany będzie układ postaci (1) i niech funkcja prawych stron będzie dyfeomorfizmem. Ponadto niech $0 \in M_{ph}$ i $\mathbf{f}(0) = 0$. Jeśli dla takiego układu istnieje funkcja Lyapunowa, to rozwiązanie $\mathbf{u}(t) \equiv 0$ jest stabilne. Ponadto jeśli $\frac{d}{dt} V(u(t)) < 0$ dla $u \in M_{ph} - \{0\}$, to jest ono asymptotycznie stabilne.

Dowód tego twierdzenia jest dość techniczny. Można go znaleźć w większości podręczników traktujących o równaniach różniczkowych (na przykład [14]). Intuicyjnie jednakże jest ono dość oczywiste. Z założeń poczynionych na początku rozdziału wybór dowolnego warunku początkowego z przestrzeni fazowej determinuje jednoznacznie rozwiązanie tego układu (zależność przyporządkowująca warunkowi początkowemu rozwiązanie jest przekształceniem ciągłym), a funkcja Lyapunowa dla takiego rozwiązania jest nierosnąca. Ponieważ z definicji jest ona nieujemna i przyjmuje zerowe wartości tylko w punktach

równowagi, to krzywa całkowa musi pozostać dostatecznie blisko takiego punktu, gdy jest ono stabilnym rozwiązaniem lub też zbiegać do niego w przypadku gdy jest to asymptycznie stabilne rozwiązanie.

Powyższe uwagi sugerują pewien sposób postrzegania funkcji Lyapunowa. Niech dana będzie funkcja $V(u)$ nazywana dalej potencjałem zdefiniowana równaniem

$$f(u) = -\frac{dV}{du}. \quad (13)$$

Trajktując u jako zmiennej niezależnej t mamy:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{dV}{du} \frac{du}{dt}. \quad (14)$$

Referując dalej do układu postaci (1) otrzymujemy:

$$\frac{dV}{dt} = -\left(\frac{dV}{du}\right)^2 \leq 0. \quad (15)$$

Tak zdefiniowany potencjał zachowuje się jak funkcja Lyapunowa. Ta intuicja sugeruje również (zgodnie z oczekiwaniami), że lokalne maksima potencjału odpowiadają niestabilnym punktom równowagi, zaś lokalne minima odpowiadają stabilnym (idea potencjału jest często używana w kontekście fizyki, w szczególności pola sił, które można zdefiniować jako gradient pewnego pola skalarnego określany jest mianem potencjalnego i posiada przy tym szereg specyficznych cech, jak na przykład zachowawczość).

Dotychczas wszelkie rozważania oparte były na rozwiązaniach ustalonego układu, w którym czas jest traktowany jako zmienna niezależna, zaś warunek początkowy jako parametr. Oznaczając rozwiązanie układu (1) z warunkiem początkowym (2) w czasie t przez $u(t; u_s)$ możemy zdefiniować rodzinę dyfeomorfizmów (na mocy założeń dotyczących funkcji $f(u)$ i przestrzeni fazowej M_{ph}) sparametryzowanych zmienną t : $g^t : M_{ph} \rightarrow M_{ph}$ taką, że:

$$g^t(u_s) = u(t; u_s). \quad (16)$$

Fakt, że tak zdefiniowane funkcje są różniczkowalne wynika z gładkiej zależności rozwiązań względem warunków początkowych. Załóżmy od tego momentu, że zmienna $t \in (-\infty; \infty)$, tzn. że zmienna ta może przyjmować dowolne wartości. Wówczas zachodzą następujące definicje.

Definicja 9. *Potokiem układu (1) nazywamy parę (M_{ph}, g^t) , gdzie M_{ph} oznacza przestrzeń fazową, zaś $\{g^t\}_{t \in (-\infty; \infty)}$ oznacza zdefiniowaną wcześniej rodzinę dyfeomorfizmów.*

Definicja 10. *Trajektorię (orbitę) punktu u_s nazywa się obraz przekształcenia $g^t(u_s)$ dla $t \in (-\infty; \infty)$.*

Trajektorię można postrzegać jako ewaluację rozwiązania w konkretnej chwili, traktując przy tym warunek początkowy jako zmienną niezależną. W związku z tym, gdy u_s jest punktem równowagi, to jego orbita jest stała $g^t(u_s) \equiv u_s$.

Przełiśmy od analizy krzywych całkowych jako funkcji czasu do trajektorii układu, które

od czasu nie zależą i w naturalny sposób można je zilustrować w przestrzeni fazowej. Jednocześnie mają one wiele wspólnego z rozwiązaniami. Zauważmy najpierw, że sam potok (M_{ph}, g^t) ma strukturę grupy abelowej z działaniem

$$g^{t+s} = g^t g^s. \quad (17)$$

Elementem neutralnym tej grupy jest przekształcenie identycznościowe. Stąd i z jedyności rozwiązań rozpatrywanego układu wynika następujące twierdzenie.

Twierdzenie 2. *Przez każdy punkt przestrzeni fazowej przechodzi dokładnie jedna orbita.*

Takie zachowanie trajektorii upadabnie je do rozwiązań. Ich zaleta przejawia się tym, że z topologicznego punktu widzenia różnych rodzajów orbit jest niewiele, w przeciwieństwie do geometrycznego bogactwa kształtów krzywych całkowych. Mówi o tym następujące twierdzenie.

Twierdzenie 3. *Przy założeniach przyjętych uprzednio orbity potoku generowanego przez układ (1) dzielą się na trzy kategorie:*

- *orbity otwarte*
- *orbity zamknięte*
- *punkty krytyczne*

Dowód tego twierdzenia opiera się istotnie o poprzednim twierdzeniu i o własnościach domkniętych grup addytywnych. Zamiast podawać pełną jego wersję zilustrowane zostaną jego konsekwencje bazując na dwóch przykładach zaczerpniętych z książki [14].

Przykład 3. *Rozważmy równanie*

$$\frac{du}{dt} = u. \quad (18)$$

Trajektoria punktu u_s ma postać $\{e^t u_s\}$, gdzie $t \in (-\infty, \infty)$. W związku z tym dla $u_s > 0$ orbitę stanowi przedział $(0, \infty)$, dla $u_s < 0$ przedział $(-\infty, 0)$, zaś dla $u_s = 0$ trajektoria redukuje się do punktu $\{0\}$

Z przykładu tego można łatwo uogólnić następujący wniosek: w przypadku jednowymiarowej przestrzeni fazowej orbity układów dynamicznych redukują się do punktów lub też do przedziałów (nieograniczonych przynajmniej z jednej strony). W szczególności niemożliwe jest otrzymanie trajektorii okresowej. Sytuację tę zmienia dodatkowy wymiar przestrzeni fazowej, co pokazuje następny przykład.

Przykład 4. *Rozważmy układ postaci*

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= -u_1 + u_1(1 - u_1^2 - u_2^2) \\ \frac{du_2}{dt} &= u_1 + u_2(1 - u_1^2 - u_2^2) \end{aligned} \quad (19)$$

Rozwiązanie można uzyskać poprzez wprowadzenie współrzędnych biegunowych

$$\begin{aligned} u_1 &= r \cos(\theta) \\ u_2 &= r \sin(\theta), \end{aligned} \quad (20)$$

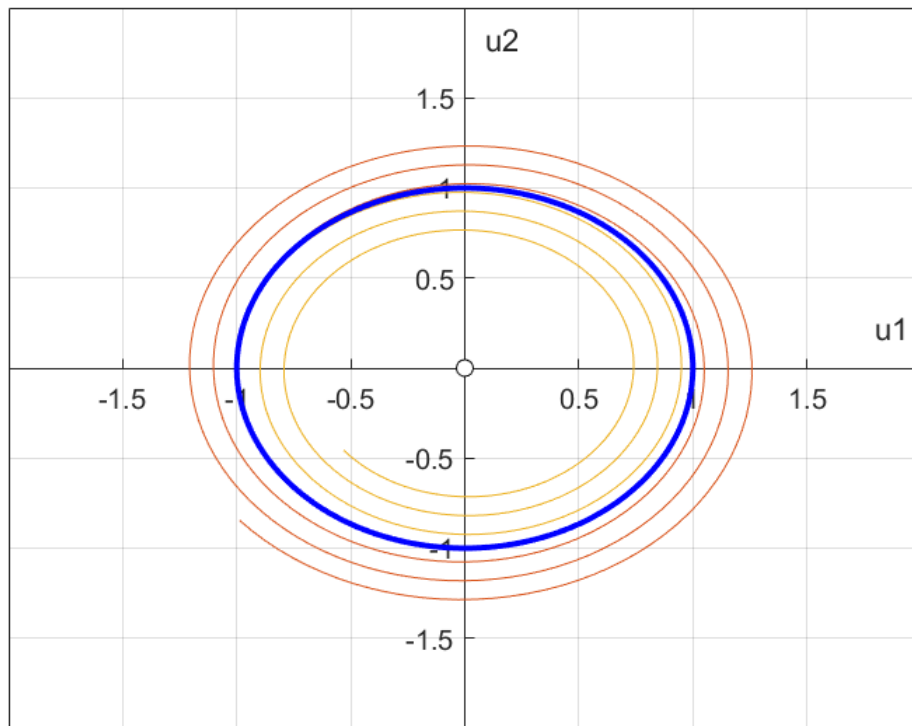
aby otrzymać układ

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dt} &= r(1-r^2) \\ \frac{d\theta}{dt} &= 1\end{aligned}\tag{21}$$

Trajektorie pierwszego równania mają postać $\{\frac{u_s e^t}{\sqrt{u_s^2 e^{2t} - p^2 + 1}}\}$. Dostajemy trzy rodzaje trajektorii:

- punkt równowagi $(0,0)$,
- orbitę okresową $u_1^2 + u_2^2 = 1$,
- orbity spiralne 'nawijające' się od zewnątrz i od wewnątrz na orbitę okresową.

Zostały one zilustrowane na Rysunku, gdzie pogrubioną linią zaznaczono trajektorię okresową.



Rysunek 5: Trajektorie rozważanego układu

Z powyższych przykładów łatwo można dojść do wniosku, że analiza trajektorii w przestrzeni fazowej jest dużo łatwiejsza niż badanie nieskończonej (być może nieprzeliczalnej) liczby rozwiązań danego układu. Dysponując już odpowiednim aparatem pojęciowym możemy przejść do analitycznego ujęcia zjawiska chaosu.

2.3 Chaos deterministyczny

Do tej pory przedstawione zostały pewne ogólne sposoby badania stabilności układów dynamicznych. Obecnie przechodzimy do analizy równań, których rozwiązania (choć nadal są wyznaczone w sposób jednoznaczny) mają bardzo skomplikowane portrety fazowe, które w praktyce istotnie ograniczają możliwość przewidywania długookresowych zachowań tych rozwiązań. Należy zauważyć, że do tej pory takie układy nie były rozważane, gdyż dotychczas prezentowane były systemy o co najwyżej dwuwymiarowej przestrzeni fazowej, zaś wspomniana cecha ujawnia się gdy liczba wymiarów jest nie mniejsza niż trzy. Dodatkowy wymiar przestrzeni fazowej umożliwia pojawienie się trajektorii o kształtach tak skomplikowanych, że klasyczne metody geometrii pozostają wobec nich bezsilne. Stanowią one istotną wskazówkę, iż mamy do czynienia z chaosem (choć nie jest to reguła). Chaos deterministyczny wyróżniają (nieformalnie ujmując) trzy cechy układu:

- determinizm,
- nieliniowość,
- wrażliwość na warunki początkowe.

Pierwsza z nich dotyczy istnienia i jednoznaczności rozwiązania, zaś druga struktury równań zadających dynamikę (suma rozwiązań w ogólności nie musi być rozwiązaniem). Ostatnia cecha dotyczy zachowania się trajektorii wraz z upływem czasu - norma ich różnicy pozostaje nieograniczona pomimo zbliżonych warunków początkowych. Innymi słowy: ustalwszy uprzednio warunek początkowy, trajektorie wychodzące z punktów z jego dowolnego otoczenia z czasem pozostają odległe od trajektorii rozpoczynającej się w tymże punkcie⁴. Wrażliwość układu dynamicznego równie silnie przejawia się w stosunku do zmiany parametrów funkcji $f: M_{ph} \mapsto M_{ph}$ przy ustalonym warunku początkowym. Występują istotne różnice pomiędzy wspomnianymi wrażliwościami, które mają bezpośrednie konsekwencje w analizie układu - zagadnienie to zostanie poruszone przy okazji omawiania *Metody Trajektorii Cienia*. Dodatkowo, często wspomina się o długookresowym, aperiodycznym zachowaniu rozwiązań w kontekście chaosu.

Z powyższych ustaleń można dojść do wniosku, że o takim układzie niemalże nic konkretnego nie można powiedzieć. Należy pamiętać o tym, że z punktu widzenia metod numerycznych zawsze istnieją ograniczenia (precyzja maszynowa, błędy zaokrągleń, itp.), co wobec ostatniej z wyżej wspomnianych cech również nie poprawia sytuacji. W matematyce oraz w naukach przyrodniczych, w sytuacjach podobnych do zainstniałej, dobrym pomysłem jest próba znalezienia niezmienników - stałych elementów w rozważanych systemach. Okazuje się, że dla układów dynamicznych pomocnym jest zdefiniowanie niezmienniczego ze względu na dynamikę zbioru zwanego atraktorem.

Definicja 11. Zbiór $\Lambda \subset M_{ph}$ nazywamy atraktorem układu (1), jeżeli:

- Λ jest niezmienniczy względem f , tj. $f(\Lambda) \subset \Lambda$,

⁴Mówiąc bardziej precyzyjnie - cecha ta zachodzi dla μ -prawie wszystkich punktów z otoczenia, gdzie definicja miary μ podana zostanie później.

- Istnieje zbiór otwarty $U \subset M_{ph}$ taki, że $\forall \mathbf{u} \in M_{ph}$ zachodzi:
 $\mathbf{u}(0) \in U \implies \lim_{t \rightarrow \infty} d(\Lambda, \mathbf{u}(t)) = 0$,
gdzie przez $d(,)$ oznaczono metrykę indukowaną przez normę w M_{ph} ,
- Λ jest minimalny w tym sensie, że żaden jego właściwy podzbiór nie spełnia powyższych dwóch warunków⁵.

Patrząc na dotychczas omówione przykłady można dojść do wniosku, że różne proste postaci atraktorów już się pojawiały (patrz). Różnorodność ich geometrii była jednak mocno ograniczona ().

⁵Ze względu na trudności w dowodzeniu poprawności tego warunku w większości przypadków jest on pomijany.

3 Wybrane metody optymalizacji lokalnej stosowane w technice

Rezultatem analizy wrażliwości jest oszacowanie gradientu funkcji celu w wybranym punkcie przestrzeni parametrów. Zdecydowana większość metod optymalizacji lokalnej w istocie bazuje na tak wyznaczonym gradiencie, wobec czego dokładność jego szacowania jest krytycznym momentem procesu optymalizacyjnego. W dalszej części tego rozdziału zaprezentowane zostały trzy klasyczne metody, z których pierwsza, metoda różnic skończonych, jest dogodna do wyznaczania pochodnych względnie prostych funkcji oraz szacowania błędów dwóch następnych: metody Tangent (???) oraz metody operatora sprzężonego, które znajdują liczne zastosowania w technice [1].

3.1 Metoda różnic skończonych

Metoda ta jest rozwinięciem intuicji stojących za wyznaczaniem pochodnej funkcji. Granicę ilorazu różnicowego przybliża się poprzez tzw. *schematy różnicowe*, które wymagają wyznaczenia wybranej funkcji w kilku punktach. Schematy te mają przykładowe postaci (do końca pracy pochodna poszukiwanej funkcji oznaczana będzie symbolem J , zaś jej parametr symbolem s):

$$\frac{dJ}{ds}(s_0) \approx \frac{J(s_0 + \Delta s) - J(s_0)}{\Delta s}, \quad (22)$$

$$\frac{dJ}{ds}(s_0) \approx \frac{J(s_0) - J(s_0 - \Delta s)}{\Delta s}, \quad (23)$$

$$\frac{dJ}{ds}(s_0) \approx \frac{J(s_0 + \Delta s) - J(s_0 - \Delta s)}{\Delta s}, \quad (24)$$

którym odpowiadają odpowiednio: schemat różnicowy przedni, wsteczny oraz centralny. Metoda ta jest bardzo prosta w implementacji i dość łatwo pozwala kontrolować dokładność wyznaczanej pochodnej poprzez dobór odpowiednio małego przyrostu Δs . Należy zauważyć, że dla odpowiednio małej wartości takiego przyrostu błąd arytmetyki zmienoprzecinkowej istotnie rzutuje na dokładności wyniku. Nietrywialnym rozszerzeniem tej metody jest zastosowanie przyrostu jako liczby czysto urojonej. Dalsze postępowanie jest analogiczne do wyżej wspomnianych, przy czym operacje wykonywane są zgodnie z arytmetyką liczb zespolonych. Ostateczny wzór przyjmuje postać:

$$\frac{dJ}{ds}(s_0) \approx \frac{Im[J(s_0 + i\epsilon)]}{\epsilon}, \quad (25)$$

gdzie Im oznacza część zespoloną, zaś ϵ jest liczbą rzeczywistą. Zabieg ten pozwala na separację badanego punktu przestrzeni parametrów oraz zaburzenia na dwa niezależne obiekty numeryczne, dzięki czemu problem błędów zaokrągleń zostaje wyeliminowany. Dokładność szacowanej pochodnej pozostaje ograniczona jedynie precyzją maszynową.

3.2 Metoda Tangent (???)

3.3 Metoda Operatora Sprzężonego

4 Metoda Trajektorii Cienia

4.1 Wstęp

Przyczyną załamania się klasycznych metod analizy wrażliwości w przypadku układów chaotycznych jest ich duża wrażliwość na niewielkie zaburzenia dynamiki układu, która przejawia się w rozbieżności rozwiązań wraz z upływem czasu (tempo tej rozbieżności determinowane jest przez wykładniki Lyapunowa, zaś jej kierunek przez wektory kowariantne Lyapunowa - patrz Rozdział). Z praktycznego punktu widzenia obiektem zainteresowania są wartości średnie wielkości chwilowych, w których okres uśredniania jest stosunkowo długi, tj. funkcje postaci (6). W rozdziale tym będziemy poszukiwali czułości tak zdefiniowanych funkcji względem parametru $s \in \mathbb{R}$ (zakładamy przy tym, że parametr projektowy jest skalar, aby nie komplikować istoty problemu niepotrzebnymi rachunkami - rozszerzenie na przypadek wektorowy nie jest trudne). Konkretnie: poszukujemy wartości wyrażenia

$$\frac{d\bar{J}}{ds} = \lim_{\delta s \rightarrow 0} \frac{1}{\delta s} \left(\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T J(s + \delta s) dt - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T J(s) dt \right). \quad (26)$$

Przy założeniach przywołanych w Rozdziale można pokazać, iż taka wielkość jest dobrze zdefiniowana []. Co więcej jej wartość wynosi. Heurystyczne obserwacje pokazują, że takie wielkości statystyczne zmieniają się stosunkowo niewiele wraz z perturbacją dynamiki. Główną przeszkodę stanowi fakt, iż czas numerycznej symulacji jest zawsze skończony. Podstawową ideą Metody Trajektorii Cienia jest regularyzacja poprzez odpowiedni wybór trajektorii zaburzonej przy innym warunku początkowym. Postępowanie takie jest usprawiedliwione na mocy założenia ergodyczności (Rozdział). Głównym narzędziem jest operator cienia, którego własności zostaną przedstawione w następnych sekcjach. Do końca pracy przyjmujemy założenia z Rozdziału. W szczególności te dotyczące ergodyczności oraz hiperboliczności układu (1), jak i regularności funkcji $\mathbf{f}: M_{ph} \rightarrow M_{ph}$

4.2 Metoda Operatora Cienia

Przypuśćmy, że dana jest trajektoria pewnego układu dynamicznego postaci (1), którą zapiszemy w postaci

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}_t, \quad (27)$$

gdzie $\forall t \in \mathbb{R}_+ \mathbf{u}_t \in M_{ph}$. Wprowadźmy zaburzenie w postaci rodziny funkcji gładkich i wspólnie ograniczonych $\{\delta \mathbf{u}_t \mid t \in \mathbb{R}_+\}$, takiej że $\forall t \in \mathbb{R}_+ (\mathbf{u}_t + \epsilon \delta \mathbf{u}_t) \in M_{ph}$, gdzie $\epsilon \in \mathbb{R}_+$ jest pewną stałą. Mamy wówczas

$$\mathbf{u}'(t) = \mathbf{u}'_t = \mathbf{u}_t + \epsilon \delta \mathbf{u}_t. \quad (28)$$

Zauważmy, że z przyjętych na początku tego Rozdziału założeń wynika, że tak zdefiniowana trajektoria odpowiada układowi postaci

$$\frac{d}{dt} \mathbf{u}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{u}) + \epsilon \frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{u}') - \epsilon \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{u}(\mathbf{u}') + \epsilon \frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{f}(\mathbf{u}') + O(\epsilon^2), \quad (29)$$

gdzie ostatnia równość wynika z przyjętych założeń na temat zaburzenia $\delta u(u)$. Wobec tego można to równanie zapisać w postaci

$$\frac{d}{dt}\mathbf{u}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{u}') + \epsilon\delta\mathbf{f}(\mathbf{u}') + O(\epsilon^2), \quad (30)$$

gdzie perturbacja dyfeomorfizmu $\delta\mathbf{f}: M \rightarrow M$ wyraża się formułą

$$\delta\mathbf{f}(\mathbf{u}) = -\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{u}}\delta\mathbf{u}(\mathbf{u}) + \frac{d\delta\mathbf{u}}{dt} = S_f\delta\mathbf{u}(\mathbf{u}). \quad (31)$$

Wprowadzony powyżej liniowy operator $S_f: \delta\mathbf{u} \mapsto \delta\mathbf{f}$ nazywamy *operatorem cienia*. Tak zdefiniowany operator jest dobrze określony ([1]), tj. w sposób jednoznaczny definiuje gładkie zaburzenie $\delta\mathbf{f}: M \rightarrow M$ odpowiadające gładkiej perturbacji wyjściowej trajektorii (27). Innymi słowy: zaburzona trajektoria (28) spełnia jednoznacznie zaburzony układ (30). Pewną komplikację stanowi fakt, że z punktu widzenia wyznaczania wrażliwości (26) istotna jest operacja odwrotna. Perturbacja parametru projektowego s powoduje zmianę dynamiki $\delta\mathbf{f}(s)$, dla której poszukiwana jest perturbacja wyjściowej trajektorii $\delta\mathbf{u}(\delta\mathbf{f}(s))$ (pamiętając przy tym, że musi być ona 'dostatecznie mała'). Problem inwersji operatora cienia (przy założeniu, że takie odwzorowanie odwrotne istnieje) można rozwiązać numerycznie wykorzystując spektrum Lyapunowa.

4.3 LSS - podejście bazujące na intuicji

5 Implementacja metody LSS

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały wyniki symulacji numerycznej dla dwóch scenariuszy:

- Scenariusz I - układ Lorentza (1963)
- Scenariusz II -

5.1 Scenariusz I - konceptualne preliminarium

5.1.1 Model matematyczny

Zastosujemy teraz opisaną metodę trajektorii cienia w analizie wrażliwości za pomocą zagadnienia sprzężonego dla układu Lorentza, tj. układu chaotycznego opisywanego autonomicznym układem nieliniowych równań różniczkowych zwyczajnych postaci:

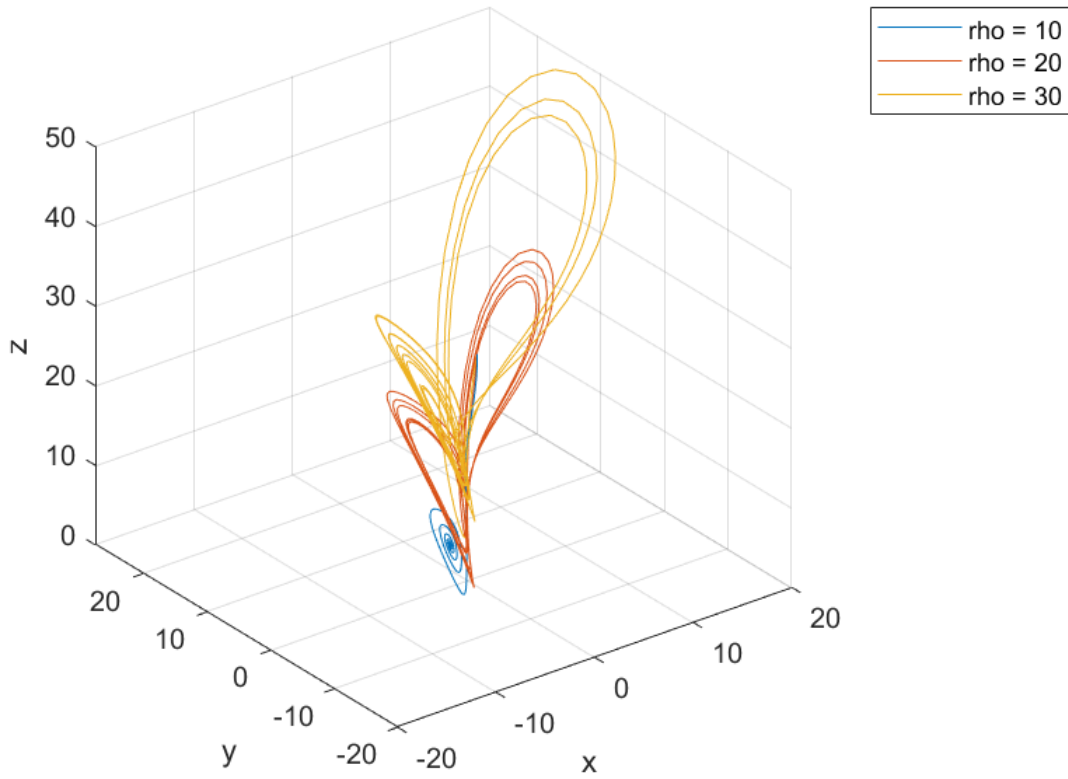
$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \sigma(y - z) \\ \frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \\ \frac{dz}{dt} = xy - \beta z \end{cases}, \quad (32)$$

gdzie σ, ρ, β są pewnymi stałymi. Nie zostały określone warunki początkowe, zakładając jedynie, że nie przyjmują one poniższych wartości (punkty krytyczne układu Lorentza):

- $x = y = z = 0$,
- $x = y = \sqrt{\beta(\rho - 1)}, z = \rho - 1$,
- $x = y = -\sqrt{\beta(\rho - 1)}, z = \rho - 1$,

Układ ten jest chaotyczny w ścisłym sensie i jest bardzo prostym modelem ruchu konwekcyjnego powietrza atmosferycznego (oryginalny układ Lorentza składał się z równań, rozważany jest skrajnie uproszczony - jest on minimalnym, w sensie ilości stopni swobody, układem, który może przejawiać chaotyczne zachowania), przy czym stała σ charakteryzuje lepkość ośrodka, ρ współczynnik przewodzenia ciepła, zaś β wymiar charakterystyczny.

Trajektorie dla trzech wybranych parametrów ρ w przypadku $x(0) = 1, y(0) = 0, z(0) = 28$ przedstawia Rysunek .



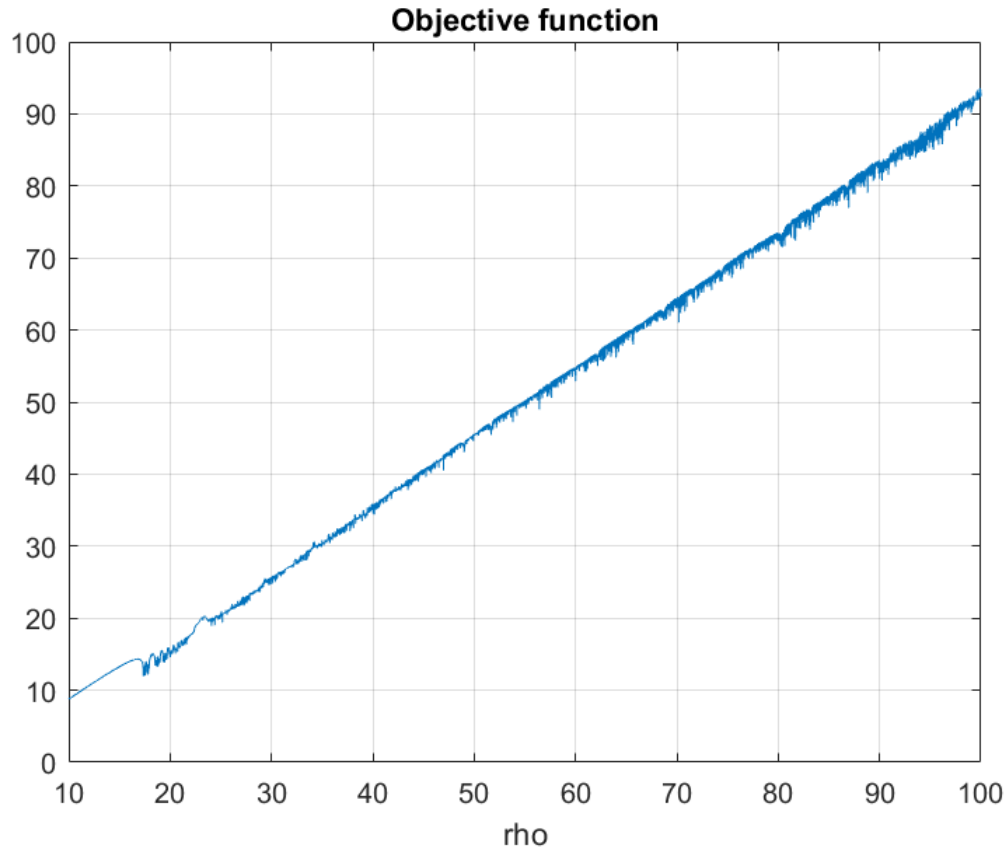
Rysunek 6: Trajektorie układu Lorentza.

5.1.2 Wyniki symulacji numerycznej

Funkcja celu została zdefiniowana jako

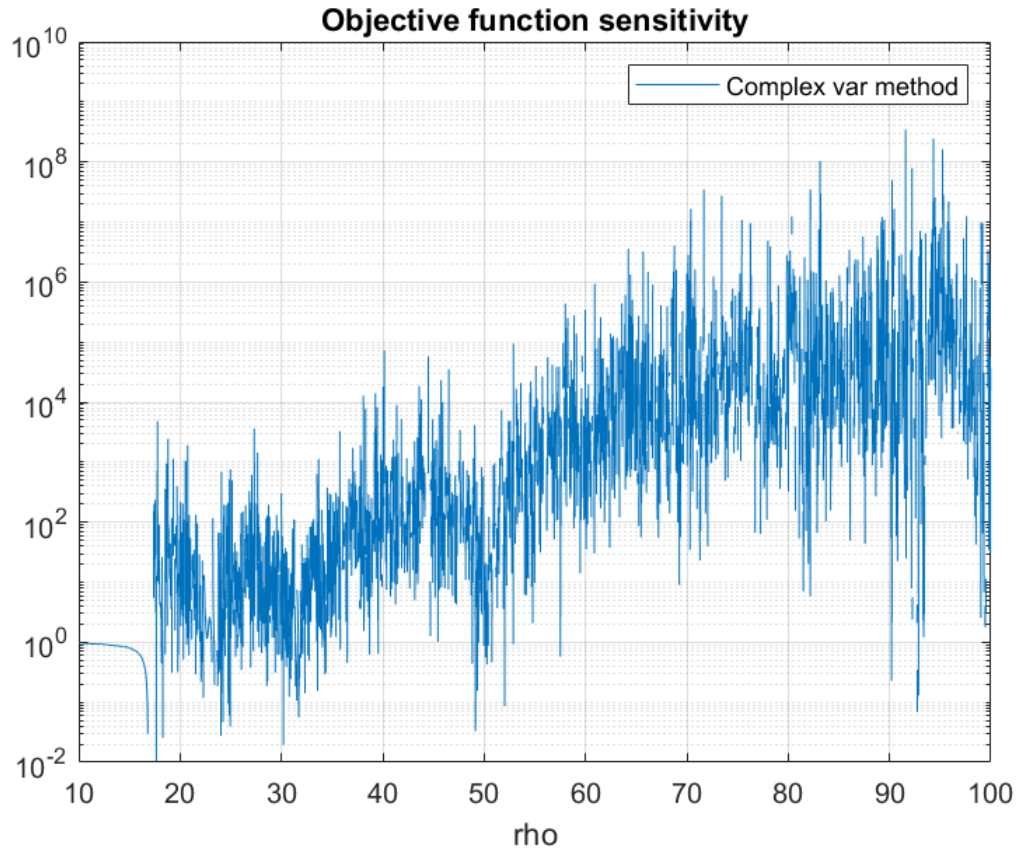
$$\langle \mathbf{J} \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T z dt \quad (33)$$

Założone zostały wartości parametrów: $\sigma = 10$, $\beta = \frac{8}{3}$, zaś ρ pozostawiono jako zmienną projektową (której zakres zmienności przebiega od 10 do 100). Rysunek przedstawia zmienność funkcji celu w rozważanym zakresie zmian ρ , gdzie okres uśredniania $T = 10$.



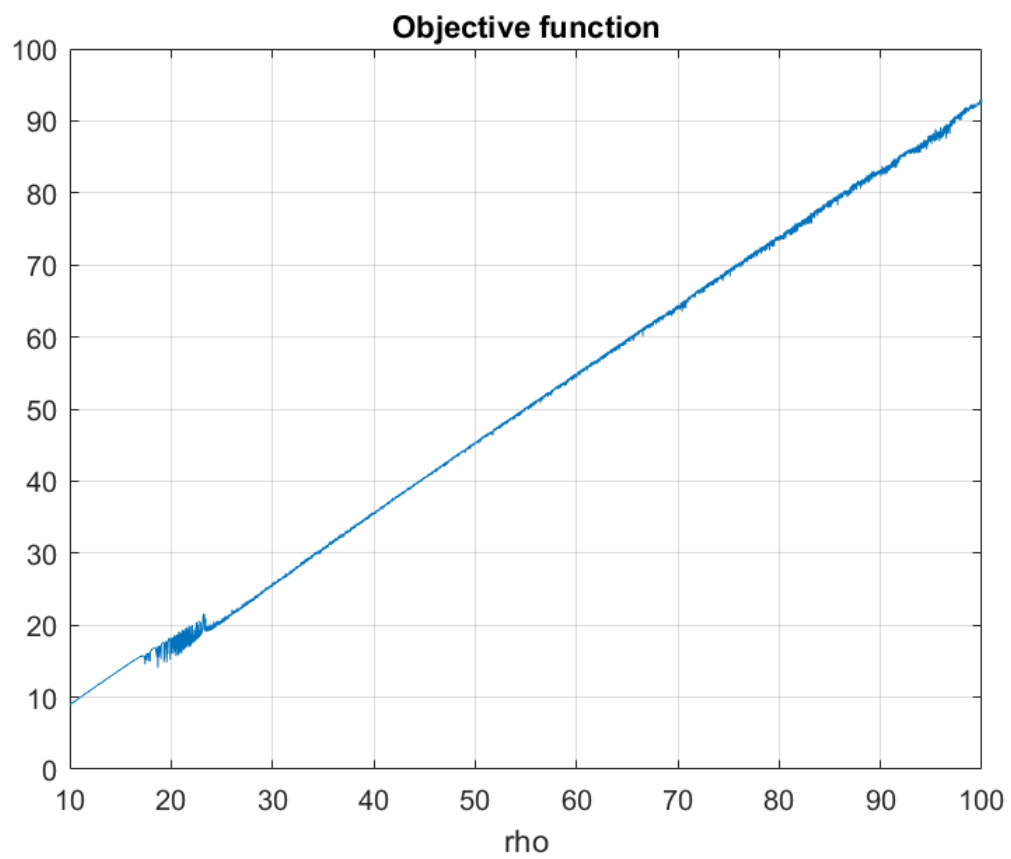
Rysunek 7: Zmienność funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej ($T = 10$)

Należy zauważyć, że chociaż ogólny trend krzywej sugeruje stałe jej nachylenie (wartość tangensa kąta tego nachylenia jest bliska jedności), to występują lokalne fluktuacje, które są przyczyną problemów w wyznaczenia wrażliwości tej funkcji na zmianę parametrów projektowych. Wyznaczona została dla tego przypadku pochodna względem parametru ρ , której wykres ilustruje Rysunek (oś rzędnych jest przedstawiona w skali logarytmicznej). Wykorzystano do tego celu metodę zaburzenia zaburzenia części urojonej zmiennej projektowej traktowanej jako liczbę zespoloną. Technika ta pozwala uzyskać pochodną z dokładnością maszynową (patrz Rozdział).

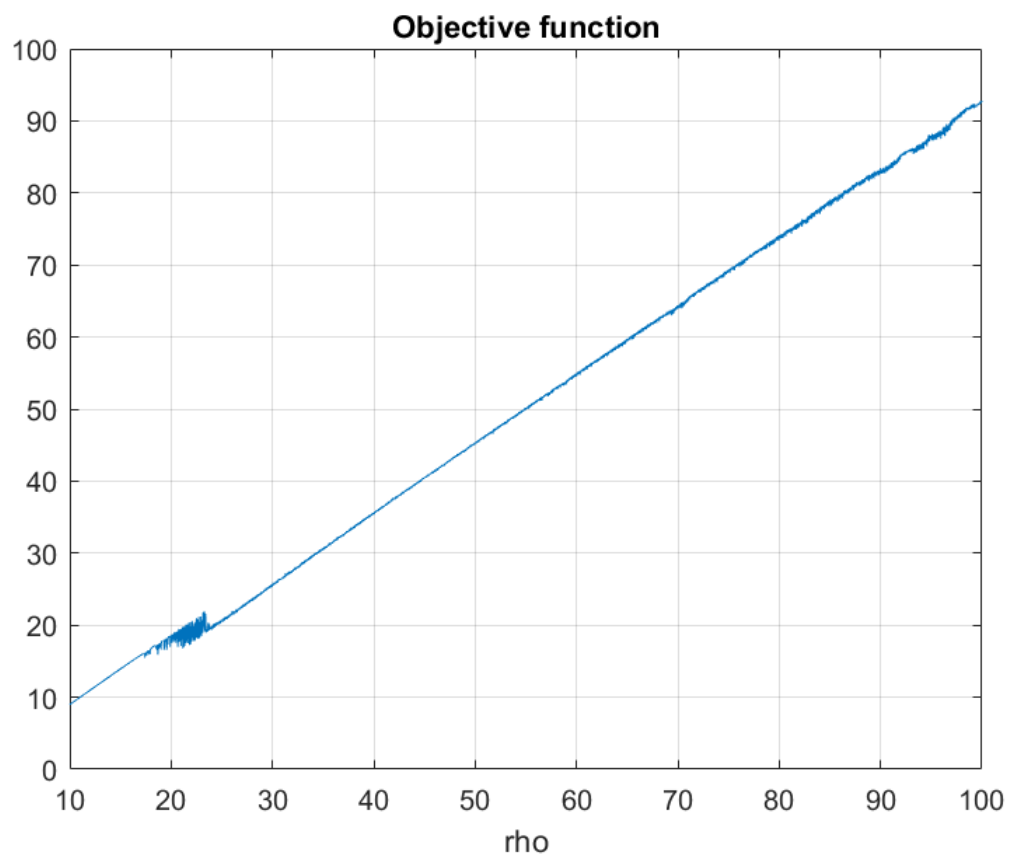


Rysunek 8: Wrażliwość funkcji celu wyznaczona metodą zaburzenia zespolonego

Tak wyznaczona czułość jest praktycznie nieprzydatna. Jednym ze sposobów 'wygładzenia' trendu zmian funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej jest zwiększenie okresu uśredniania (słuszność tego podejścia sugeruje założenie ergodyczności). Na Rysunkach oraz przedstawiono rozpatrywaną funkcję w przypadkach $T = 50$ oraz $T = 100$.

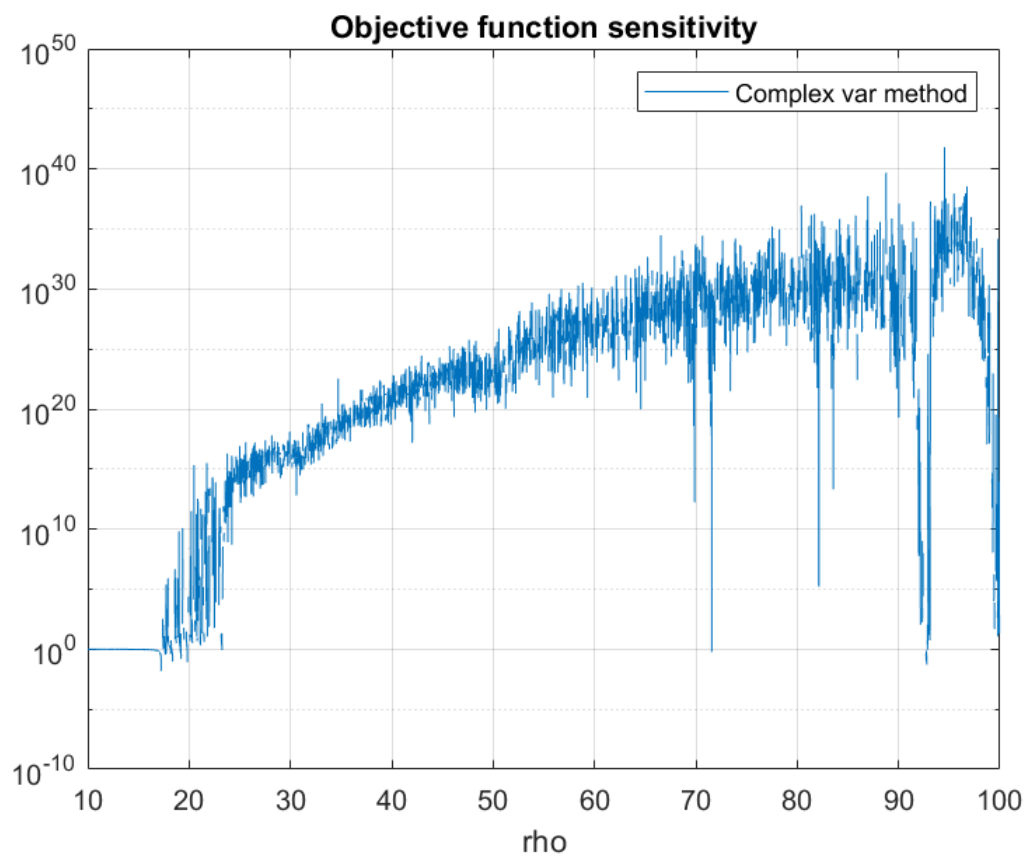


Rysunek 9: Zmienność funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej ($T = 50$)

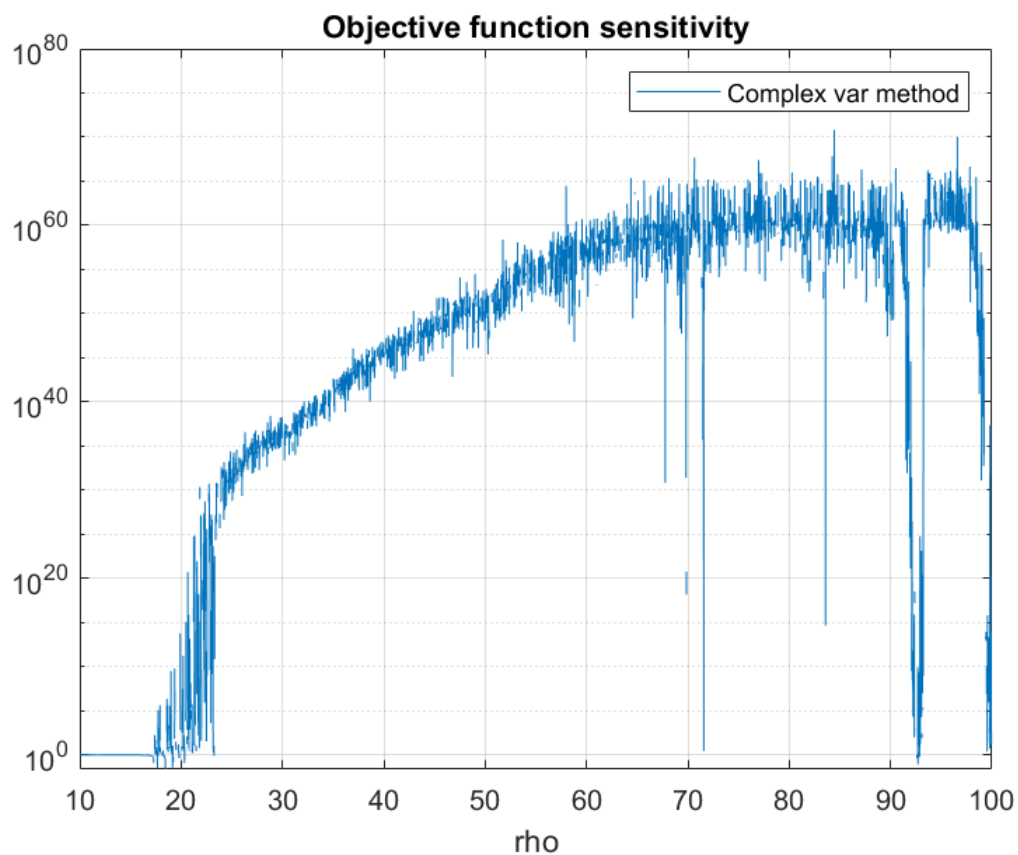


Rysunek 10: Zmienność funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej ($T = 100$)

Zgodnie z oczekiwaniami amplituda fluktuacji maleje, jednak ich obecność nie została wyeliminowana, co w istotny sposób rzutuje na wyznaczanie poszukiwanego gradientu (Rysunki i).

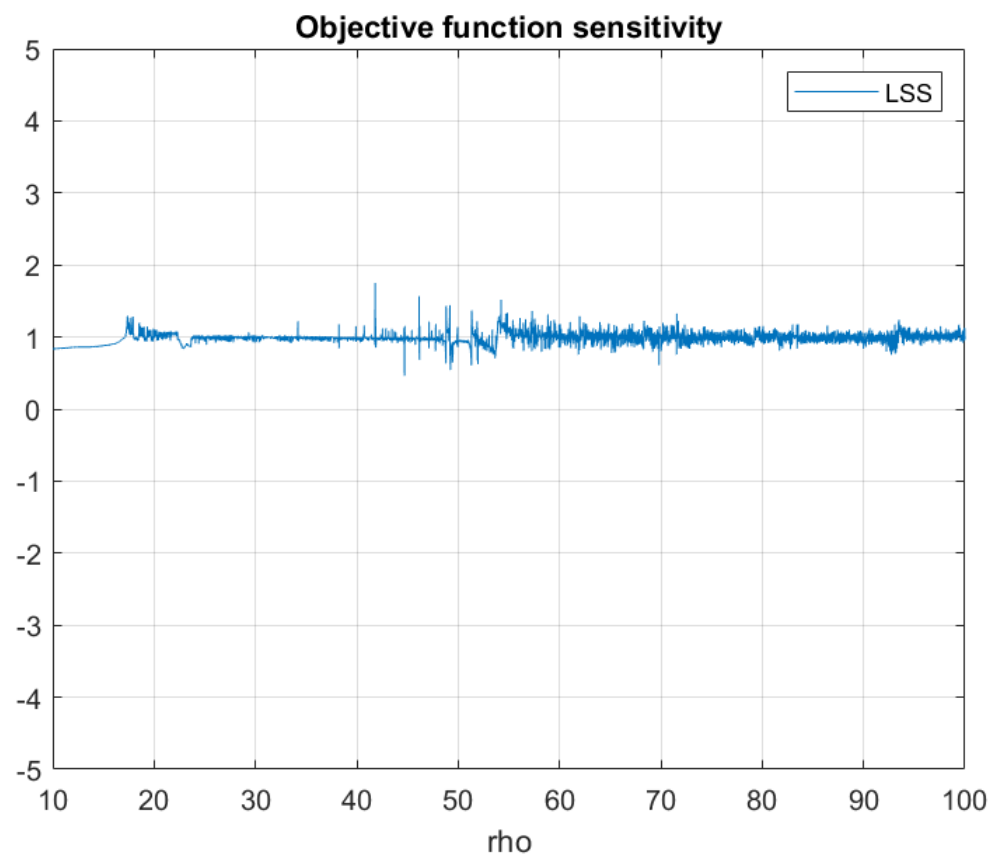


Rysunek 11: Zmienność funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej ($T = 50$)

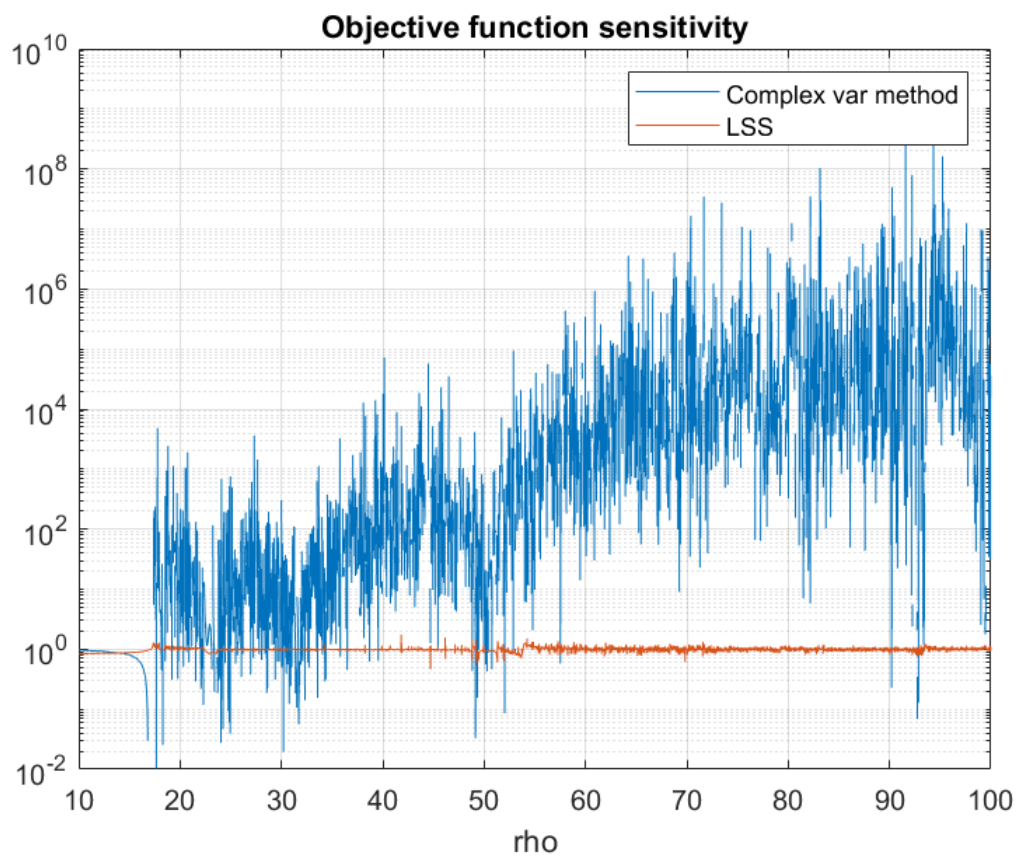


Rysunek 12: Zmienność funkcji celu w zależności od zmiennej decyzyjnej ($T = 100$)

Metoda trajektorii cienia została wykorzystana do wyznaczenia wrażliwości funkcji celu (przy użyciu operatora sprzężonego) dla pierwszego przypadku ($T = 10$). Wynik ilustruje Rysunek , zaś Rysunek pokazuje porównanie obu metod.

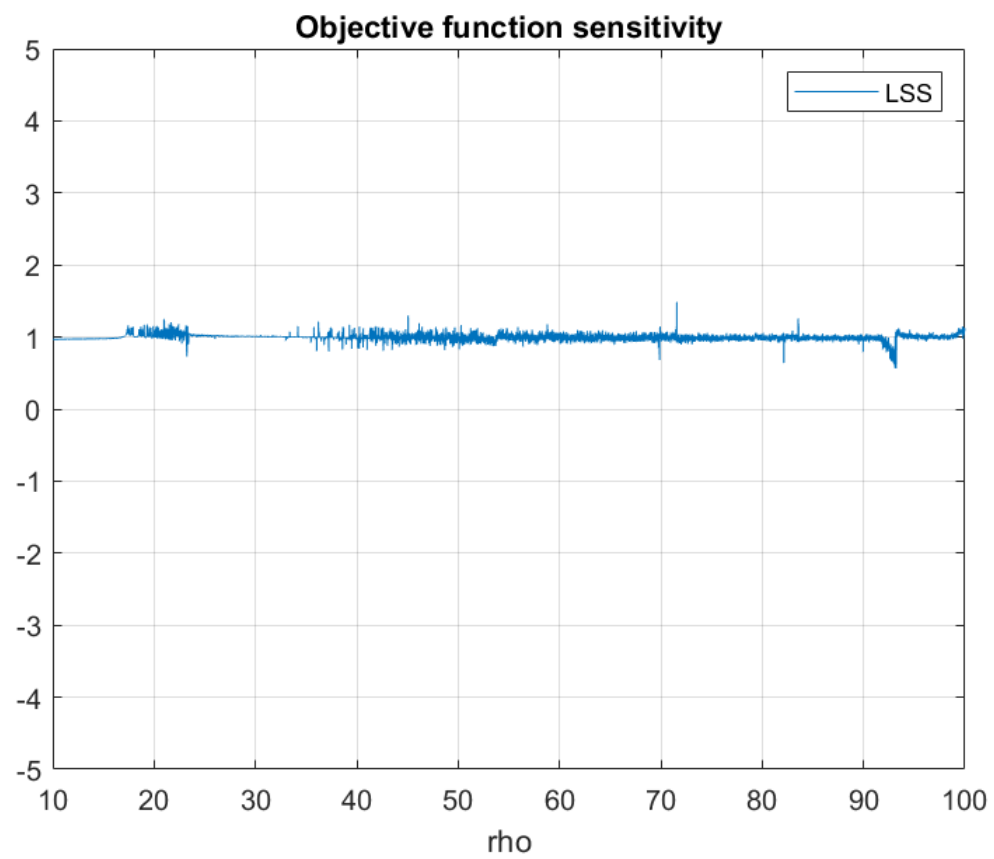


Rysunek 13: Czulość funkcji celu wyznaczona metodą trajektorii cienia.)

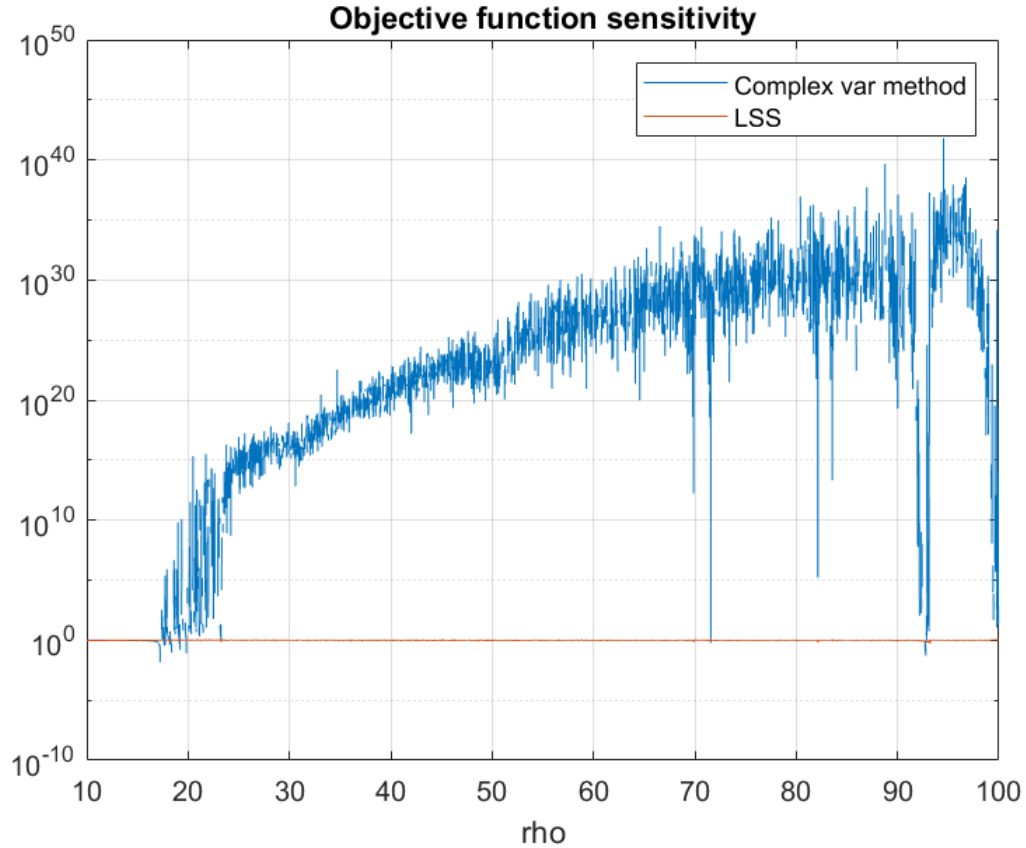


Rysunek 14: Porównanie obu metod

Podobna analiza została wykonana dla drugiego przypadku ($T = 50$), a jej wyniki przedstawiają Rysunki oraz .



Rysunek 15: Czułość funkcji celu wyznaczona metodą trajektorii cienia.)



Rysunek 16: Porównanie obu metod

5.2 Scenariusz II - oblicze chaosu

5.2.1 Słowo wstępne

Jak zostało zaznaczone na wstępie, głównym celem niniejszej pracy jest analiza wrażliwości wybranej funkcji celu dla zagadnienia przepływowego modelowanego równaniem Boltzmanna. Konkretniej: chcemy zastosować Metodę Trajektorii Cienia do zagadnienia rozwiązywanego Metodą Siatek Boltzmanna (ang. *Lattice Boltzmann Method*). Istnieje cały szereg zalet nautyry numerycznej, które pokrótce zostaną przedstawione w następnym podrozdziale. Jednak już w tym momencie należy wmienić obszary praktycznych zastosowań, które wykorzystują wspomnianą metodę. Są to między innymi: W poprzednim rozdziale została przedstawiona metoda LSS w sposób generyczny. Obecnie należy dopasować jej schemat w celu regularyzacji równań opisujących dynamikę rozważanego przepływu. W momencie pisania tej pracy autor nie spotkał się z żadną istniejącą implementacją tej metody dla zdyskretyzowanych równań Boltzmanna - znane są jedynie aplikacje dla solverów bazujących na równaniach Naviera-Stokesa. Należy przy tym dodatkowo zaznaczyć, że wszystkie one oparte są o przechowywanie powstałej macierzy układu równań w pamięci. W dalszej części pracy ukazane zostaną wady takiego podejścia (w szczególności, zajętość pamięci operacyjnej w takich przypadkach całkowicie niweluje, zdaniem autora,

jakiegokolwiek szanse na ich użycie w praktycznych zastosowaniach - nawet dla układów dwuwymiarowych korzystających z modeli turbulencji klasy RANS). Praca owa skupia się na podejściu, w którym macierz układu trajktuje się w sposób 'abstrakcyjny' - jako funktor, którego argumentami są wektory wejściowe, zaś wyjście stanowi iloczyn macierzy i wektorów wejściowych. Do opisu implementacji Metody Trajektorii Cienia konieczna jest znajomość równań wykorzystywanych w Metodzie Siatek Boltzmanna, dlatego też w dalszej części pracy skrótowo opisane zostały podstawowe jej założenia i płynące z nich wnioski w postaci gotowych formuł. Następnie zaprezentowane zostały wyniki obliczeń dla przykładowego zagadnienia, w którym następuje oderwanie strugi na skutek skokowej zmiany geometrii. Zbadana zostanie przy tym czułość średniego spadku ciśnienia w długim horyzoncie czasowym w stosunku do modułu prędkości zadanej na wlocie do obszaru obliczeniowego.

5.2.2 Metoda Siatek Boltzmanna

Jak już zostało nieformalnie wspomniane (przy okazji omawiania pojęcia ergodyczności) w mechanice statystycznej definiuje się rozkład prawdopodobieństwa związany z nazwiskami Boltzmanna oraz Maxwella. Ma on następującą postać Podstawowym założeniem prowadzącym do takiej dystrybucji prędkości wśród cząstek jest przyjęcie modelu gazu doskonałego oraz założenie równowagi termodynamicznej między układem jego otoczeniem. Należy zwrócić uwagę na znaczenie tego rozkładu - jest to gęstość prawdopodobieństwa stanowiąca miarę liczności cząstek w danym zakresie prędkości. Jak każda funkcja gęstości prawdopodobieństwa jest ona równa prawie wszędzie pochodnej dystrybucyjnej związanej z tym rozkładem. Wobec tego, na poziomie intuicji, można taką funkcję utożsamiać ze stosunkiem liczby cząstek mających ograniczony zakres przyjmowanych prędkości w stosunku do całkowitej ich liczby. Zauważmy, że podejście to nie opisuje każdej cząstki jako oddzielnego składnika złożonego systemu (podejście mikroskopowe). Jednakże jest ono również odmienne od dobrze znanego z obecnie najpopularniejszych metod modelowania komputerowego przepływów uśredniania w relatywnie niewielkiej (w sensie rozciągłości przestrzennej) parametrów statystycznie istotnej liczby cząstek, z którego generowane są pola parametrów makroskopowych takich jak ciśnienie, temperatura czy prędkość (podejście to bazuje na założeniu ciągłości badanego ośrodka i nazywane jest podejściem makroskopowym). Głównym zamysłem Metody Siatek Boltzmanna jest symulowanie ewolucji w czasie analogicznego rozkładu (niekoniecznie dla stanów równowagowych).

5.2.3 Model matematyczny

W przyjętym modelu D2Q9 metody siatek Boltzmanna proces kolizji ma następującą postać:

$$f_i(x + \Delta x, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau_f} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] + \Delta f_i(x, t). \quad (34)$$

Przyjmujemy, że $f_i(x, t)$ oznacza funkcję rozkładu cząstek dla i -tej prędkości w punkcie x w chwili t . Parametry siatki oznaczamy przez Δx oraz Δt , zaś τ_f jest charakterystycznym czasem relaksacji. Jeśli pozostawimy układ bez wpływu czynników zewnętrznych, będzie

on dążył do stanu równowagi, dla której równowagowa funkcja gęstości rozkładu f^{eq} , która ma postać:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2 - (c_s |u|)^2}{2c_s^2} \right], \quad (35)$$

gdzie $w_0 = \frac{4}{9}$, $w_{1,2,3,4} = \frac{1}{9}$, $w_{5,6,7,8} = \frac{1}{36}$, $c_s = \sqrt{3}c$, gdzie $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, przy czym c_s interpretujemy jako prędkość dźwięku w płynie. Prędkość u wyraża się wzorem:

$$u = \sum_{i=0}^8 f_i e_i, \quad (36)$$

gdzie prędkości w kierunku i są postaci:

$$e_i = \begin{cases} (0, 0)c & \text{gdy } i = 0 \\ (\cos[(i-1)\frac{\pi}{2}], \sin[(i-1)\frac{\pi}{2}])c & \text{gdy } i = 1, 2, 3, 4 \\ (\sqrt{2}\cos[(2i-9)\frac{\pi}{4}], \sqrt{2}\sin[(2i-9)\frac{\pi}{4}])c & \text{gdy } i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (37)$$

Gęstość w punkcie x w chwili t jest postaci:

$$\rho(x, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(x, t). \quad (38)$$

Gdy na cząsteczki działa zewnętrzna siła F , to makroskopowa prędkość płynu wyraża się następująco:

$$U(x, t) = u(x, t) + \frac{1}{2} \frac{F(x, t)}{\rho(x, t)}. \quad (39)$$

Literatura

- [1] Blonigan P. J., Wang Q., *Probability density adjoint for sensitivity analysis of the mean chaos*, Journal of Computational Physics, 235 (2014) 1-13.
- [2] Blonigan P. J., Wang Q., Nielsen E. J., Diskin B., *Least Squares Shadowing sensitivity analysis of chaotic flow around a tw-dimensional airfoil*, in: 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting, January 2016, pp. 1-28.
- [3] Blonigan P. J., Wang Q., *Least Squares Shadowing sensitivity analysis of a modified Kuramoto-Sivashinsky equation*, Chaos Solitons Fractals, 64, 2014, 16-25.
- [4] Chandramoorthy, N., Fernandez, P., Talnikar, C., Wang, Q. 2017 *An Analysis of the Ensemble Adjoint Approach to Sensitivity Analysis in Chaotic Systems* AIAA Paper 2017-3799.
- [5] Evans L.C., *Równania różniczkowe cząstkowe*, Wydawnictwo: PWN, Warszawa 2012.
- [6] Gleick J., *Chaos. Narodziny nowej nauki.*, Wydawnictwo: Zysk i S-ka, 2018.
- [7] Golub G. H., Loan C. V. F., *Matrix Computations*, The Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore, 1996.
- [8] Lea D., Allen M., Haine T., *Sensitivity analysis of the climate of a chaotic system*, Tellus, Vol. 52A, 2000, pp. 523-532.
- [9] Lea D., Haine T., Allen M., Hansen J., *Sensitivity analysis of the climate of a chaotic ocean circulation model*, Journal of the Royal Meteorological Society, Vol. 128, 2002, pp. 2587-2605.
- [10] Lorenz E., *Deterministic Nonperiodic Flow*, Journal of Atmospheric Sciences, Vol. 20, 1963, pp. 130-141.
- [11] Maurin K., *Analiza, część I*, Wydawnictwo: PWN, Warszawa 2010.
- [12] Maurin K., *Analiza, część II*, Wydawnictwo: PWN, Warszawa 2010.
- [13] Maurin K., *Analiza, część III*, Wydawnictwo: PWN, Warszawa 2010.
- [14] Palczewski A., *Równania różniczkowe zwyczajne. Teoria i metody numeryczne z wykorzystaniem programu rachunków symbolicznych*, Wydawnictwo: WNT, Warszawa 2017.
- [15] Ruelle D., *Differentiation of SRB states*, Communications in Mathematical Physics, Vol. 187, 1997, pp. 227-241.
- [16] Strogatz S., *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*, Westview Press, Philadelphia, PA, 1994.
- [17] Tempczyk M., *Teoria chaosu dla odważnych*, Wydawnictwo: PWN, Warszawa 2002.

- [18] Wang Q., *Forward and adjoint sensitivity computation of chaotic dynamical systems*, Journal of Computational Physics, 235 (2013) 1-13.
- [19] Wang Q., *Convergence of the Least Squares Shadowing Method for Computing Derivative of Ergodic Averages*, SIAM Journal of Numerical Analysis, Vol 52, No. 1, 2014, pp. 156-170.
- [20] Wang Q., *Least Squares Shadowing sensitivity analysis of chaotic limit cycle oscillations*, Journal of Computational Physics, Vol. 267, June 2014, pp. 210-224.