

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECATRÔNICA



***Análise e Otimização Aerodinâmica
Utilizando o Método Adjunto***

Carlos Augusto Constantino

**São Paulo
2006**

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECATRÔNICA

note final 8.5
(oito e cinco)

**Análise e Otimização Aerodinâmica
Utilizando o Método Adjunto**

Trabalho de formatura apresentado à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para Obtenção do título de Graduação em
Engenharia.

Carlos Augusto Constantino

Orientador: Prof. Dr. Ernani Vitillo Volpe

**Área de Concentração:
Engenharia Mecatrônica**

São Paulo

2006

TF.06
E766a

DEDALUS - Acervo - EPMN



31600012463

FICHA CATALOGRÁFICA

1574430

Constantino, Carlos Augusto
Análise e otimização aerodinâmica utilizando o método ad-junto / C.A. Constantino. – São Paulo, 2006.
p.

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos.

1. Escoamento (Simulação) 2. Cálculo de variações
3. Foguetes
4. Aerodinâmica (Otimização) I. Universidade de São Paulo.
Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos II.t.

RESUMO

Recentes desenvolvimentos em projeto inverso e em métodos de otimização abriram novas possibilidades para a indústria aeroespacial. A combinação destes métodos com códigos de CFD possui um enorme impacto em todo o processo de desenvolvimento, permitindo reduções nos custos computacionais, assim como na duração dos ciclos de desenvolvimento.

Dentro destes, o método adjunto é freqüentemente considerado como a mais promissora abordagem para o problema, ao reduzir dramaticamente o custo computacional da avaliação dos gradientes. Este permite a total flexibilidade a respeito do modelo de física do escoamento, e serve para ambos os propósitos: otimização e projeto inverso.

O objetivo deste trabalho é explorar a fundamentação teórica do método adjunto, para tanto, fazemos uso de um problema simples, porém de grande interesse tecnológico. Ele consiste em obter a superfície de um bocal de empuxo que satisfaça a distribuição objetivo de uma variável de estado escolhida – no caso, a pressão. Para o estudo foi utilizado o método quasi-1D de escoamento compressível.

ABSTRACT

Recent developments in inverse design and optimization methods have opened up new possibilities for the aerospace industry. The combination of these methods with CFD codes has an enormous impact in the whole design process. It allows great reductions in computational costs, as well as in the time span of the design cycles.

Among those, the so-called adjoint method is frequently considered as the most promising approach to the problem. For it dramatically reduces the costs of computing sensitivity gradients, it allows total flexibility with respect to the flow physics model, and serves both purposes, optimization and inverse design.

The purpose of this work is to explore conceptual foundations of the adjoint method. To that end, the method is used to tackle a simple problem, which is of great interest in rocket design applications. It consists of obtaining the surface of a nozzle that satisfies some desired primitive state variables distribution – this case, the pressure. Under the quasi-1D compressible flow assumption.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	8
1.1. MOTIVAÇÃO	9
1.2. OBJETIVO	10
2. MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO	12
2.1. Conceitos Básicos	12
2.1.1. Variáveis de Projeto	12
2.1.2. Função Objetivo	14
2.1.3. Restrições de Projeto	14
2.2. Métodos Analíticos	15
2.2.1. Cálculo Diferencial	15
2.2.2. Multiplicadores de Lagrange	16
2.2.3. Cálculo Variacional	18
2.3. Métodos Numéricos	19
2.3.1. Programação Linear	19
2.3.2. Programação Não-Linear	19
2.4. Cálculo do Gradiente	23
2.4.1. Diferenças Finitas	23
2.4.2. Métodos Analíticos	24
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	25
3.1. Equacionamento da Física do Modelo	25
3.2. Cálculo Variacional da Função Objetivo	25
3.3. Cálculo da Equação Adjunta	28
3.4. Cálculo das Condições de Contorno	28
4. COMPONENTES DO PROJETO	32
4.1. Solver de CFD	32
4.2. O método adjunto	32
4.3. Validação dos Resultados	34
5. ANÁLISE DOS RESULTADOS	35
5.1. Caso bocal cônico	35
5.2. Caso bocal convergente-divergente	39
6. CONCLUSÃO	45
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	47

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1 : Geometria do bocal de empuxo	13
Fig. 2 : Exemplo de função com ponto de sela	16
Fig. 3 : Exemplo do caminho percorrido através do método de Powell	20
Fig. 4 : Exemplo do caminho percorrido através do método “Steepest Descent”.....	21
Fig. 5 : Exemplo do caminho percorrido através do método “Fletcher-Reeves”.....	22
Fig. 6 : (a) Perfil do bocal; (b)Velocidades características do escoamento;.....	29
(c) velocidades características da equação adjunta.....	29
Fig. 7 : Caminho percorrido pela solução convergida do método	35
Fig. 8 : Histórico da geometria do bocal cônico	36
Fig. 9 : Resultado da Pressão para o bocal cônico.....	37
Fig. 10 : Evolução do Módulo do Gradiente para o bocal cônico	38
Fig. 11 : Rotina final de otimização	39
Fig. 12 : Exemplo de Bocal Convergente-Divergente	39
Fig. 13 : Possíveis resultados de pressão	40
Fig. 14 : Evolução da geometria para caso convergente-divergente	41
Fig. 15 : Evolução do perfil de pressões obtidos caso convergente-divergente	42
Fig. 16 : Evolução do módulo do gradiente para o bocal convergente-divergente	43
Fig. 17 : Superfície da função objetivo para um caso de geometria parabólica	44

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 : Condições de Contorno	31
--	----

1. INTRODUÇÃO

O presente trabalho visa desenvolver uma rotina de otimização de superfícies aerodinâmicas utilizando o método adjunto. Para tal foi utilizado como caso de estudo a geometria do bocal de empuxo de um foguete de sinalização.

O foguete de sinalização fora estudado como escopo de vários projetos de formatura na universidade nos últimos anos, dentre estes trabalhos destaca-se o apresentado por Fabiani [1], o qual trata de simulações do escoamento no bocal de empuxo do foguete, estudando e desenvolvendo um código de simulação do fluxo interno a partir do modelo Quasi-1D Euler [2].

Neste trabalho foi validado o código para o bocal do foguete por meio da comparação dos resultados obtidos e simulações de geometrias completas em softwares comerciais de CFD¹. Concluiu-se que o método, embora simplificado, retrata com fidelidade os efeitos observados em um sistema completo, incluindo a possibilidade de ondas de choque no escoamento.

Ramalho [7] produziu outro trabalho sobre foguetes com o objetivo de otimizar sua geometria externa e do bocal de empuxo, utilizando para isso análises realizadas em softwares comerciais de CFD. Neste as modificações das geometrias propostas se basearam unicamente na análise dos resultados das simulações. Portanto sem recorrer a métodos de otimização propriamente ditos.

Em um trabalho anterior, Telles [8] simulou a câmara de combustão e analisou suas características físicas, a fim de projetar um foguete com a melhor relação entre capacidade de alcance e peso. Para tal foi estudado o tipo de combustível a ser utilizado pelo foguete.

Tomando como base os trabalhos acima referidos, este projeto possui o intuito de completar o estudo de foguetes através da otimização de seu bocal de empuxo, utilizando para isso o método adjunto.

Para este modelo desenvolveu-se uma função objetivo, a qual se deve minimizar através de alterações nas variáveis de projeto definidas como sendo

¹ Sigla em inglês para Computational Fluid Dynamics

aquelas que configuram a geometria do bocal de empuxo.

O ponto crucial do projeto é avaliar a sensibilidade da função objetivo para variações nos parâmetros de controle. Pelo método clássico de cálculo do gradiente, deve-se reavaliar o modelo à medida que são realizadas alterações nas variáveis de projeto.

Pelo método de diferenças finitas, a análise do gradiente implica em perturbar cada variável isoladamente e avaliar as correspondentes mudanças do escoamento. A principal dificuldade deste método é que normalmente este envolve simulações complexas do escoamento para cada perturbação nas variáveis e, à medida que o número de variáveis cresce, o custo computacional torna-se inviável.

A teoria de controle oferece uma alternativa para tal problema. Utilizando-se de conceitos da teoria de controle, o método permite obter uma série de equações diferenciais adjuntas, cujas soluções determinam o gradiente desejado de forma muito mais eficiente e com um custo computacional relativamente baixo, indiferente ao aumento do número de variáveis.

Neste cenário, o método adjunto é proposto como uma ferramenta de otimização de perfis aerodinâmicos. Dada uma geometria inicial e determinadas condições de contorno para o escoamento, pode-se modificar o perfil de forma a atingir, por exemplo, uma distribuição de pressão objetivo definida a partir de fundamentos teóricos ou experimentais.

1.1. MOTIVAÇÃO

As aplicações dos métodos de otimização na engenharia são ilimitadas e seus resultados oferecem uma perspectiva única de crescimento na indústria. Para ilustrar a importância do método de otimização pode-se citar um exemplo de engenharia estrutural, Silva [10].

Neste modelo deseja-se maximizar a rigidez de uma asa de avião. Desta forma, definem-se 10 propriedades estruturais que poderão assumir 10 diferentes valores estipulados devido às restrições de fabricação. Para a simulação da estrutura da asa, é utilizado um software de elementos finitos (MEF).

Pela abordagem clássica de análise dos resultados é necessário rodar todas as combinações possíveis entre os 10 parâmetros de controle e seus respectivos valores. Para cada combinação é realizado o cálculo do valor correspondente da rigidez da asa. Após todos os cálculos são construídos gráficos que permitirão a tomada de decisão para a combinação ótima de valores.

No entanto, para esta abordagem são necessárias 10^{10} avaliações, e para cada avaliação é necessário obter uma convergência pelo software de MEF, considerando um tempo de execução médio de cada análise de 10s, seriam necessários 10^{10} s para finalizar o método, ou seja, 3200 anos.

É importante acrescentar que se a análise acima fosse uma otimização aerodinâmica da mesma asa em condições semelhantes, o número de variações seria, grosso modo, semelhante. Entretanto, o tempo necessário para cada simulação do escoamento seria algo em torno de 10 horas², o que implicaria em um tempo total de análise de 10^{10} hrs, ou algo próximo de um milhão de anos.

Portanto, fica claro a importância de um estudo aprofundado nos métodos de otimização, uma vez que sua abordagem pode significar um grande custo de análise, e o método adjunto foi desenvolvido para minimizar este custo, oferecendo uma abordagem racional de busca da melhor solução.

1.2. OBJETIVO

O objetivo do projeto é otimizar um bocal de empuxo de um foguete baseado nas dimensões daqueles obtidos no mercado como sinalizadores, para tal será necessário construir uma rotina de otimização, onde se utilizará o método adjunto para o cálculo dos gradientes da função objetivo.

O modelo de estudo será simplificado por uma parábola a fim de facilitar sua implementação na rotina. O código original desenvolvido por Fabiani [1] e aperfeiçoado por nós, utiliza o modelo quasi-1D Euler, o qual se mostrou eficaz para fluxos internos em geometrias de simetria axial, será utilizado para o cálculo do escoamento no bocal de empuxo.

² Foi utilizado como exemplo as simulações Euler compressíveis do Projeto EMBRAER (A3) [12]

Para estudar o modelo proposto considerar-se-á uma função regida pela distribuição de pressões do bocal, onde se pretende encontrar uma geometria que forneça uma distribuição igual aquela definida pelo usuário.

A implementação do método adjunto na rotina de otimização visa a possibilidade de trabalhar com modelos envolvendo ondas de choque, além de ser capaz de modificar a posição da onda ou, até mesmo, expulsá-la do sistema, melhorando assim as condições de operação do foguete.

De posse da rotina construída podem-se considerar futuras aplicações de otimização como, por exemplo: a minimização do arrasto produzido, a maximização da função empuxo ou da relação entre estas. Além das possíveis aplicações no bocal do foguete, o método também permite o início do estudo de sua aplicação no escoamento externo do foguete, bem como em aplicações mais complexas, o perfil da asa de um avião, ou até mesmo em toda a fuselagem deste.

2. MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

A história da otimização iniciou-se no final do séc. XIX com trabalhos realizados na otimização estrutural, dentre estes destaca-se o realizado por Michell em 1904, que consistia essencialmente no cálculo das linhas principais de tensões em um domínio infinito que está sujeito a restrições de deslocamento e a uma força aplicada em um ponto. [10]

Seus resultados fornecem bases de estudo, até hoje, em análises de otimização topológica de estruturas. Porém, após os trabalhos de Michell, não houve avanço significativo neste assunto até a década de 60, onde o surgimento dos computadores viabilizou o início de estudos e aplicações de métodos de otimização utilizando-se métodos para solução de sistemas lineares. Na década de 70, deu-se o primeiro passo para o desenvolvimento e implementação de otimização em problemas não-lineares que são os mais utilizados atualmente na indústria. [10]

2.1. Conceitos Básicos

2.1.1. Variáveis de Projeto

As variáveis de projeto são basicamente os parâmetros de controle do sistema, os quais podem ser modificados, a fim de se obter o resultado esperado.

Um exemplo de variáveis de projetos são aquelas utilizadas neste trabalho. Para a otimização da superfície aerodinâmica a rotina irá alterar a geometria do bocal. No modelo simplificado de estudo este foi aproximado por uma parábola. Existem três parâmetros que definem uma parábola, os coeficientes a, b e c. Portanto as variáveis de projeto definidas neste trabalho são tais coeficientes.

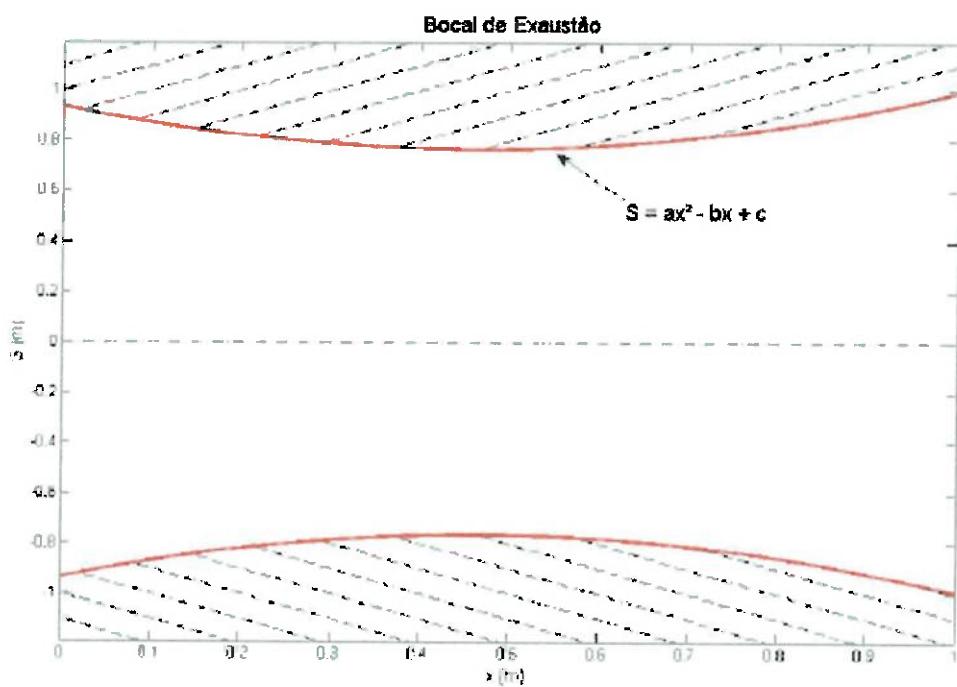


Fig. 1 : Geometria do bocal de empuxo

As variáveis de projeto podem ser classificadas em dois tipos: variáveis contínuas e discretas. As contínuas são aquelas que podem assumir qualquer valor em um dado intervalo, já as discretas são aquelas que não abrangem todos os possíveis valores, suas características devem ser definidas pelo usuário.

Dentro das variáveis contínuas existem outros dois grupos, as que definem um sistema mecânico contínuo e um discreto. Um sistema contínuo é aquele que pode ser representado por uma função contínua através da variação de seus parâmetros. O sistema discreto é aquele que reúne uma função discreta, como no exemplo de otimização de uma estrutura de treliças, onde cada elemento possui um valor único da variável do projeto. É possível, também, classificar um sistema onde existam as duas características, tal sistema é chamado de contínuo tratado como discreto. Um exemplo seria o de uma viga seccionada em n partes onde cada parte possui uma avaliação separada de sua função área.

2.1.2. Função Objetivo

A função objetivo é aquela que o método de otimização deverá se preocupar em minimizar ou maximizar, dependendo da intenção do projetista. A função objetivo deve ser regida pelas variáveis de projeto e deve ser escolhida de forma eficiente para o projeto. Sua classificação pode ser simples ou multiobjetivo e está relacionada ao número de funções que devem ser otimizadas.

Ressalta-se a importância do cuidado que se deve tomar para definir a função objetivo, como também a sua importância imediata, pois é esta que vai definir qual a solução pretendida. Porém é importante analisá-la com cuidado, pois muitas vezes sua definição pode não ser facilmente encontrada. Um bom exemplo deste problema é posto por Silva [10] onde considera-se o caso de quantificar a dirigibilidade de um automóvel. Por ser um conceito relativo à sua aplicação, o problema de otimizar o projeto do automóvel deve considerar se está sendo voltado a um piloto de fórmula 1 ou a um iniciante no aprendizado da direção, logo um problema aparentemente simples pode se tornar complexo quando analisado por completo.

2.1.3. Restrições de Projeto

As restrições são responsáveis por limitar o campo de atuação das variáveis de controle. As restrições podem ser caracterizadas por 3 tipos:

- Laterais $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$
- Igualdade $h(x) = 0$
- Desigualdade $g(x) \geq 0$

As restrições, embora muito importantes, devem ser reduzidas ao menor número possível, pois encarecem o custo computacional consideravelmente. Estas são classificadas em dois tipos: locais e globais. Restrições locais são aquelas definidas para um ponto do sistema, por exemplo, poderia-se restringir a abertura do bocal de empuxo, ou seja, definir uma restrição aplicada somente para o valor de c na posição onde $x = 0,0$.

Restrições globais são aquelas definidas para todos os pontos do domínio, no mesmo exemplo poder-se-ia construir uma restrição da derivada do bocal, por exemplo, $g(x) = 2ax + b \geq 0$.

2.2. Métodos Analíticos

2.2.1. Cálculo Diferencial

O método por cálculo diferencial consiste em diferenciar a função objetivo e encontrar o valor da equação obtida igualada a zero, ou seja:

$$\text{Min } f(x) \Rightarrow \frac{\partial f(x)}{\partial x} = 0 \quad \text{Max } f(x) \Rightarrow \frac{\partial f(x)}{\partial x} = 0$$

Porém, não basta encontrar o resultado da igualdade para afirmar a resposta do sistema, pois apenas com esta equação não é possível saber se o ponto é um mínimo ou máximo.

Para isto é necessário calcular a segunda derivada da função e através de seu resultado é possível inferir a resposta.

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} > 0 \Rightarrow \text{mínimo} \quad \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} < 0 \Rightarrow \text{máximo}$$

No caso onde existe mais de uma variável de controle, é necessário calcular o gradiente e iguala-lo a zero, além disto, também é necessário calcular uma matriz formada pelas segundas derivadas, também conhecida como a matriz Hessiana ilustrada a seguir:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

A análise de ponto de mínimo e máximo, neste caso, é definida da seguinte forma: se a matriz H for positiva-definida é um ponto de mínimo, caso for uma matriz negativa-definida, o ponto encontrado é de máximo.

Um dos métodos para determinar se a matriz é positiva-definida ou negativa-definida é encontrando seus autovalores, caso todos sejam positivos, pode-se afirmar que H é positiva-definida, caso sejam todos negativos, H é negativa-definida. Também, é possível obter um caso onde os autovalores são positivos e negativos. Neste caso H é considerada indefinida, ou seja, o ponto não é mínimo nem máximo, e sim, um ponto de sela, onde, dependendo da direção considerada, o ponto pode ser um máximo ou um mínimo relativo. A figura 2 abaixo ilustra a situação de um ponto de sela.

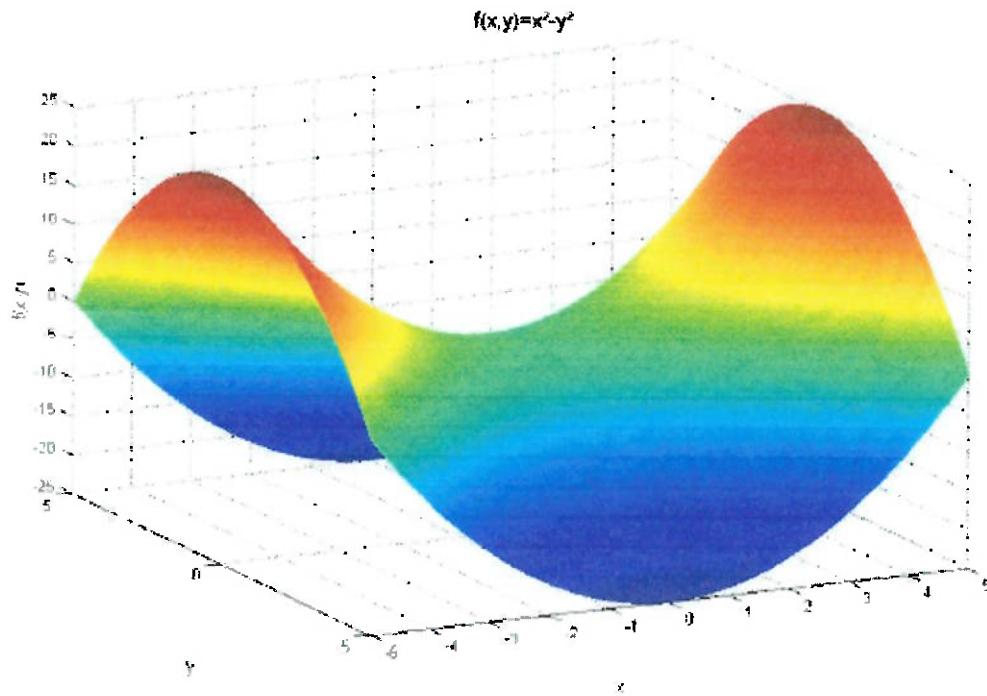


Fig. 2 : Exemplo de função com ponto de sela

2.2.2. Multiplicadores de Lagrange

O método de multiplicadores de Lagrange é muito utilizado em modelos com mais de duas variáveis e que possuam restrições. Sua idéia é inserir as restrições no cálculo da função objetivo. Para exemplificar considera-se um problema com n variáveis de controle com uma restrição de igualdade $h(x)$, tem-se que:

$$h(x) = 0 \Rightarrow dh = \frac{\partial h}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial h}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial h}{\partial x_n} dx_n = 0$$

Multiplicando-se esta equação por uma variável λ e somando-a a df , obtém-se:

$$df + \lambda \cdot dh = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_1} \right) dx_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_2} \right) dx_2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_n} \right) dx_n = 0$$

Portanto, têm-se um conjunto de $n+1$ equações para $n+1$ incógnitas:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_1} \right) dx_1 = 0$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_2} \right) dx_2 = 0$$

⋮

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_n} + \lambda \cdot \frac{\partial h}{\partial x_n} \right) dx_n = 0$$

$$h(x) = 0$$

Logo o modelo de otimização foi modificado para um equivalente sem restrições, onde a equação extra corresponde à própria restrição.

$$\begin{array}{l} \text{Min } f(x) \\ \text{sendo : } h(x) = 0 \end{array} \Rightarrow \text{Min } f(x) + \lambda \cdot h(x)$$

A nova equação encontrada é chamada de Lagrangeano do problema de otimização, e a variável λ de Multiplicador de Lagrange. Para um caso de estudo com mais de uma restrição, serão necessários outros multiplicadores, um para cada restrição.[10]

2.2.3. Cálculo Variacional

Para encontrar as soluções de modelos de otimização onde a variável de controle é uma função deve-se utilizar o método do cálculo variacional. Devido a restrições de complexidade do sistema, o método não é ilimitado. Porém é bastante utilizado na modelagem de problemas de otimização analítica.

Para entender o método, define-se um funcional (J), tal que:

$$J(y(x)) = \int_a^b F(x, y(x), y'(x)) dx$$
$$y'(x) = \frac{dy(x)}{dx} \quad y(a) = y_a \quad y(b) = y_b$$

A filosofia por trás do método de cálculo variacional é muito bem descrita por Silva [10] "... partindo-se de uma função $y(x)$, altera-se a forma desta função (mas mantendo as extremidades fixas) através da soma de uma função $\epsilon\delta(x)$ ou $\epsilon dy(x)$ até encontrar a função $y^*(x)$ que extremize o funcional...". Portanto, o problema de otimização fica reduzido à variável ϵ .

Facilmente se nota que o valor de ϵ para o ponto de interesse é $\epsilon=0$, e a condição necessária para que tal ocorra é que:

$$J \Big|_{y=y^*} = \frac{dJ(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} = 0$$

Desenvolvendo tal equação, chega-se na equação de Euler-Lagrange descrita abaixo, a qual é recorrente nos problemas de engenharia que descrevem o comportamento dinâmico de sistemas mecânicos.

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0$$

Portanto, um projeto de otimização que se deseja minimizar um funcional a partir de uma função $y(x)$ fica reduzido em avaliar a equação de Euler-Lagrange.

2.3. Métodos Numéricos

2.3.1. Programação Linear

O método de otimização a partir da programação linear é destinado a problemas onde a função objetivo, assim como suas restrições, são funções lineares em relação às variáveis de projeto.

Embora este seja um modelo mais simples de problema de otimização, sua aplicação abrange diversos campos da engenharia, assim como outras áreas de estudo.

A equação abaixo exemplifica um modelo de otimização linear:

$$\begin{aligned} \text{Min } f(x) &= a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n \\ \text{para: } h(x) &= b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n = 0 \\ g(x) &= c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n \geq 0 \end{aligned}$$

Fica claro que o cálculo das derivadas parciais do sistema resulta em valores constantes, o que impossibilita a utilização do método analítico das diferenciais, logo a resposta do sistema dependerá exclusivamente das restrições impostas a ele.

Esta característica pode resultar em alguns problemas, no caso de uma restrição acompanhar a curva de nível da função f , ou no caso das restrições não serem suficientes para determinar um ponto de mínimo.

2.3.2. Programação Não-Linear

A programação não-linear é dividida em duas partes, aquelas com restrições e as sem. Dentro do conjunto de métodos de modelos sem restrição existem outros três segmentos caracterizados pelo grau da derivada da função disponível para o modelo.

O caso onde não existe a informação da derivada da função objetivo é chamado de método de ordem zero. O modelo onde existe a informação do

gradiente chama-se método de primeira ordem. Os métodos de segunda ordem são aqueles onde se pode obter a informação do valor da matriz Hessiana.

a. Otimização sem Restrições

a.i. Métodos de Ordem Zero

• **Direções Conjugadas de Powell**

Neste método a função objetivo é aproximada por uma função quadrática. Embora muitos problemas possuem funções não quadráticas, sabe-se que toda função pode ser aproximada por uma função quadrática na região próxima do mínimo.[10]

Como descrito em Vanderplaats [11] e em Silva [10], o conceito básico do método de Powell é primeiro realizar uma busca unidirecional, ou seja, encontrar o mínimo da função objetivo na direção de cada variável.

Depois de encerrada a busca unidimensional, encontra-se o índice k da direção que apresentou o maior decréscimo na função indo de k para $k-1$. É, então, calculada a direção “padrão” que significa na soma de todas as outras direções.

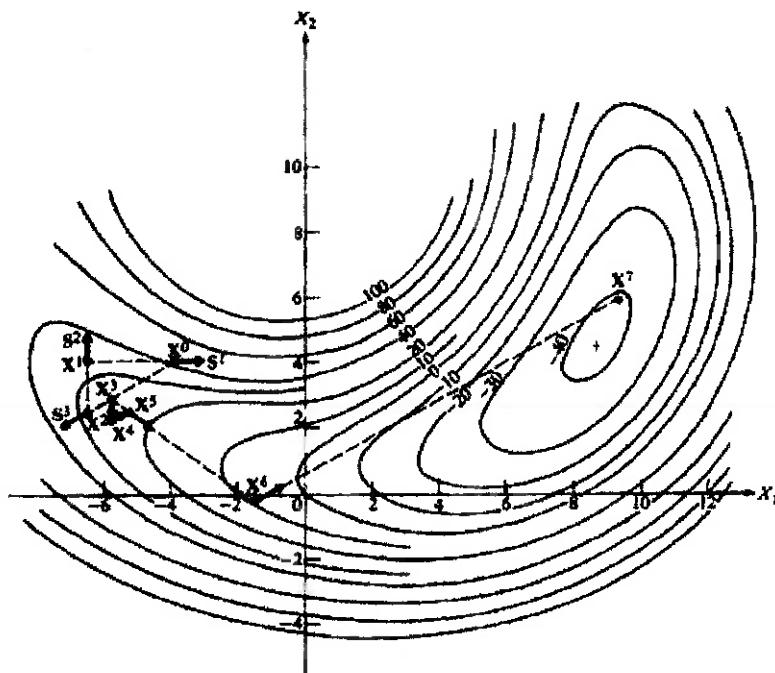


Fig. 3 : Exemplo do caminho percorrido através do método de Powell

a.ii. Métodos de Primeira Ordem

- “Steepest Descent”

Dentre os métodos de primeira ordem, onde é conhecida a informação do gradiente a cada iteração, o método mais simples é o conhecido como “Steepest Descent”.

Neste método a direção de busca definida pelo algoritmo é igual ao gradiente naquele ponto. Uma vez que o gradiente representa a direção de maior crescimento da função. Para os casos de minimização o caminho percorrido é o oposto do gradiente.

Porém, para este método, é necessário avaliar com cuidado a sua aplicação, uma vez que este pode assumir um padrão de decréscimo semelhante ao zig-zag [11], necessitando demuitas iterações para convergir.

A figura a seguir mostra uma aplicação do método em um caso de minimização.

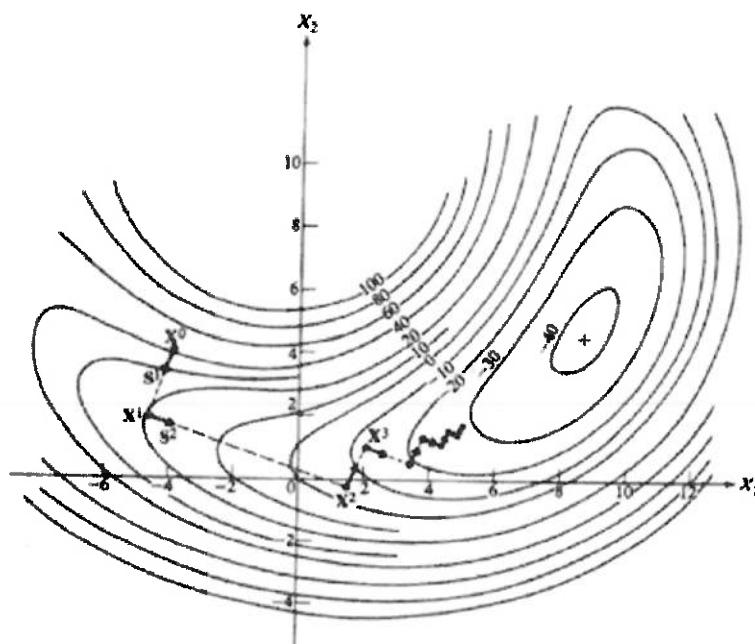


Fig. 4 : Exemplo do caminho percorrido através do método “Steepest Descent”

- **Direções Conjugadas ou “Fletcher-Reeves”**

Este método é semelhante ao “Steepest Descent”, porém ele utiliza a informação da direção de busca anterior, evitando assim um padrão de decréscimo, e encontrando a resposta do sistema de forma mais rápida. É importante ressaltar que para a primeira iteração, onde não há informação anterior, o método se torna igual ao “Steepest Descent”. A equação abaixo mostra o cálculo das direções de busca a partir do método de “Fletcher-Reeves”, onde s_k é a direção na iteração k e g_k é a informação do gradiente na iteração k. [10]

$$s_k = g_k = -\nabla f(x_k) \quad \text{para} \quad k = 0$$

$$s_k = g_k + \beta_k \cdot s_{k-1} \quad \text{Sendo: } \beta_k = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}$$

O método de “Fletcher-Reeves” foi utilizado no algoritmo de otimização desenvolvido neste projeto. A figura a seguir representa um aplicação do método.

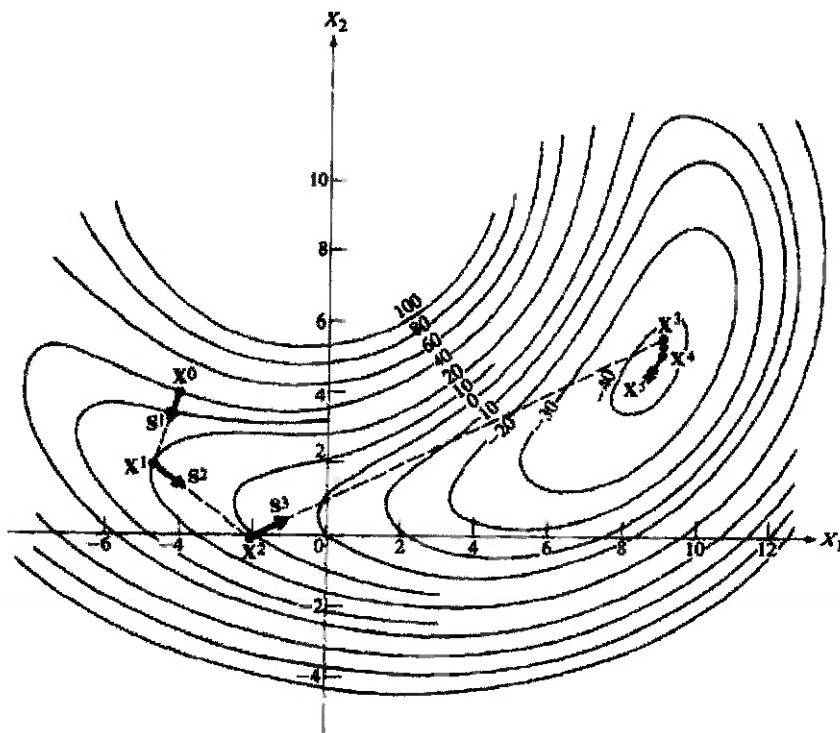


Fig. 5 : Exemplo do caminho percorrido através do método “Fletcher-Reeves”

a.iii. Métodos de Segunda Ordem

Os métodos de segunda ordem são aqueles onde a informação da matriz Hessiana é conhecida, o que melhora a definição da direção de busca, além de fornecer, automaticamente, o caráter do extremo (máximo ou mínimo). Porém caso a matriz não possa ser avaliada de forma simples, este método pode adicionar um custo muito maior na rotina de otimização.

b. Otimização com Restrições

Nos métodos de otimização com restrições nem sempre é possível caminhar na direção de busca definida pelos métodos acima descritos, muitas vezes é necessário corrigir tais direções para que o próximo passo da rotina de otimização esteja dentro do domínio viável do modelo.

2.4. Cálculo do Gradiente

Abaixo estão descritos os métodos mais conhecidos de cálculo do gradiente. É importante ressaltar que tal cálculo é de extrema importância para se obter uma rotina de otimização eficiente, ou seja, que encontre a solução em um número mínimo de iterações possíveis.

Os métodos de cálculo do gradiente podem ser divididos em três subgrupos [10], métodos de Diferenças Finitas, Métodos Analíticos e Métodos Semi-Analíticos. São descritos abaixo dois destes, uma vez que o terceiro grupo incorpora as idéias dos outros dois métodos.

2.4.1. Diferenças Finitas

No método de Diferenças Finitas, o gradiente é calculado através de avaliações da função objetivo para variações unidimensionais nos parâmetros de controle, ou seja, altera-se cada parâmetro isoladamente e avalia-se o valor da função objetivo. Uma vez que todas as variáveis forem analisadas, calcula-se o valor do gradiente através das equações de Diferenças Finitas representada abaixo, o termo O representa a ordem do erro da equação.

- Diferença Progressiva:

$$\frac{du}{dx} \approx \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

- Diferença Regressiva:

$$\frac{du}{dx} \approx \frac{u(x) - u(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

- Diferença Central:

$$\frac{du}{dx} \approx \frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Este método admite a avaliação do gradiente para qualquer função objetivo, porém, pode-se notar que a medida que o número de variáveis cresce, o custo do cálculo do gradiente se torna inviável e para casos onde a função objetivo é de difícil avaliação, como no caso deste projeto, o custo do recálculo da função torna esta variação no numero de variáveis de controle muito mais sensível.

2.4.2. Métodos Analíticos

a. Método Adjunto

O método adjunto foi idealizado para substituir estas reavaliações da função objetivo, para tal é desenvolvido um equacionamento da função através da teoria de cálculo variacional, onde as restrições são inseridas na função objetivo.

Uma vez que para cada restrição é necessário um novo multiplicador de Lagrange, aumenta-se o número de equações adjuntas à medida que forem sendo adicionadas restrições no modelo.

No caso do estudo deste projeto, as restrições são determinadas pela física do escoamento, ou seja, conservação da massa, energia e quantidade de movimento, portanto nota-se que o método adjunto, aplicado em problemas de otimização aerodinâmica em superfícies, é extremamente eficaz, uma vez que o número de variáveis de controle pode ser extremamente alto.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A fundamentação teórica do método adjunto pode ser dividida em quatro partes: equacionamento da física do modelo, cálculo variacional da função objetivo, cálculo da equação adjunta e cálculo das condições de contorno do sistema.

3.1. Equacionamento da Física do Modelo

Para o caso em estudo de escoamento compressível através de um bocal com uma leve variação na área, pode-se utilizar as equações de quase-1D Euler [2].

$$\frac{\partial(SQ)}{\partial t} + \frac{\partial(SF)}{\partial x} = S'H \quad (1)$$

Sendo $S=S(x)$ a área transversal do bocal, Q e F , as variáveis de estado e vetor de fluxo na forma conservativa, respectivamente, e o termo $S'H$, o efeito da variação da área nas equações de balanço.

$$Q \equiv \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t \end{pmatrix} \quad ; \quad F \equiv \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e_t + P)u \end{pmatrix} \quad ; \quad H \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ P \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

A relação de pressão e energia total por unidade de massa para gases perfeitos é dada por:

$$P = (\gamma - 1)\rho \left[e_t + \frac{u^2}{2} \right] \quad (3)$$

Sendo: $e_t = (e_i + u^2/2)$, onde e_i é a energia interna termodinâmica.

3.2. Cálculo Variacional da Função Objetivo

Defini-se então uma medida de mérito como:

$$I = \int_a^b g(V) dx \quad (4)$$

Onde $g(V)$ representa uma função escalar genérica em função das variáveis primitivas do estado $V = (?, u, P)T$.

Para dada medida de mérito deve-se encontrar a geometria que a minimize, portanto deve-se encontrar o variacional de (4), e ainda analisar a possibilidade da

presença de uma onda de choque no domínio de estudo. Para poder trabalhar com tal descontinuidade é recomendado separar o domínio em antes e após a onda de choque presente no ponto x_s [3], logo a equação (4) resulta em:

$$\delta I = \int_0^L \frac{\partial g}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial Q} \delta Q \, dx - [g(V)]_{x_s}^{x_s^+} \delta x_s + \int_{x_s^+}^L \frac{\partial g}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial Q} \delta Q \, dx \quad (6)$$

Uma vez atingido o regime permanente na solução do escoamento, pode-se reduzir o variacional da eq. (1) para:

$$\frac{\partial}{\partial x} d(SF) - d(S'H) = 0 \quad (6)$$

Logo, ao inserir os multiplicadores de Lagrange no funcional I, obtém-se:

$$I = \int_0^L g(V) \, dx + \underbrace{\int_0^L \Psi^L \left(\frac{\partial(SF)}{\partial x} - S'H \right) \, dx}_{I_C} + \Psi_s^L [SF]_{x_s}^{x_s^+} \quad (7)$$

O terceiro termo da eq. (7) impõe a relação de Rankine-Hugoniot (R-H), que impõe a conservação da massa, quantidade de movimento e energia através da onda de choque e o termo I_C representa as restrições.

Para a eq. (6) as variações $d(SF)$ e $d(S'H)$ são definidas como sendo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta(SF) = SA\delta Q + \Gamma\delta S \\ \delta(S'H) = S'B\delta Q + H\delta S' \end{array} \right. \quad (8)$$

Onde A representa a matriz Jacobiana de fluxo e B representa a matriz Jacobiana do termo RHS da eq. (1).

$$A = \frac{\partial F}{\partial Q} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma - 1)\frac{u^2}{\gamma} & (3 - \gamma)u & (\gamma - 1) \\ (\gamma - 1)u^2 - \gamma e_t u & \gamma e_t - (\gamma - 1)\frac{3u^2}{\gamma} & \gamma u \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$B = \frac{\partial H}{\partial Q} = (\gamma - 1) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{u^2}{\gamma} & -u & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Ao analisar o variacional referente ao terceiro termo da eq. (6) alcança-se:

$$\delta [SF]_{x_s}^{x_s^+} = \left[\frac{\partial(SF)}{\partial x} \right]_{x_s}^{x_s^+} \delta x_s + [SA\delta Q]_{x_s}^{x_s^+} + [F\delta S]_{x_s}^{x_s^+} = [S'H]_{x_s}^{x_s^+} \delta x_s + [\delta(SF)]_{x_s}^{x_s^+} \quad (11)$$

Substituindo a eq. (11) no cálculo do variacional do termo Ic, obtém-se:

$$\begin{aligned}\delta I_c &= [\Psi^T \delta(SF)]_{x_0^-}^{x_0^+} - \int_0^{x_0^+} \left[\frac{\partial \Psi^T}{\partial x} \delta(SF) + \Psi^T \delta(S^T H) \right] dx + \Psi^T_{x_0^+} \left\{ [S^T H]_{x_0^+}^{x_0^+} \delta x_0 + [\delta(SF)]_{x_0^+}^{x_0^+} \right\} + \\ &+ [\Psi^T \delta(SF)]_{x_0^+}^{x_0^+} - \int_{x_0^+}^1 \left[\frac{\partial \Psi^T}{\partial x} \delta(SF) + \Psi^T \delta(S^T H) \right] dx\end{aligned}\quad (12)$$

Reagrupando os termos referentes à onda de choque, tem-se:

$$\begin{aligned}\delta I_c &= [\Psi^T(x_0^-) - \Psi^T_{x_0^+}] \delta(SF)_{x_0^-} - [\Psi^T(x_0^+) - \Psi^T_{x_0^+}] \delta(SF)_{x_0^+} + \Psi^T_{x_0^+} [S^T H]_{x_0^+}^{x_0^+} \delta x_0 + [\Psi^T \delta(SF)]_0^1 \\ &= \int_0^{x_0^+} \left[\frac{\partial \Psi^T}{\partial x} \delta(SF) + \Psi^T \delta(S^T H) \right] dx - \int_{x_0^+}^1 \left[\frac{\partial \Psi^T}{\partial x} \delta(SF) + \Psi^T \delta(S^T H) \right] dx\end{aligned}\quad (13)$$

De acordo com Gilles e Pierce [3] é necessário impor uma condição de contorno interna sobre o multiplicador de lagrange na região da onda de choque, tal que:

$$\Psi(x_0^-) = \Psi_{x_0^+} = \Psi(x_0^+) \quad (14)$$

Logo são eliminados os dois primeiros termos da eq. (13), e assim se impõe a continuidade no multiplicador de lagrange através da onda de choque. Ao substituir as equações (8) no variacional de Ic, tem-se:

$$\begin{aligned}\delta I_c &= \Psi^T_{x_0^+} [S^T H]_{x_0^+}^{x_0^+} \delta x_0 + [\delta Q^T, S A^T, \Psi]_0^1 + [\delta S F^T, \Psi]_0^1 + \\ &+ \int_0^{x_0^+} \left[\delta Q^T \left(S A^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} + S^T B^T \Psi \right) + \delta S F^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \delta S^T H^T \Psi \right] dx + \\ &+ \int_{x_0^+}^1 \left[\delta Q^T \left(S A^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} + S^T B^T \Psi \right) + \delta S F^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \delta S^T H^T \Psi \right] dx\end{aligned}\quad (15)$$

Unindo a eq. (15) na eq. (7), levando em conta que Ψ é contínuo através do bocal e que as variáveis do escoamento apresentam saltos finitos na onda de choque.

$$\begin{aligned}\delta I &= \underbrace{[\delta Q^T, S A^T, \Psi]_0^1}_{(a)} + \underbrace{\int_0^{x_0^+} \delta Q^T \left[\left(\frac{\partial V}{\partial Q} \right)^T \frac{\partial q}{\partial V} - S A^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} - S^T B^T \Psi \right] dx}_{(b)} + \\ &+ \underbrace{\left\{ \Psi^T_{x_0^+} [S^T H]_{x_0^+}^{x_0^+} - [q(V)]_{x_0^+}^{x_0^+} \right\} \delta I_A}_{(c)} + \underbrace{[\mathbf{F}^T, \Psi \delta S]_0^1}_{(d)} - \underbrace{\int_0^{x_0^+} \left[\mathbf{F}^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} \delta S + \mathbf{H}^T \Psi \delta S \right] dx}_{(e)}\end{aligned}\quad (16)$$

Esta equação representa o variacional da medida de mérito para a restrição escolhida, ou seja, a eq. satisfaz as equações de Euler, assim como as relações R-H.

A partir do termo (a) serão desenvolvidas as condições de contorno de tal forma que este termo seja nulo, o termo (b) será utilizado para calcular os valores de γ , o termo (c) contribuirá para o cálculo do dI no caso de presença de onda de choque, portanto restam os termos (d) e (e) para o cálculo do variacional, onde ambos apenas envolvem variacionais da geometria.

3.3. Cálculo da Equação Adjunta

Uma vez que dQ^T são variações realizáveis, ou seja, satisfazem a eq. (6), e são arbitrárias, portanto para anular o termo (b) deve-se impor o termo entre colchetes igual a zero, disso encontra-se a equação adjunta:

$$-S\mathbf{A}^T \frac{\partial \Psi}{\partial x} - S\mathbf{B}^T \Psi + \frac{\partial \mathbf{U}^T}{\partial Q} \frac{\partial \Psi}{\partial V} = 0 \quad (17)$$

3.4. Cálculo das Condições de Contorno

Para resolver as condições de contorno da equação adjunta, deve-se anular o termo (a) da eq. (16).

$$[\delta \mathbf{Q}^T, S\mathbf{A}^T, \Psi]_0^T = \{\delta \mathbf{Q}^T, S\mathbf{A}^T, \Psi\}_I - \{\delta \mathbf{Q}^T, S\mathbf{A}^T, \Psi\}_0 \quad (18)$$

Para tal deve-se estudar o fluxo da informação do escoamento. O Jacobiano do fluxo da equação adjunta (17) é igual ao da equação de Euler, com a diferença do sinal contrário. Como resultado tem-se as mesmas velocidades características do escoamento, porém com direções opostas. [4,13]



Fig. 6 : (a) Perfil do bocal; (b)Velocidades características do escoamento; (c) velocidades características da equação adjunta

Na figura acima, a característica u é representada pela linha contínua, $(u+c)$, pela pontilhada e $(u-c)$, linha-ponto. Pode-se observar que devido à inversão dos sinais das características, para uma entrada subsônica onde duas características influíam no escoamento interno, apenas uma característica adjunta será transmitida, a mesma lógica vale para as demais situações.

Para uma entrada subsônica são impostas duas condições de contorno: T_0 e P_0 . Para facilitar o cálculo de d_{qj} escreveremos T_0 e P_0 em função dos elementos q_i da matriz Q :

$$T_0 = \frac{(\gamma-1)}{2\gamma R \rho_0} \left[(\gamma-1)q_0^2 - 2\gamma q_1 q_0 \right] \quad (19)$$

$$P_0 = \frac{(\gamma-1) (2q_1 q_0 - q_0^2)}{2q_1} \left[1 + \frac{q_0^2}{\gamma(2q_1 q_0 - q_0^2)} \right]^{\frac{2}{\gamma-1}} \quad (20)$$

Calculando o variacional de T_0 e P_0 chega-se em:

$$\delta T_0 = \frac{\gamma-1}{\gamma R \rho} \left\{ \gamma \delta q_0 - u(\gamma-1) \delta q_1 - [e_T \gamma - (\gamma-1)u^2] \delta q_1 \right\} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \delta P_0 = & \frac{1}{2(\gamma-1)u^2 - 4e_T u} \left\{ \left[1 + \frac{u^2}{\gamma(2e_T - u^2)} \right]^{\frac{2}{\gamma-1}} [u(\gamma q_0 - 2\delta q_1) (-2e_T(\gamma-2)\gamma + \right. \right. \\ & \left. \left. + (\gamma-1)^2 u^2) + 2(-2e_T(\gamma-1)\gamma + (1+(\gamma-1)\gamma)u^2) \delta q_1] \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

Para valores constantes de T_0 e P_0 obtém-se $dT_0 = 0$ e $dP_0 = 0$. Portanto, substituindo esta condição e escolhendo dq_2 e dq_3 expressos em função de dq_1 , tem-se:

$$\begin{cases} dq_1 = \left[\frac{(2+\gamma(\gamma-1))u - e_1(\gamma-1)}{u} \right] \delta q_1 \\ dq_2 = \left[\frac{(\gamma-1)^2 u^2}{2} - e_1(\gamma-2)\gamma \right] \delta q_1 \end{cases} \quad (23)$$

Pela eq. (23) apresenta-se a condição de contorno física imposta por T_0 e P_0 , de acordo com o obtido, tem-se dq_1 livre e dq_2 e dq_3 restritos.

Substituindo a eq. (23) no termo $(dQT.SAT. ?)0$, obtém-se a seguinte equação:

$$(\delta Q)^T \cdot S A^T \cdot \Psi_0 = - [2\gamma(\gamma-1)e_1 + (-2 + \gamma - \gamma^2)u^2] [2\psi_1 + 2e_1\gamma\psi_3 + u(2\psi_2 - u(\gamma-1)\psi_3)] \frac{\delta q_1}{4u} \quad (24)$$

Uma vez que tendo-se $[dQT.SAT. ?] = 0$, pode-se impor a seguinte condição: $(dQT.SAT. ?)0 = 0$ e $(dQT.SAT. ?)1 = 0$.

Uma vez que não pode-se impor um valor para dq_1 , deve-se igualar o coeficiente multiplicador a zero, sendo o primeiro parênteses determinado exclusivamente pelo escoamento, obtém-se a seguinte condição da equação:

$$\psi_1 = \left[\frac{(\gamma-1)u^2}{2} - e_1\gamma \right] \psi_3 - u\psi_2 \quad (25)$$

Portanto, tem-se dois graus de liberdade na equação adjunta (22 e 23) e uma condição fixa, respeitando as características da equação adjunta para entrada subsônica.

Para uma saída subsônica deve-se impor a pressão estática, escrevendo a eq. (3) em função de q_i , obtendo-se:

$$P = (\gamma - 1) \left(q_3 - \frac{q_2^2}{2q_1} \right) \quad (26)$$

Sua variação é dada por:

$$\delta P = \frac{(\gamma-1)}{2} [2\delta q_1 - 2u\delta q_2 - u^2\delta q_3] \quad (27)$$

Impondo-se a condição $dP = 0$, e resolvendo a equação de dq_3 em função de dq_1 e dq_2 , tem-se:

$$\delta q_3 = m \delta q_1 - \frac{u^2}{2} \delta q_1 \quad (28)$$

Da mesma forma, descrita na entrada, na saída obtém-se dq_3 fixo e dq_1 e dq_2 livres, substituindo a eq. (36) em (dQT.SAT. ?)l, tem-se:

$$(\delta Q^T, S A^T, \Psi)_l = [2(\psi_1 + \epsilon_1 \gamma \psi_2 + 2m \psi_3) + (\gamma - 2)u^2 \psi_3] \frac{\delta q_2}{2} + [-2(\epsilon_1 \gamma \psi_2 + m \psi_3) + (\gamma - 2)u \psi_1] \frac{m \delta q_1}{2} \quad (29)$$

Como dq_1 e dq_2 não podem ser especificados, deve-se ter cada termo dos colchetes iguais à zero, resultando em:

$$\begin{cases} \psi_1 = \left[\gamma \epsilon_1 - \frac{(\gamma - 2)u^2}{2} \right] \psi_3 \\ \psi_2 = \left[\frac{(\gamma - 2)u}{2} - \frac{\gamma \epsilon_1}{u} \right] \psi_3 \end{cases} \quad (30)$$

Portanto, a tabela seguinte resume as condições de contorno para todos os casos:

Direção do fluxo	regime	Variacional do vetor de estado dQ	Vetor ?
Entrada	Subsônico	$dq_2(dq_1), dq_3(dq_1)$ eq. (23)	?1(?2, ?3) Eq. (25)
	Supersônico	$dq_i = 0$?i livre
Saída	Subsônico	$dq_3(dq_1, dq_2)$ eq. (28)	?1(?3), ?2(?3) Eq. (30)
	Supersônico	dq_i livre	?i = 0

Tabela 1 : Condições de Contorno

4. COMPONENTES DO PROJETO

4.1. Solver de CFD

O caso em estudo necessita de simulações do escoamento compressível no bocal de empuxo do foguete, as possíveis situações encontradas envolverão escoamento subsônico e supersônico.

Uma vez necessário um resultado computacional do escoamento satisfatório, deve-se construir um “solver” que forneça um comportamento adequado e confiável.

Para tal foi utilizada a rotina de CFD escrita na linguagem computacional C desenvolvida por Fabiani [1]. Esta rotina baseia-se no método dos Volumes Finitos e faz uso dos algoritmos de “flux-splitting” de Stegger-Warming, Modified Stegger-Warming e de Roe.

Entretanto observaram-se algumas inconsistências no programa. Ao rodar algum caso mais complexo percebia-se uma exigência muito grande da memória no computador e ao revisar a lógica computacional e foram verificados problemas com alocações de variáveis dinâmicas.

Para resolver o problema utilizou-se a biblioteca nrutils.c [2], a qual é amplamente empregada pela comunidade científica por ser de fácil utilização e de baixo custo computacional, além de programas específicos que verificam a alocação de memória.

Após consertar os problemas, foram feitas modificações no código de modo a resolver problemas de equacionamento e condições de contorno, as quais estavam implementadas de forma incorreta.

4.2. O método adjunto

Inicialmente, foi traduzido para a linguagem C, um programa em formato de desenvolvimento do software Matlab® criado pelo Prof. Dr. Ernani V. Volpe, onde um caso específico do método é resolvido analiticamente.

Para tal, fora necessário a criação de uma série de arquivos em linguagem C, desenvolvendo uma extensa biblioteca que abrange desde manipulações e operações de matrizes até leitura e geração de arquivos de resposta.

O código foi desenvolvido na plataforma Linux, esta escolha se deve ao fato de que: a impressão das variáveis no console é de fácil manipulação e mais clara do que em uma plataforma Windows; a compilação de vários arquivos é de fácil construção; e a plataforma Linux fornece ao usuário um maior número de compiladores, bibliotecas e debuggers.

Outra medida realizada a respeito do método foi a alteração do cálculo do gradiente do método explícito para o implícito. Após a conclusão desta fase foi encontrado um problema na região da condição de contorno para a entrada e saída do sistema.

Estas alterações resultaram em um enorme ganho na velocidade de convergência do sistema, uma vez que ao implantar o método implícito é possível trabalhar com passos de integração temporal maior, ou seja, a velocidade de informação do método computacional pode ser igual ou maior do que a velocidade do escoamento.

Depois de finalizada a implementação do método implícito para a condição de contorno, encontrou-se uma instabilidade para alguns casos onde era caracterizado um escoamento subsônico na entrada e supersônico na saída com ou sem onda de choque.

Embora a onda de choque contribuisse para a instabilidade, esta era mais significativa na garganta do bocal, onde o valor do número de Mach se torna unitário, gerando uma singularidade nas equações. Iniciou-se, então, um estudo para a implementação de dissipação artificial através do método Pullian [11] para resolver a instabilidade, o qual já fora implementado e está em funcionamento.

4.3. Validação dos Resultados

Para validar os resultados obtidos é utilizado um resultado analítico do método para os casos de geometria simples, ou seja, no formato de cone e escoamento supersônico.

Além do resultado analítico é utilizado o método de diferenças finitas para o cálculo da sensibilidade da função objetivo em casos mais complexos, ou seja, de geometria parabólica com escoamento subsônico e supersônico.

Os modelos produzidos comercialmente podem ser aproximados aos simulados pelo método, porém quando finalizado ele será capaz de trabalhar com qualquer nível de complexidade da geometria, uma vez que, diferentemente do método de diferenças finitas, à medida que os parâmetros de controle crescem, o custo computacional permanece relativamente baixo.

5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

5.1. Caso bocal cônico

Para um caso simples de bocal cônico com entrada subsônica foi possível obter um resultado convergido do método após 75 interações com precisão de 10-5. A figura abaixo ilustram o caminho percorrido pelo método nas direções de a, b e c.

A evolução dos parâmetros é representada pela variação das cores e dos tamanhos dos pontos, o ponto azul escuro representa a geometria objetivo, o ponto vermelho escuro, o resultado final do método e o círculo verde, o ponto de partida. Existem dois caminhos representados: magenta e verde, os quais são: o método adjunto e o método de diferenças finitas, respectivamente.

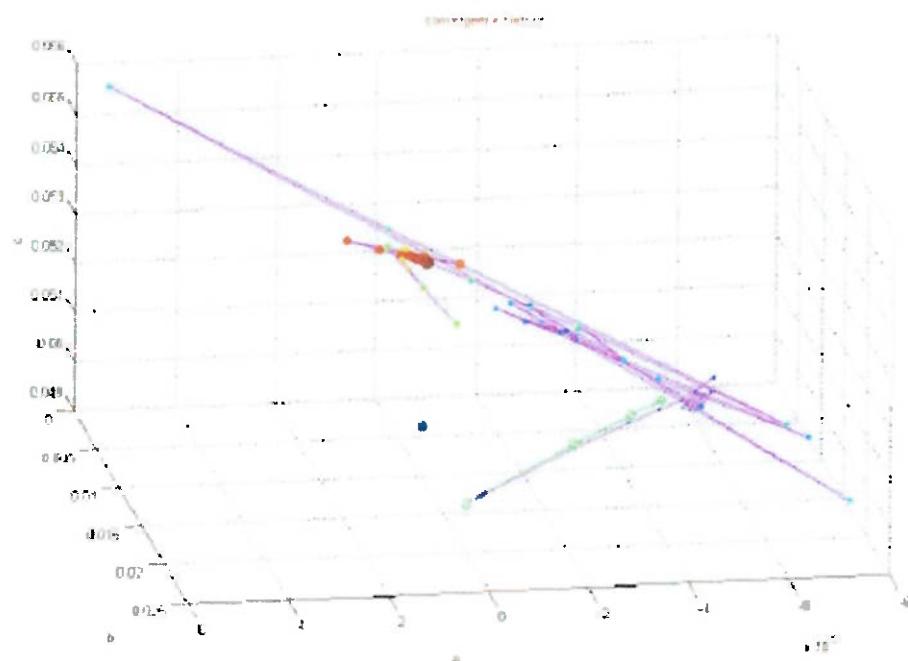


Fig. 7 : Caminho percorrido pela solução convergida do método

Pode-se notar que o ponto final possui um valor de a e b muito próximos do objetivo, porém o parâmetro c nos leva a crer que o resultado não é convergido.

Uma possibilidade deste comportamento é que não há uma restrição no método do fluxo de massa na entrada, logo é possível que a geometria encontre

uma solução para um bocal com uma abertura diferente do objetivo, porém com um perfil aproximadamente paralelo ao esperado. A figura a seguir ilustra a geometria final (vermelho) e a esperada (preto), além de uma translação da esperada com o intuito de comparar o paralelismo das geometrias.

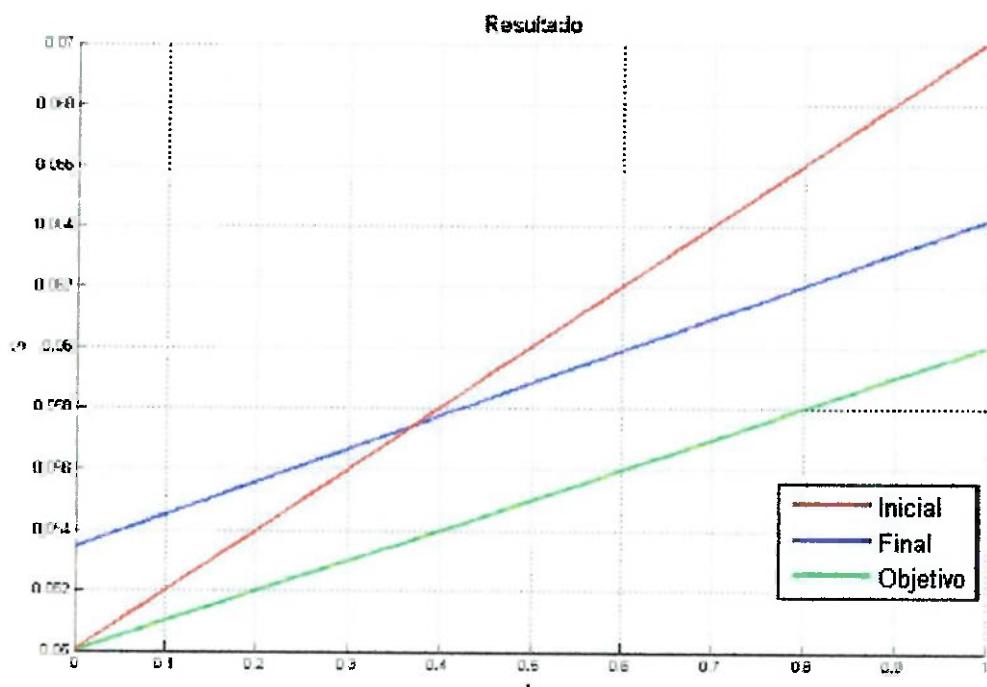


Fig. 8 : Histórico da geometria do bocal cônico

A distribuição de Pressão da figura 9 mostra que o caso de fato convergiu, o que corrobora a hipótese descrita.

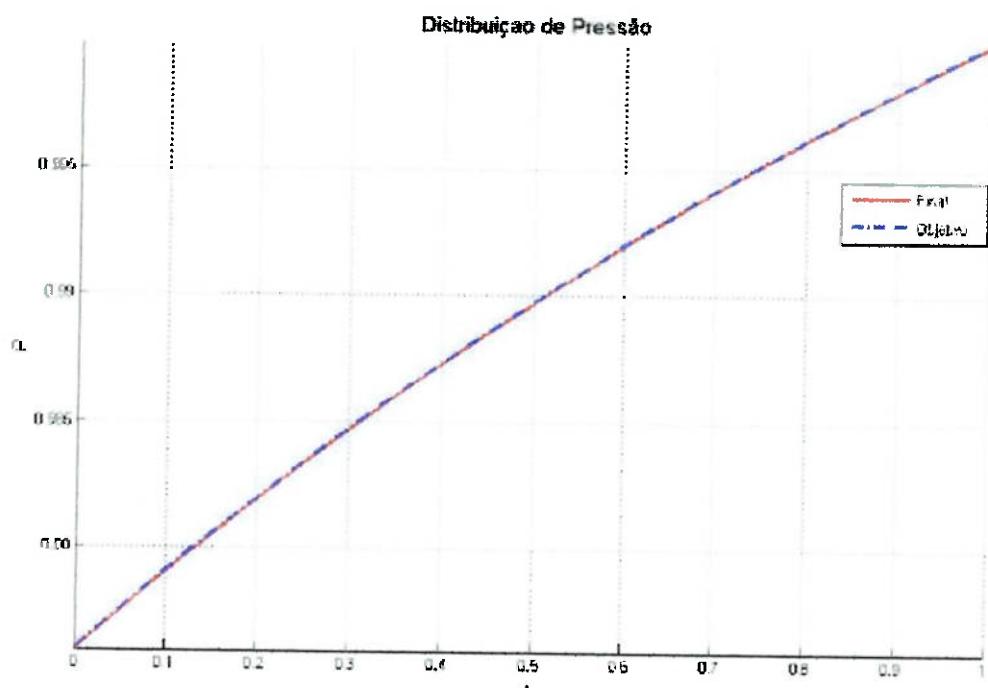


Fig. 9 : Resultado da Pressão para o bocal cônico

A figura 10 mostra a evolução do módulo do gradiente. Pode-se notar que há uma grande oscilação nos valores calculados. Isso se deve ao fato de que, uma vez definida a direção de busca e o tamanho do passo, não é possível garantir que o novo valor encontrado será menor que o anterior, uma vez que o modelo lida com funções extremamente não-lineares.

Em função disto foi criada uma rotina de verificação de convergência após a análise da geometria modificada na iteração anterior e antes do cálculo do novo gradiente.

Tal rotina avalia o valor da função objetivo para a nova configuração da geometria e compara com o valor da anterior, caso este seja menor, ou seja, a solução está convergindo, o algoritmo passa para a avaliação do gradiente; caso seja maior, a rotina diminui pela metade o passo e gera uma nova geometria, retornando ao solver para avaliar o escoamento.

Este processo pode acontecer até três vezes em uma mesma iteração, sempre diminuindo pela metade o último passo realizado. Caso a função não

diminua de valor após as três iterações, ela passa para o cálculo do gradiente. Isso por que, como é utilizado o método de “Fletcher-Reeves”, onde se utiliza também a informação da direção anterior e não somente o do gradiente, não é possível saber se na direção de busca realmente existe um ponto menor do que o original. Portanto reduziu-se o risco de muitas avaliações do escoamento, sem um avanço significativo na busca do ponto de mínimo.

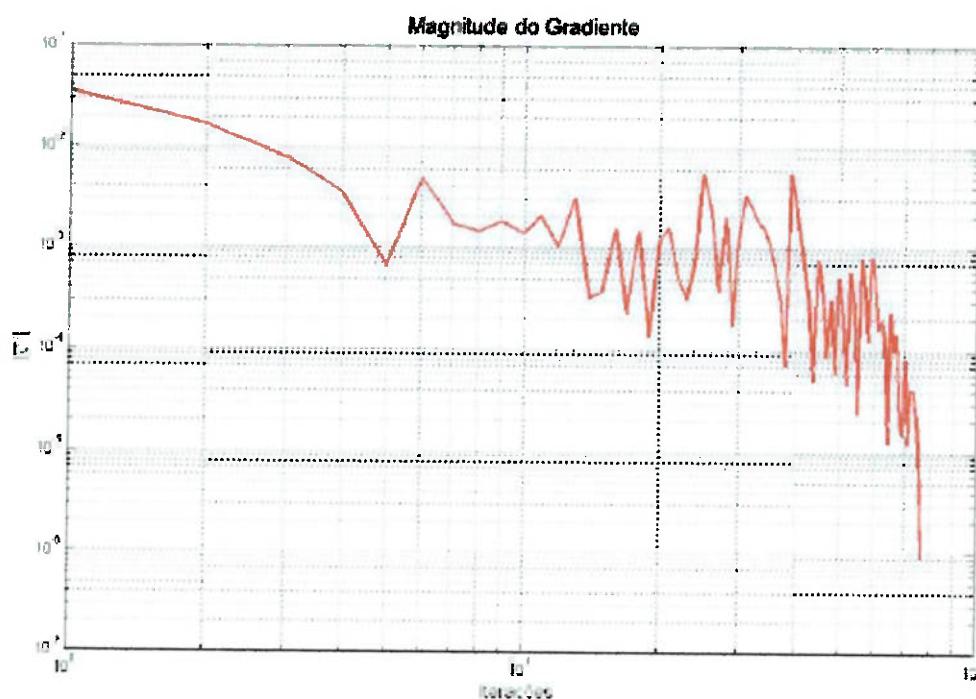


Fig. 10 : Evolução do Módulo do Gradiente para o bocal cônico

Após a implementação da análise descrita acima, foi definido a configuração final da rotina de otimização. A figura 11 mostra através de diagramas de blocos as diversas etapas do processo.

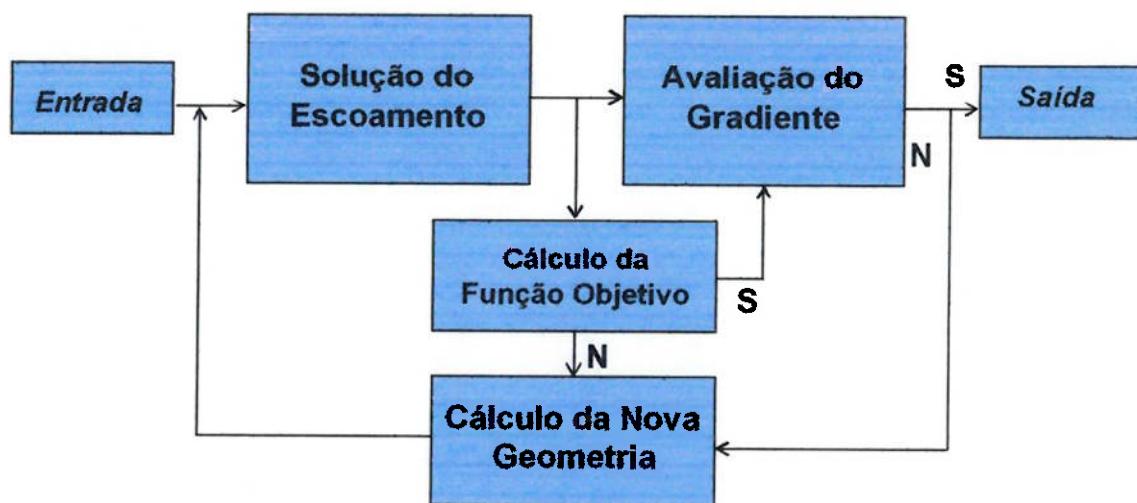


Fig. 11 : Rotina final de otimização

5.2. Caso bocal convergente-divergente

O mais importante caso de bocal para foguete é o bocal convergente-divergente, devido à sua propriedade de gerar uma distribuição de pressão que maximiza o empuxo do foguete.

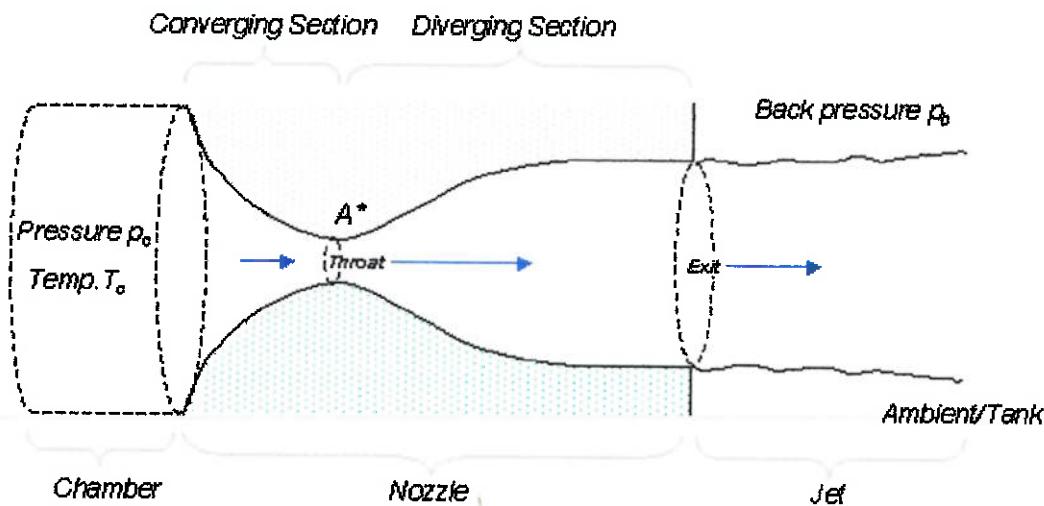


Fig. 12 : Exemplo de Bocal Convergente-Divergente

Fonte: <http://www.engapplets.vt.edu/>

A distribuição de pressão no bocal neste caso pode assumir 4 situações distintas dependendo da pressão na saída p_b , da pressão na entrada p_c , da área da garganta A^* assim como sua localização.

A figura 13 mostra os possíveis resultados dependendo da pressão de saída.

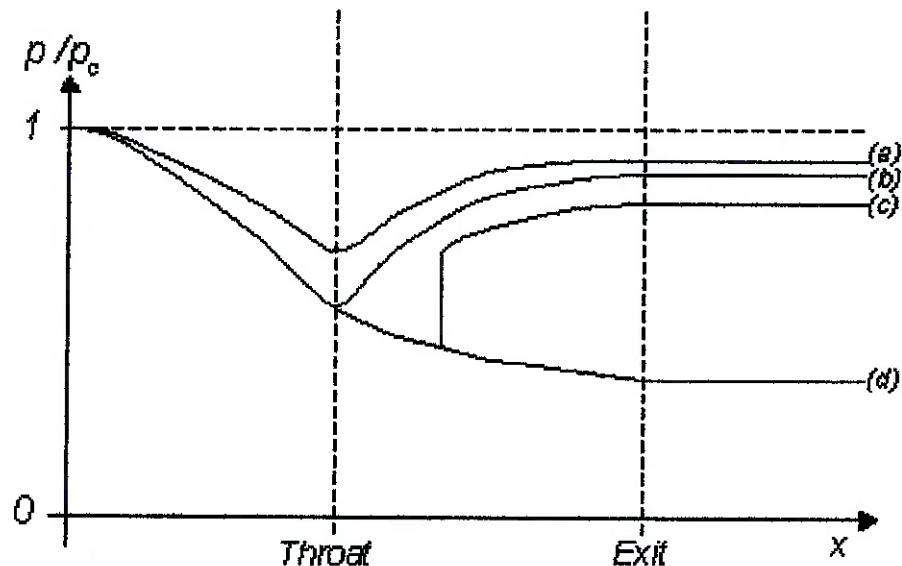


Fig. 13 : Possíveis resultados de pressão

Fonte: <http://www.engapplets.vt.edu/>

Para uma pressão de saída $p(b) < p_b < p_c$ obtém-se um regime subsônico em ambas as seções convergente e divergente. Ao aumentar gradualmente p_b obtém-se um fluxo sônico na garganta, curva b.

Após a curva b as reduções em p_b não são sentidas pelo escoamento a montante da garganta. Tais alterações podem resultar em duas outras configurações: curva c, com presença de onda de choque; e curva d, com o regime, a jusante da garganta, completamente supersônico.

As características da curva d serão melhores estudadas, uma vez que esta possui as melhores condições de escoamento para um foguete ao analisar o empuxo resultante. Elas são conhecidas na literatura como a “terceira crítica”.

Considerando um caso convergente-divergente com o regime da geometria inicial semelhante ao da curva c, com um perfil objetivo semelhante ao da curva a,

ou seja, em um estudo de eliminação da onda de choque existente no bocal, obtém-se um resultado convergido com 50 ciclos para uma precisão de 10-3.

A figura 14 ilustra a evolução da geometria do bocal.

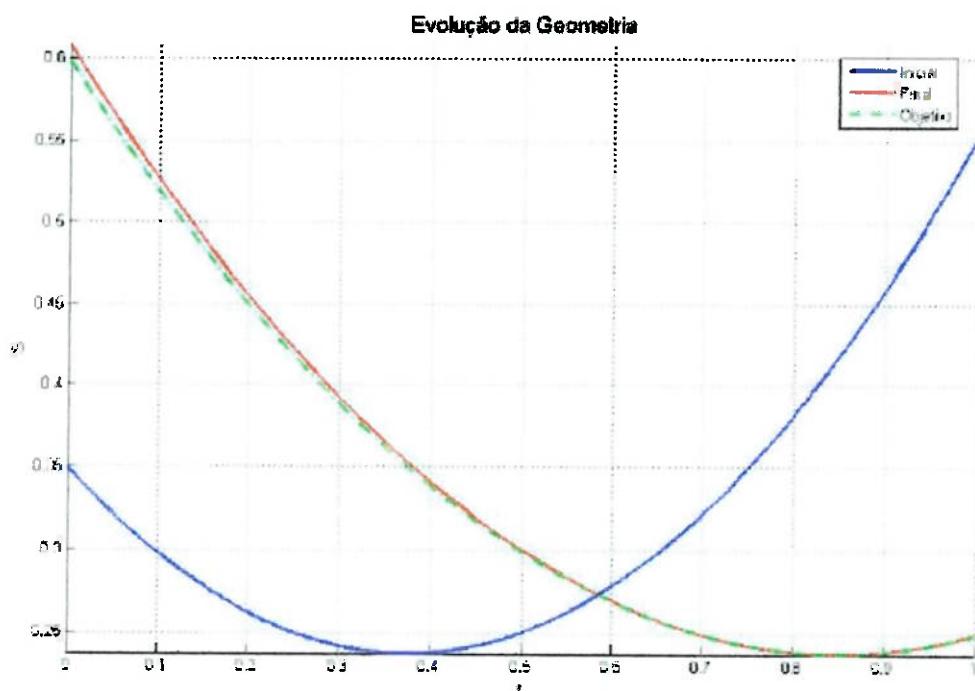


Fig. 14 : Evolução da geometria para caso convergente-divergente

Na figura 15 podemos visualizar a evolução do perfil de pressões, onde nota-se a onda de choque na curva inicial, porém a final coincide com a objetivo, no caso totalmente subsônica.

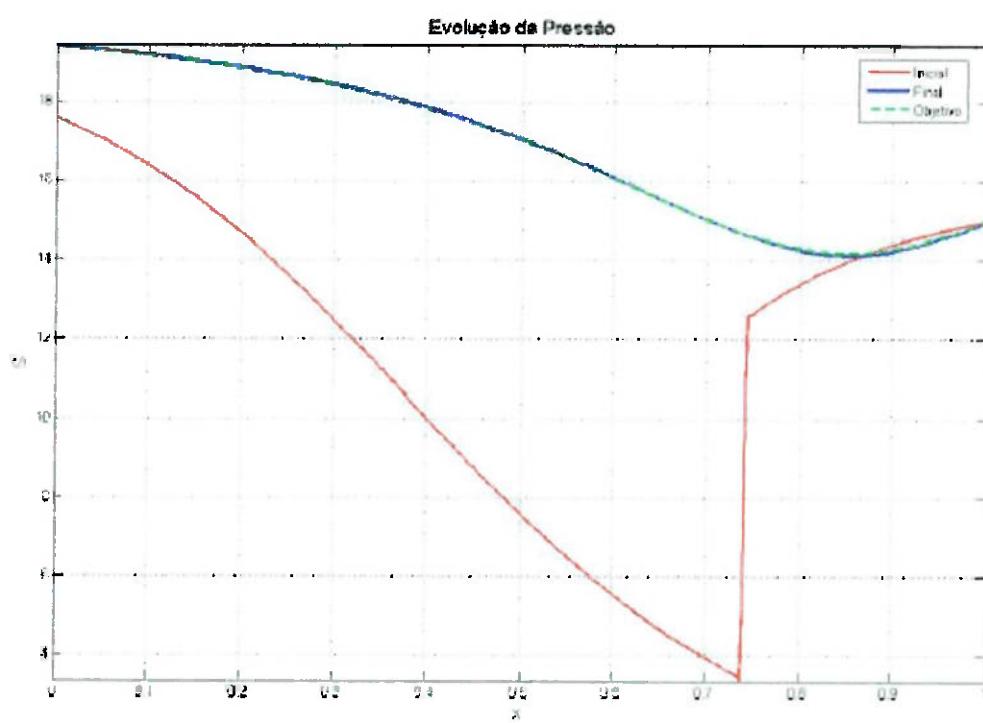


Fig. 15 : Evolução do perfil de pressões obtidos caso convergente-divergente

Na figura 16 observa-se a evolução do módulo do gradiente. Este caso foi rodado após a implementação da rotina de verificação de convergência. Pode-se notar a diferença das oscilações entre os dois casos mencionados (figuras 10 e 16), comprovando a redução do problema.

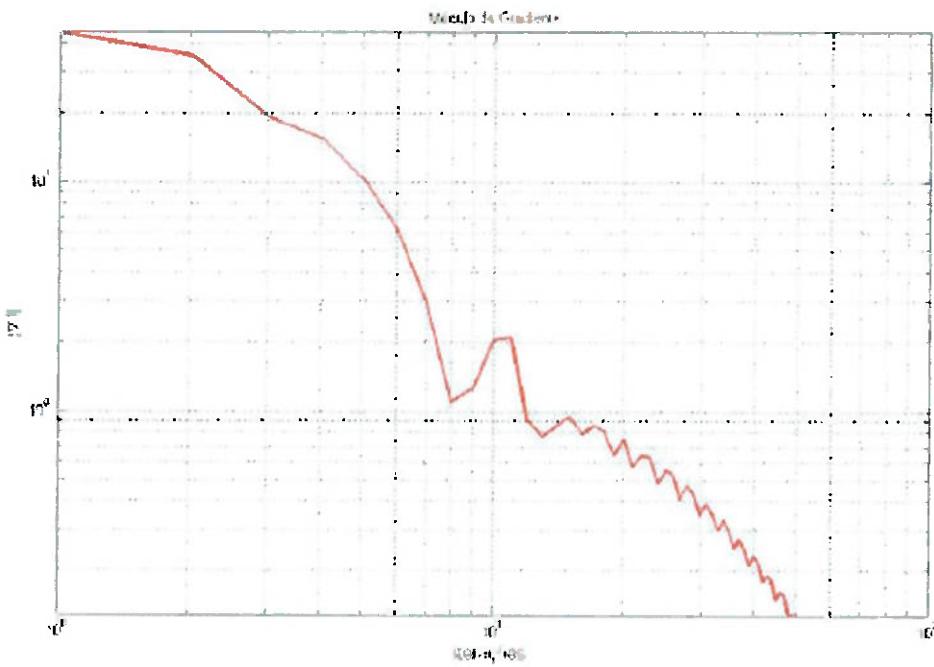


Fig. 16 : Evolução do módulo do gradiente para o bocal convergente-divergente

É importante destacar que para esta simulação foi implementada a restrição o valor do fluxo de massa máximo, ou seja, o valor de A^* foi considerado fixo, reduzindo o número de variáveis de controle para apenas a e b:

$$A^* = -\frac{b_0^2}{4 a_0} + c_0 \quad (31)$$

$$c_1 = A^* + \frac{b_1^2}{4 a_1} \quad (32)$$

Esta medida impediu que se alcançasse um resultado semelhante ao caso do bocal cônico, onde para diferentes valores de a, b e c fora encontrado um resultado convergido. Porém, vale ressaltar que esta restrição só é válida para os casos de bocais supersônicos, onde o Mach na garganta é um, nos casos subsônicos a vazão mássica varia, reduzindo seu valor para velocidades menores.

Uma outra análise pesquisada é o tipo da função que esta sendo otimizando, para assim compreender melhor os pontos em que o método pode considerar obter

uma solução convergida. A figura abaixo ilustra o comportamento da função objetivo para uma geometria parabólica.

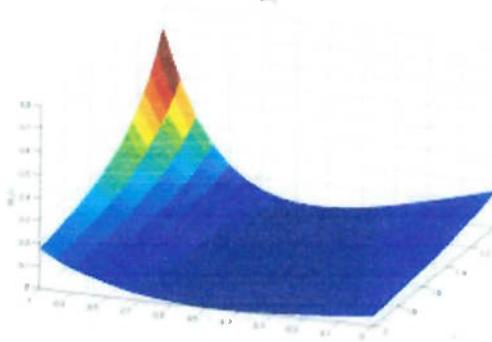


Fig. 17 : Superfície da função objetivo para um caso de geometria parabólica

Pode-se observar que a função possui um vale na região de mínimo com um eixo paralelo à coordenada em c , portanto é possível encontrar um resultado convergido com a e b muito próximos do esperado, porém com o parâmetro c longe do objetivo.

6. CONCLUSÃO

O trabalho apresentou um resultado final satisfatório, visto que todas as atividades previstas foram concluídas. Existem melhorias possíveis de serem realizadas no método de busca do algoritmo, porém o software desenvolvido apresenta um comportamento estável e confiável, capaz de encontrar uma solução convergida para casos de alta complexidade.

O gradiente avaliado pelo método adjunto foi comparado ao calculado por diferenças finitas. Ambos parecem convergir para a mesma geometria, porém com pequenas diferenças. Entretanto, é importante ressaltar que no método de diferenças finitas o custo computacional cresce de forma inviável a medida que são adicionadas variáveis de controle, o que não acontece com o método adjunto. Além disso, o método de diferenças finitas sofre de imprecisões numéricas, uma vez que este é muito sensível ao tamanho da variação de cada variável.

Inicialmente fora proposto, como uma atividade extra, o estudo de otimização estrutural do bocal resultante do método. Porém, diante do cronograma proposto, não foi possível realizar tal análise.

A intenção desta atividade seria iniciar um modelo de otimização multidisciplinar, algo novo no meio tecnológico, porém visto como o futuro dos algoritmos de otimização. Portanto, é posto como sugestão para próximos projetos esta análise multidisciplinar do bocal de empuxo.

Ressalta-se a importância de que o programa desenvolvido é uma base muito forte para novas aplicações. Algo de imediato seria aumentar as variáveis de controle para se obter geometrias mais complexas e mais realistas. Outra medida seria modificar a função objetivo, com a intenção de se encontrar bocais com o maior empuxo possível, menor arrasto ou com a maior velocidade ou temperatura de saída.

Além destas medidas imediatas, há a possibilidade de se iniciar um projeto de otimização em superfícies externas, como, por exemplo, em um foguete, ou no perfil de asa ou na fuselagem de um avião.

Desta forma, diante do objetivo proposto de se otimizar um bocal de empuxo de um foguete baseado nas dimensões daqueles obtidos no mercado como sinalizadores, os resultados esperados foram alcançados, fazendo com que este trabalho contribuísse para o desenvolvimento de novos métodos de otimização no meio tecnológico.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Fabiani, L. F. V. R., 2003, "Simulação de Bocais em Escoamento Compressível", EPUSP, S. Paulo, Brasil, 63 p.
- [2] Hirsch, C., 1992, "Numerical Computation of Internal and External Flows", John Wiley, Chichester, England, 515 p.
- [3] Gilles, M. B., Pierce, N. A. "On the Properties of the Adjoint Euler Equations"
- [4] Volpe, E. V., Santos, L. C. C., 1999, "Aerodynamic shape optimization using the adjoint method", EPUSP, S. Paulo, Brasil,
- [5] Press, W. H., Flannery, B. P., 1989, "Numerical Recipes in C: the art of scientific computing", Cambridge University, Cambridge, England, 735 p.
- [6] Lepage, Y., 2000, "Linux Bible", IDG Books Worldwide, Foster City, CA, 2ed, 750 p.
- [7] Ramalho, G. M., 2005, "Otimização de foguetes de combustível sólido utilizando-se dinâmica dos fluídos computacional (CFD)", EPUSP, S. Paulo, Brasil, 43 p.
- [8] Telles, B., 2003, "Simulação e otimização do uso de foguetes de combustível sólido", EPUSP, S. Paulo, Brasil, 48 p.
- [9] Anderson, J. D., 1991, "Fundamentals of Aerodynamics", McGraw-Hill, New York, EUA, 772p.
- [10] Silva, E. C. N., "Otimização Aplicada ao Projeto de Sistemas Mecânicos", EPUSP, S. Paulo, Brasil, 151p.
- [11] Vanderplaats, G. N., "Numerical Optimization Techniques for Engineering Design With Applications", McGraw-Hill. Inc., NY, USA, 1984.
- [12] EMBRAER. "Desenvolvimento de tecnologia de mecânica dos fluídos computacional para projeto de aeronaves de alto desempenho", FAPESP –

PICTA: Projeto de Inovação em Ciência e Tecnologia Aeroespaciais, São Paulo, Brasil, 2003.