ADRIANO AKIO KOGA

**PROJETO DE DISPOSITIVOS DE MICROCANAIS UTILIZANDO
O MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do Título de Mestre em
Engenharia Mecânica.

SÃO PAULO

Novembro de 2010

ADRIANO AKIO KOGA

**PROJETO DE DISPOSITIVOS DE MICROCANAIS UTILIZANDO
O MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO TOPOLÓGICA**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do Título de Mestre em
Engenharia Mecânica.

Área de Concentração:

Engenharia de Controle e Automação
Mecânica

Orientador:

Prof. Dr. Emílio Carlos Nelli Silva

SÃO PAULO

Novembro de 2010

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, de novembro de 2010.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Koga, Adriano Akio

Projeto de dispositivos de microcanais utilizando o método de otimização topológica / A.A. Koga. -- ed.rev. -- São Paulo, 2010.

114 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos.

1. Métodos topológicos 2. Escoamento monofásico 3. Trocadores de calor 4. Programação linear 5. Método dos elementos finitos I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecatrônica e de Sistemas Mecânicos II. t.

*Dedico este trabalho à minha mãe e à
minha família por me apoiarem e darem
todas as condições de realizá-lo e em
memória a meu pai, Kunio Koga.*

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. Dr. Emílio Carlos Nelli Silva, por todas as importantes orientações recebidas durante a realização deste trabalho, por todo o apoio, paciência e pela motivação inspirada a todos os seus alunos, no desenvolvimento de nossas carreiras acadêmicas.

Agradeço à minha mãe, Teiko Hiraoka Koga, por todo o carinho e dedicação, durante todos estes anos, e por todo o apoio em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos, Marcos e Márcia por todos os momentos de convivência.

Aos meus tios e tias, primos e avó, por todo o apoio e incentivo que sempre recebi durante toda a vida.

Aos meus grandes amigos, de todos os momentos, do colégio, que sempre estavam presentes nos momentos difíceis.

Aos meus amigos "culturais", com quem tive o prazer de desfrutar tantos momentos de diversão e amizade.

Aos meus amigos de graduação, por toda amizade e companheirismo ao longo de toda essa longa jornada.

Aos amigos do Aerodesign, com quem pude aprender e crescer muito.

Aos amigos da pós-graduação, por todo o apoio e amizade ao longo destes anos de trabalho, e pelos momentos de descontração.

Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo apoio financeiro deste trabalho, através da bolsa de mestrado concedida.

E por fim, a todos aqueles que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho propõe o estudo do projeto de dispositivos baseados em microcanais de fluido, tais como difusores, misturadores, válvulas, e trocadores de calor, através da aplicação do Método de Otimização Topológica (MOT). O MOT é um método computacional que permite obter um projeto otimizado de um sistema, através da distribuição de uma quantidade limitada de material num dado domínio de projeto. Neste caso, o MOT é aplicado a um domínio fluido, e permite obter a topologia otimizada (formato ótimo) dos microcanais, segundo uma determinada característica, seja esta, a minimização da perda de carga, ou a maximização da velocidade num dado ponto, ou ainda a maximização da troca de calor, no caso de trocadores de calor. Os canais utilizados nestas aplicações operam com baixo número de Reynolds, sendo um caso típico da aplicação das equações de escoamento de Stokes. A implementação do MOT é realizada sob a forma de rotinas computacionais, permitindo um projeto sistematizado dos canais. No processo de otimização, utiliza-se o Método dos Elementos Finitos (MEF) como método de análise dos fenômenos físicos envolvidos, e a Programação Linear Seqüencial (PLS) como algoritmo de otimização. Ao final, propõe-se um estudo multi-físico, aliando-se características otimizadas tanto do ponto de vista da eficiência do escoamento, quanto do ponto de vista da dissipação térmica no canal, combinando-os através de uma função multi-objetivo. Exemplos de projeto bidimensionais de dispositivos de fluido são apresentados para ilustrar o método.

Palavras-chave: Microcanais, Otimização Topológica, Escoamento de Stokes, Trocadores de Calor, Programação Linear, Método dos Elementos Finitos, Dispositivos de escoamento fluido.

ABSTRACT

This work proposes studying the design of micro channel devices, such as fluid diffusers, mixers, valves, and heat exchangers, through the application of the Topology Optimization Method (TOM). The TOM is a computational method that allows the distribution of a limited amount of material, inside a given design domain, in order to obtain an optimized system design. Herein, the TOM is applied to a fluidic domain, allowing the design of an optimized microchannel topology (optimal configuration), according to a given objective function, such as head loss minimization, maximum velocity in a given direction, or the heat transfer maximization, in a heat exchanger example. Especially this kind of channel devices, operates at low Reynolds number, thus, it can be modeled through Stokes flow equations. The optimization procedure applies the Finite Element Method (FEM) to perform the physical analysis, and Sequential Linear Programming (SLP) as the optimization algorithm. At the end, a multi-physics analysis is proposed, through a multi-objective cost function, that combines both flow and heat dissipation efficiency optimization. Two-dimensional designs of fluidic devices are presented as examples to illustrate the method.

Keywords: Microchannel, Topology Optimization, Stokes Flow, Heat Exchangers; Linear Programming, Finite Element Method, Fluid flow devices.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Lista de Abreviaturas

Lista de Símbolos

1	Introdução	1
1.1	Justificativa.....	5
1.2	Objetivo.....	5
1.3	Organização da Dissertação	6
2	Método dos Elementos Finitos.....	7
2.1	Formulação Matemática.....	7
2.2	Equacionamento de Transferência de Calor.....	10
2.3	Formulação do MEF para escoamento de fluidos.....	11
2.3.1	Elemento Isoparamétrico de Quatro Nós	12
2.3.2	Discretização do domínio	14
2.3.3	Matriz de Rigidez do Elemento	16
2.3.4	Termo de Penalização	17
2.4	Formulação do MEF aplicado à equação da conservação de energia.....	18
3	Otimização Topológica (OT)	23
3.1	Introdução.....	23
3.1.1	Procedimento de projeto através de OT.....	26
3.2	Histórico da Aplicação da Otimização a Sistemas Fluidos.....	27
3.3	Domínio Fixo Estendido de Projeto	29
3.4	Modelo de material.....	31
3.4.1	Penalização	31
3.4.2	Método da Continuação	33
3.5	Modelo de Material adotado para o problema Fluido	34

3.6	Modelo de Material Adotado no Problema Térmico	36
3.7	Métodos de Otimização Aplicados ao Problema da OT	37
3.8	Aspectos da implementação do MOT	38
3.8.1	Escalas de Cinza	38
3.8.2	Tabuleiro de Xadrez.....	39
3.8.3	Dependência de Malha.....	39
3.8.4	Técnica de Projeção	40
4	Formulação da OT para projeto de dispositivos de canais.....	43
4.1	Função objetivo	43
4.1.1	Minimização de perda de carga	43
4.1.2	Maximização de Velocidade.....	44
4.1.3	Maximização da dissipação térmica	44
4.1.4	Função Multi-Objetivo	45
4.2	Restrições	45
4.3	Formulação dos Problemas de Otimização	46
5	Implementação Numérica.....	48
5.1	Funções Objetivo.....	48
5.1.1	Minimização de perda de carga	48
5.1.2	Maximização de Velocidade.....	48
5.1.3	Maximização da dissipação térmica	49
5.1.4	Função Multi-Objetivo	49
5.2	Programação Linear Sequencial (PLS)	49
5.2.1	Programação Linear (PL).....	51
5.3	Implementação do Método de Otimização Topológica	52
5.4	Gradientes da Função Objetivo (Análise de Sensibilidade).....	53
5.5	Pós-Processamento.....	59
5.5.1	Fluxo de Calor	60

6	Resultados	61
6.1	Canal em curva de 90° (“cotovelo”)	61
6.2	Bocal/Difusor	64
6.3	Canal Duplo.....	66
6.4	Escoamento externo	68
6.5	Canal com presença de obstáculos	69
6.6	Maximização de Velocidade em uma dada direção	70
6.7	Maximização de dissipação Térmica	72
6.8	Otimização Multi-objetiva	73
6.8.1	Canal unitário em larga escala ($L=1, H=1$).....	74
6.8.2	Canal em média escala ($L=0,1, H=0,1$)	83
6.8.3	Canal em pequena escala ($L=0,040, H=0,040$).....	85
7	Conclusões	89
7.1	Discussão e Conclusões	89
7.1.1	Otimização considerando somente o escoamento fluido	89
7.1.2	Otimização considerando escoamento fluido e dissipação térmica.....	90
7.2	Trabalhos Futuros.....	92
8	Referências Bibliográficas	94
Apêndice A	– Aspectos de convergência e verificação do MEF.....	102
A.1	Condições de Convergência LBB (Ladyzhenskaya–Babuska–Brezzi)	102
A.2	Verificação do MEF aplicado à Mecânica dos Fluidos.....	103
A.3	Verificação do MEF aplicado à equação de energia	105
A.4	Verificação do MEF considerando o problema multi-físico	107
Apêndice B	- Verificação dos gradientes da análise de sensibilidade	113
B.1	Método de Diferenças Finitas (MDF)	113
B.2	Comparação dos gradientes calculados	113

Lista de Figuras

Figura 1.1 - Dispositivos de análise bio-química, utilizando válvulas e microcanais (WEIBEL; et al., 2005).....	2
Figura 1.2 - Exemplo de microcanal com aplicação em estudos biológicos (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002).	2
Figura 1.3 - Misturador de reagentes com controle retro-alimentado: (a) esquema de controle; (b) e (c) diferentes níveis do sinal de controle. (adaptado de Kuczensky et al. (2009))	3
Figura 1.4 - Exemplo de projeto através da otimização topológica (BORRVALL; PETERSSON, 2003).	4
Figura 2.1 - Comportamento típico de um fluido em escoamento de Stokes.....	8
Figura 2.2 - Elementos de 4 nós: (a) parametrizado; (b) coordenadas globais.....	13
Figura 2.3 – Elemento quadrilátero com 4 nós de velocidade e 1 nó de pressão.	13
Figura 2.4 - Elementos quadriláterais: (a) Q4/1D (b) Q9/4C.	15
Figura 2.5 - Escoamento entre placas planas com penalização de velocidade na região central.	17
Figura 2.6 – Presença de oscilações na solução numérica de um problema convectivo-difusivo, em 1D.	20
Figura 2.7 – Efeito da função estabilizadora sobre a função de ponderação no método de Petrov-Galerkin.....	21
Figura 3.1 - Abordagens de Otimização.	24
Figura 3.2 - Procedimentos do MOT.	27
Figura 3.3 – Bocal estudado sob a ótica da otimização topológica. (BORRVALL; PETERSSON, 2003)	27
Figura 3.4 – Exemplo de seletor direcional de escoamento: (a) topologia obtida; (b) baixa velocidade ($Re=0.5$); (c) alta velocidade ($Re=50$). (adaptado de GERSBORG-HANSEN; SIGMUND; HABER, 2005)	28
Figura 3.5 - Projeto de reversor de fluxo 3D (AAGE et al., 2008).....	29
Figura 3.6 - Domínio Fixo Estendido de Projeto.....	30
Figura 3.7 - Influência do fator de penalização na propriedade efetiva do material.	32
Figura 3.8 - Representação esquemática da influência da penalização na solução da OT.....	33

Figura 3.9 - Modelo de escoamento entre 2 placas planas (GERSBORG-HANSEN; BENDSOE; SIGMUND, 2006).....	34
Figura 3.10 - Aplicação do modelo de material a um domínio (GERSBORG-HANSEN; BENDSOE; SIGMUND, 2006).	35
Figura 3.11 – Diferentes penalizações aplicadas à permeabilidade inversa (α).	36
Figura 3.12 - Surgimento de padrão de tabuleiro de xadrez (“ <i>checkerboard</i> ”).	39
Figura 3.13 - Efeitos da dependência de malha.	40
Figura 3.14 - Representação da área de abrangência da projeção, independente de malha: (a) “padrão”; (b) refinada.....	40
Figura 3.15 – Função de projeção.....	42
Figura 4.1 - Domínio de projeto e condições de contorno para minimização de perda de carga.....	46
Figura 4.2 - Domínio de projeto e condições de contorno para maximização de velocidade.....	47
Figura 4.3 - Domínio de otimização e condições de contorno.	47
Figura 5.1 - Aproximação linear da função e os limites móveis	51
Figura 5.2 - Fluxograma de implementação do MOT.	52
Figura 6.1 – Modelo de teste para canal em curva.	61
Figura 6.2 - Resultados obtidos para variação da fração de volume (V); (a) V=0.25; (b) V=0.4; (c) V=0.6; (d) V=0.7; (e) sem restrição de volume.	62
Figura 6.3 – Resultados no projeto otimizado do canal em curva (V=0.4); (a) vetores de velocidade; (b) módulo da velocidade; (c) campo de pressões.	62
Figura 6.4 - Curvas de convergência da solução numérica.	63
Figura 6.5 - Iterações ao longo da otimização.	63
Figura 6.6 - Verificação de dependência de malha: (a) 20x20 elementos; (b) 40x40 elementos; (c) 80x80 elementos.	64
Figura 6.7- Domínio de Projeto de Difusor de Escoamento.....	64
Figura 6.8 – Projeto de bocal para diferentes discretizações: (a) 60x60 elementos; (b) 120x120 elementos.	65
Figura 6.9 - Curvas de convergência no projeto do bocal.	65
Figura 6.10 – Resultados para campos: (a) de velocidade; (b) de pressão.	65
Figura 6.11 - Domínio de projeto de canal duplo.	66

Figura 6.12 - Resultados para o projeto de canal duplo: (a) $\delta=1$, malha de 40x40 elementos; (b) $\delta=1$, malha de 80x80 elementos; (c) $\delta=1,5$, malha de 60x40 elementos; (d) $\delta=1,5$, malha de 120x80 elementos.....	66
Figura 6.13 - Método da continuação (solução intermediária, obtida para $q=0,01$)..	67
Figura 6.14 - Resultados obtidos para a solução final; campos de: (a) velocidade; (b) pressão.	67
Figura 6.15 – Domínio de projeto para escoamento externo.....	68
Figura 6.16 - Perfis obtidos para diferentes frações de volume; (a) $V=0,85$; (b) $V=0,9$; (c) $V=0,95$;	68
Figura 6.17 - Resultados obtidos para a solução final; campos de: (a) velocidade; (b) pressão.	68
Figura 6.18 – Teste de canal em curva com inclusão de obstáculo.	69
Figura 6.19 – Canal em curva com obstáculo, para diferentes frações de volume; (a) $V=0,4$; (b) $V=0,6$; (c) $V=0,8$	69
Figura 6.20 - Canal contendo regiões fixas (obstáculos) no domínio de projeto. Medidas em mm.	69
Figura 6.21 - Canal com inclusão de obstáculos, para diferentes frações de volume; (a) $V=0,25$; (b) $V=0,5$	70
Figura 6.22 - Resultados para a topologia obtida: (a) módulo de velocidades; (b) campo de pressões.	70
Figura 6.23 - Domínio de projeto de um reversor de escoamento.....	71
Figura 6.24 - Distribuição de densidades: (a) 40x40 elementos; (b) 80x80 elementos.	71
Figura 6.25 - Curvas de convergência da velocidade no ponto de interesse (u_{out}). ...	71
Figura 6.26 – Resultados para a solução final do reversor: (a) módulo da velocidade; (b) componente horizontal da velocidade; (c) campo de pressões.	72
Figura 6.27 - Domínio de projeto de dissipador de calor.	72
Figura 6.28 - Distribuição de densidades: (a) sem projeção; (b) projeção, 40x40 elementos; (c) projeção, 80x80 elementos.	73
Figura 6.29 - Distribuição de temperaturas (a) e fluxo de calor total (b) no dissipador de calor.	73
Figura 6.30 - Domínio de projeto e condição de simetria.	74
Figura 6.31 - Resultados obtidos para canal de larga escala (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica).	75

Figura 6.32 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=50$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.....	76
Figura 6.33 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1000$ e $w=1$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.	77
Figura 6.34 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.	77
Figura 6.35 - Resultados obtidos para canal de larga escala com penalização alterada. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica)	78
Figura 6.36 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.	79
Figura 6.37 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=50$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.....	79
Figura 6.38 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,5m/s$	80
Figura 6.39 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25m/s$	80
Figura 6.40 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, com $v_{max}=0,25m/s$: (a) temperaturas; (b) velocidades; ((c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.....	81
Figura 6.41 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25m/s$. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica).....	82
Figura 6.42- Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, material sólido cobre, com $v_{max}=0,25m/s$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.....	83
Figura 6.43 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25m/s$	83
Figura 6.44 - Resultados obtidos para canal de média escala com velocidade $v_{max}=0,1m/s$	84
Figura 6.45 - Resultados obtidos para canal de média escala com velocidade $v_{max}=0,05m/s$	84

Figura 6.46 - Respostas da topologia obtida para $L=0,1$ e $H=0,1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, material sólido alumínio, com $v_{\max}=0,05\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo....	85
Figura 6.47 - Resultados obtidos para o canal em pequena escala e $v_{\max}=10\text{mm/s}$...	86
Figura 6.48 - Resultados obtidos para o canal em pequena escala e $v_{\max}=0,1\text{m/s}$. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica).....	86
Figura 6.49 - Respostas da topologia obtida para $L=0,04$ e $H=0,04$, com pesos $u=100$ e $w=1$, material sólido alumínio, com $v_{\max}=0,1\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.	87
Figura 6.50 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.	88
Figura A.1 - Comparação dos resultados: (a) problema de verificação; (b) campo de velocidades (Hughes; Franca; Balestra, 1986); (c) campo de pressões (Hughes; Franca; Balestra, 1986); (d) campo de velocidades (Q4/1D); (e) campo de pressões (Q4/1D); (f) campo de velocidades (Q9/4C); (g) campo de pressões (Q9/4C).	104
Figura A.2 – Domínio de verificação e condições de contorno.....	106
Figura A.3 – Comparação entre resultados: (a) Obtido na implementação (SUPG); (b) Exato; (c) Obtido utilizando SUPG (GALEAO; DO CARMO, 1988).....	106
Figura A.4 – Efeito da aplicação de diferentes métodos na formulação do MEF; (a) Solução exata; (b) Método de Galerkin; (c) Método SUPG. (extraído de BROOKS; HUGHES, 1982).....	107
Figura A.5 - Modelo de Verificação: (a) domínio de projeto; (b) topologia final obtida.	107
Figura A.6 - Modelo analisado: (a) geometria em CAD; (b) malha de elementos finitos.	108
Figura A.7 - Comparação dos resultados obtidos na rotina implementada (à esquerda), com resultados obtidos utilizando software comercial COMSOL® Multiphysics (à direita): (a) e (b) campo de velocidades; (c) e (d) campo de pressões; (e) e (f) distribuição de temperaturas; (g) e (h) módulo do fluxo de calor total.....	109
Figura A.8 - Comparação dos perfis de distribuição de: (a) módulo de velocidades ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$); (b) pressão ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$); (c) temperaturas o longo da linha de corte transversal ($y=0$); (d) temperaturas ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$).	110

Figura A.9 - Detalhe da malha do MEF: (a) "serrilhado" na discretização; (b) malha no COMSOL.	111
Figura A.10 - Distribuição de pressões no domínio completo: (a) sem pós-processamento; (b) depois do pós-processamento.....	112
Figura B.1 - Comparação dos gradientes da função objetivo para uma malha de 10x10 elementos.....	114
Figura B.2 - Comparação dos gradientes da função objetivo para uma malha de 20x20 elementos.....	114

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Propriedades termo-físicas dos materiais utilizados.....	61
Tabela 2 - Comparação da função objetivo para o canal duplo.....	67

Lista de Símbolos

Re	- número de Reynolds
k	- condutividade térmica
c_p	- calor específico
Pe	- número de Peclet
U	- velocidade média no elemento
L	- comprimento característico
h	- comprimento médio do elemento
$\mathbf{u}$	- campo de velocidades
$\mathbf{p}$	- campo de pressões
$\mathbf{f}$	- forças de campo aplicadas
$\mathbf{n}_T$	- matriz convectiva na equação da energia na forma discreta
$\mathbf{f}_t$	- fonte de calor
$\mathbf{q}$	- vetor de fluxo de calor
$\mathbf{T}$	- vetor de temperaturas
$\mathbf{B}$	- matriz de compatibilidade entre deslocamentos e deformações
$\mathbf{K}$	- matriz de rigidez do sistema fluido
$\mathbf{K}_t$	- matriz de rigidez do sistema térmico
$\mathbf{U}$	- vetor de velocidades
$\mathbf{N}_u$	- matriz de funções de forma de velocidade
$\mathbf{N}_p$	- matriz de funções de forma de pressão
w_{PG}	- função de ponderação da formulação de Petrov-Galerkin
w_G	- função de ponderação da formulação de Galerkin
w_E	- função de ponderação estabilizadora
m	- número de graus de liberdade de velocidade
n	- número de graus de liberdade de pressão

V	- volume do elemento
$\mathbf{t}$	- força de corpo atuando sobre o fluido
ρ	- pseudo-densidade
$C(\mathbf{x})$	- propriedade efetiva do material no modelo SIMP
$R_{\max}$	- raio de influência da projeção
R_{ij}	- distância entre os elementos i e j na projeção
w	- função peso da projeção
d_n	- variável de projeto
C_0	- propriedade base de material no modelo SIMP
w_t	- coeficiente de ponderação do termo térmico na função multi-objetivo
u_{out}	- função objetivo de maximização de velocidade
μ	- viscosidade dinâmica do fluido
κ	- permeabilidade do meio poroso
ρ_0	- pseudo-densidade da aproximação da série de Taylor na PLS
ρ_m	- densidade do material
α	- permeabilidade inversa do meio poroso
α_E	- função de ponderação da estabilização do termo convectivo
Ω	- domínio fixo de projeto
Ω_e	- domínio do elemento
$\partial\Omega$	- fronteira do domínio de projeto
Γ_e	- fronteiras do domínio do elemento
γ	- função objetivo de dissipação térmica
ξ	- eixo horizontal de coordenadas locais do elemento isoparamétrico
η	- eixo vertical de coordenadas locais do elemento isoparamétrico
Φ	- função-objetivo de dissipação de energia no fluido
Ψ	- função multi-objetivo

Lista de Abreviaturas

MOT	Método de Otimização Topológica
MEF	Método dos Elementos Finitos
SIMP	Simple Isotropic Material with Penalization
MAM	Método das Assíntotas Móveis
PL	Programação Linear
PLS	Programação Linear Sequencial
CO	Critério da Optimalidade
SUPG	Streamline-Upwind Petrov-Galerkin
CAD	Computer-Aided Design

1 Introdução

Aplicações de sistemas de canais para o transporte de fluidos em geral são das mais variadas, desde canais de grande escala, até aplicações mais recentes em escalas reduzidas, ou até mesmo em micro escala, os chamados microcanais.

Microcanais são elementos nos quais as dimensões dos canais são reduzidas, e que transportam um pequeno volume de fluido, com baixas velocidades de escoamento.

Neste trabalho estuda-se o projeto otimizado de dispositivos baseados em microcanais. Entre as aplicações práticas destes dispositivos destacam-se misturadores (JOHNSON; ROSS; LOCASCIO, 2002) e dosadores de reagentes químicos para controle de processos (KUCZENSKI et al., 2009, KIM et al., 2009), dispositivos de análise na indústria farmacêutica, sensores, sistemas biológicos (MITCHELL, 2001) e trocadores de calor em componentes eletrônicos.

Esses dispositivos são dependentes do desempenho do escoamento do fluido em seu interior, necessitando de canais que sejam eficientes, e por isso há a necessidade de buscar a otimização do projeto. Neste contexto, introduz-se o conceito do Método de Otimização Topológica (MOT), que é um método que atua sobre a topologia de um sistema, buscando a otimização do mesmo, segundo um dado critério e restrições. Basicamente, uma quantidade limitada de material é distribuída dentro de um sistema, de forma direcionada, constituindo sua topologia, e de forma a otimizá-lo de acordo com uma função objetivo escolhida, como será abordado adiante, neste documento.

Especificamente quando se trata do projeto de canais de escoamento de fluidos, deve-se buscar uma configuração otimizada, que diminua as dissipações de energia ao longo do canal, o que permite um melhor aproveitamento da energia gerada pelo sistema de bombeamento do fluido. Principalmente quando se trata de aplicações de pequena escala (WHITESIDES, 2006), nas quais geralmente a energia disponível é bastante limitada, a condução do fluido através de canais pode ficar prejudicada, devido às perdas de carga ao longo do conduto. O rápido desenvolvimento de componentes eletrônicos cada vez menores, como processadores de alto desempenho, ou que dissipam mais energia, como LED's de alta potência, gera a necessidade de projetos mais eficientes de trocadores de calor (KNIGHT et al., 1992; KLEINER; KUHN; HABERGER, 1995; LI; KLEINSTREUER, 2008).

Portanto, neste trabalho, será dado um enfoque especial a dispositivos baseados em microcanais, principalmente no projeto de trocadores de calor (KNIGHT et al., 1992;

KLEINER; KUHN; HABERGER, 1995; PENG; PETERSON, 1996; HARMS; KAZMIERCZAK; GERNER, 1999; JIANG; WONG; ZOHAR, 2001; QU; MUDAWAR, 2002a; 2002b; WEI; JOSHI, 2003; KOO; KLEINSTREUER, 2005; MAIGA et al., 2005; MORINI, 2005; JANG; CHOI, 2006; LI; PETERSON, 2006; GONZALEZ et al., 2007; WANG; CHENG; JIANG, 2008; HUSAIN; KIM, 2008).

Dentre outras aplicações, está a utilização destes canais em sistemas chamados “*lab-on-a-chip*” (FIGEYS; PINTO, 2000; GAO et al., 2001; ERICKSON; LI, 2004; STONE; STROOCK; AJDARI, 2004), que são conjuntos de sensores e medidores montados num conjunto reduzido, que permitem realizar análises, químicas ou biológicas, por exemplo, em um único sistema integrado. Neste caso, é possível por exemplo, medir a concentração ou o efeito de uma determinada substância no organismo de um paciente, ou a concentração ou detecção (WOOLEY et al., 1998) de um determinado reagente em uma amostra, tudo isso utilizando amostras muito pequenas. Os sistemas “*lab-on-a-chip*” têm sido utilizados no estudo e desenvolvimento de medicamentos (WEIGL; BARDELL; CABRERA, 2003; DITTRICH; MANZ, 2006), por exemplo. A Figura 1.1 mostra um exemplo de aplicação de dispositivos baseados em microcanais, em sistemas de detecção de presença de substâncias bio-químicas em amostras, sendo o fluido destacado em verde através da adição de um corante.

Figura 1.1 - Dispositivos de análise bio-química, utilizando válvulas e microcanais (WEIBEL; et al., 2005).

Figura 1.2 - Exemplo de microcanal com aplicação em estudos biológicos (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002).

A Figura 1.2 ilustra uma rede de microcanais fabricada *in situ* através de técnicas de litografia e fotopolimerização, com aplicações em análises biológicas.

Podem-se citar também as aplicações voltadas à ótica em escalas reduzidas (PSALTIS; QUAKE; YANG, 2006), em que, através da dosagem de componentes químicos em reação, é possível controlar as propriedades óticas (polarização, índice de refração, etc.) de um dispositivo. Além disso, existem estudos para integração de canais no estudo de MEMS (Mecanismos Micro-Eleto-Mecânicos), como no estudo de microbombas de fluxo (OLSSON; STEMME; STEMME, 2000; LAZAR; KARGER, 2002; TSAI; LIN, 2002; VERPOORTE; DE, 2003; SUZUKI; YONEYAMA, 2003).

Outro caso de aplicação em pequena escala, é o uso de microcanais em misturadores de reagentes bio-químicos (OKKELS; BRUUS, 2007), em válvulas e difusores (GERLACH; 1998) e válvulas biomiméticas (YU et al., 2001) que em geral operam com quantidades ínfimas de reagentes e necessitam de boa precisão, que é diretamente afetada pela eficiência dos canais utilizados. A Figura 1.3 mostra um misturador químico cuja concentração da mistura é controlada por um gerador de sinais.

Figura 1.3 - Misturador de reagentes com controle retro-alimentado: (a) esquema de controle; (b) e (c) diferentes níveis do sinal de controle. (adaptado de Kuczensky et al. (2009))

Em outra aplicação, Choban, et al. (2004) e Pattekar e Kothare (2004) utilizam o estudo de microcanais e escoamento laminar multi-fásico para desenvolvimento de células de combustível. Este estudo se baseia em um sistema semelhante ao mostrado na Figura 1.3.

É cada vez mais comum, a aplicação de métodos numéricos, em especial o Método dos Elementos Finitos (MEF) para a análise de sistemas fluidos, como os citados anteriormente. Este método tem sido bastante empregado (FRANCA; FREY, 1992; GARTLING; HICKOX; GIVLER, 1996; CODINA, 2001; HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986; ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002), e permite descrever o comportamento destes sistemas em situações mais

complexas, nas quais a aplicação de modelos analíticos fica, em geral, restrita pela necessidade de uma série de suposições e simplificações.

No que se refere à otimização de escoamentos, tanto externos quanto confinados, iniciaram-se estudos (PIRONNEAU, 1973; MOHAMMADI; PIRONNEAU, 2002; 2004; YAGI; KAWAHARA, 2007), utilizando-se principalmente conceitos de otimização de forma de canais e difusores, dentre outros dispositivos, buscando seu melhor desempenho. Mais recentemente esses estudos foram expandidos, sendo realizados através da otimização topológica (BENDSØE; SIGMUND, 2003), permitindo um estudo mais abrangente, devido à maior liberdade no estudo de possíveis configurações. A principal motivação de aplicar a otimização topológica neste projeto é a possibilidade de se obter soluções que nem sempre são “intuitivas” computacionalmente, como o exemplo mostrado na Figura 1.4 (BORRVALL; PETERSSON, 2003), no qual se minimiza a perda de carga ao longo dos canais, sendo o domínio inicial composto por duas entradas à esquerda e duas saídas à direita. Ambos os casos são submetidos a uma restrição de volume de material, na qual a razão entre o volume de fluido e o volume total é mantida igual nos dois casos.

Figura 1.4 - Exemplo de projeto através da otimização topológica (BORRVALL; PETERSSON, 2003).

Neste exemplo pode-se perceber que a solução otimizada varia de acordo com o comprimento do domínio de projeto. No exemplo da Fig. 1.4a, no qual o comprimento e a altura do domínio são iguais, tem-se que a solução ótima é constituída de dois canais retos, independentes entre si. Já para um canal de maior comprimento (Fig. 1.4b) a solução ótima é obtida com a união do escoamento na região central e posteriormente a separação na saída, gerando uma perda de carga menor do que se fossem conduzidos os dois canais separadamente. Este tipo de resultado pode ser obtido através da otimização topológica, que possibilita uma liberdade maior de modificação do domínio, podendo-se criar ou alterar fronteiras livremente. No caso de aplicação de otimização de forma ao problema, a solução final depende muito de uma pré-configuração, ou um "chute" inicial, o que pode limitar o espaço de soluções. Para atingir a solução ótima (Fig. 1.4b), através da otimização de forma,

seria necessário criar um “chute” inicial cuja configuração já previsse a união na região central, ou seja, seria necessário ter um conhecimento prévio básico da solução ótima, o que nem sempre é possível.

1.1 Justificativa

A principal motivação deste projeto é a aplicação do MOT no projeto de dispositivos cuja operação se baseia em canais de escoamento de fluidos, tais como trocadores de calor. Nestes dispositivos, o comportamento do escoamento no interior do canal tem papel determinante no desempenho dos mesmos, e por isso justifica-se a aplicação de um método de otimização buscando maximizar a eficiência do canal, definidas neste trabalho como: minimização da perda de carga, a maximização de velocidade num determinado ponto ou da transferência de calor promovida no canal.

A vantagem da aplicação do MOT é a maior liberdade e flexibilidade em relação a outros métodos, como o método de otimização de forma, principalmente na fase de projeto conceitual. O MOT possibilita o estudo de uma ampla gama de configurações para um determinado canal, não necessitando se “prender” a uma configuração pré-definida, conforme ilustrado na Figura 1.4. O algoritmo de otimização aplicado possibilita criar ou remover fronteiras e “buracos” no domínio de projeto, conferindo uma maior liberdade ao processo, sempre visando uma melhora no desempenho final do projeto.

1.2 Objetivo

O objetivo principal deste trabalho é estudar a aplicação do Método de Otimização Topológica no projeto de dispositivos baseados em microcanais de escoamento de fluido, buscando a otimização de tais dispositivos, sob o ponto de visto de seu desempenho em relação ao escoamento de fluido e da eficiência na transferência de calor.

Em geral, os canais, que são foco do estudo neste trabalho, transportam água, a baixas velocidades e, além disso, operam predominantemente sob regime permanente. Portanto, para a modelagem do escoamento será considerado o escoamento incompressível, de um fluido newtoniano, viscoso, em regime permanente, a baixo Reynolds ($Re < 1$), no qual os efeitos viscosos são predominantes sobre os efeitos inerciais, configurando o escoamento de Stokes. Em relação à transferência de calor, são considerados os processos de troca de calor através

de condução e convecção térmica forçada, considerando a operação em regime permanente. Neste trabalho, serão assumidas que as propriedades dos materiais envolvidos (viscosidade, condutividade, calor específico e densidade) não se alteram com a temperatura.

A implementação deste trabalho é desenvolvida sob a forma de um programa computacional, que possibilita o projeto sistemático e otimizado de dispositivos baseados em microcanais de escoamento de fluidos, utilizando o MOT.

1.3 Organização da Dissertação

A organização deste trabalho é realizada conforme descrito a seguir.

O capítulo 2 aborda o Método dos Elementos Finitos (MEF), mostrando suas principais características, bem como a fundamentação teórica relacionada à sua aplicação à mecânica dos fluidos e à troca de calor associada a um escoamento de fluido.

O capítulo 3 aborda os principais tópicos da Otimização Topológica, abrangendo uma breve introdução (item 3.1), com as abordagens de otimização, e uma descrição do método. A seguir é levantado um histórico da aplicação da Otimização Topológica a fluidos (item 3.2). São abordados os principais conceitos do MOT (item 3.5), como o domínio fixo estendido de projeto e o modelo de material e ao final (item 3.6) são abordados alguns aspectos na implementação, tais como a relaxação e a penalização. O capítulo 4 reúne a compilação da formulação da Otimização Topológica aplicada a domínios fluidos utilizada neste trabalho, incluindo a formulação térmica, abordando as funções-objetivo e multi-objetivo e as restrições aplicadas no modelo. O capítulo 5 abrange os aspectos da implementação numérica deste trabalho, essencialmente relacionadas ao MOT. No capítulo 6 são mostrados os resultados, comparando-os a resultados obtidos na literatura. Finalmente, no capítulo 7 são discutidos os resultados e é apresentada a conclusão e sugestões de trabalhos futuros. Ao final, nos apêndices são abordadas questões de convergência numérica do MEF, além da verificação dos gradientes da função objetivo.

2 Método dos Elementos Finitos

2.1 Formulação Matemática

Inicialmente serão apresentados dois modelos de escoamento de fluido, sendo cada um deles utilizado em diferentes tipos de aplicações. O primeiro deles é mais genérico, podendo descrever uma vasta gama de escoamentos, internos ou externos. O segundo modelo é utilizado em aplicações mais específicas, em que há o escoamento de um fluido em um meio poroso.

As equações que regem o movimento de uma partícula fluida no espaço são dadas sob a forma das equações de Navier-Stokes (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002). Estas equações são compostas pelas equações de quantidade de movimento (2.1) e de continuidade (2.2), que são descritas, em sua forma forte, por:

$$\rho_m \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = 0 \quad (2.2)$$

onde, ρ_m é a densidade do material, $\mathbf{u}$ é o campo de velocidades, p é o campo de pressões, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e $\mathbf{f}$ representa as forças de campo a que o fluido está submetido.

Visando um nicho específico de aplicação dentro do projeto proposto, que são os dispositivos de microcanais, são adotadas as seguintes hipóteses simplificadoras:

- Dispositivos operando em regime permanente, independente de transições temporais em sua operação (portanto, $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$);
- Escoamento incompressível;
- Operação típica em baixas velocidades, resultando em baixo número de Reynolds ($Re \leq 1$ - Forças Viscosas predominantes sobre as Forças Inerciais, onde: $Re = \frac{\rho_m UL}{\mu}$) e termo convectivo (não-linear) desprezível ($(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cong 0$);
- Viscosidade dinâmica constante no domínio ($\mu = \text{constante}$).

Considerando-se estas hipóteses e simplificações, as equações de Navier-Stokes (equações 2.1 e 2.2) reduzem-se à forma de um sistema equações diferenciais parciais elíptico linear, conhecido como a equação de Stokes (2.3):

$$\begin{aligned} -\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

A Figura 2.1 ilustra o comportamento típico de um fluido escoando ao redor de um cilindro com baixo número de Reynolds, em escoamento de Stokes.

Figura 2.1 - Comportamento típico de um fluido em escoamento de Stokes.

Tendo em vista que o objetivo deste trabalho é determinar uma topologia ótima de distribuição de fluido no interior de um domínio, é preciso trabalhar também com materiais sólidos durante o processo de otimização, de maneira a moldar o canal otimizado. Uma das diversas formas de se abordar este tipo de material "híbrido" é a utilização de um modelo de escoamento que permita controlar o seu comportamento, impondo algumas limitações locais ao escoamento, simulando assim, as regiões sólidas. Desta forma pode-se utilizar um modelo híbrido entre o material fluido e o material sólido. Propõe-se uma forma de obter esse controle através de um modelo de escoamento em meios porosos, utilizando-se uma porosidade variável do material (BORVALL; PETERSSON, 2002):.

A lei de Darcy descreve o escoamento de um fluido através de um meio poroso (WIKER, KLARBRING, BORRVALL, 2007), através da equação (2.4):

$$\begin{aligned} \alpha \mathbf{u} &= (\nabla p - \mathbf{f}) \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde α é a permeabilidade inversa do meio poroso.

Os dois modelos apresentados anteriormente (Eq. 2.3 e 2.4) possuem características que são interessantes em relação à aplicação do MOT, pois o primeiro permite descrever o comportamento do escoamento dentro do domínio, enquanto o segundo abre a possibilidade de emular um material sólido, restringindo o escoamento em regiões específicas. A equação de Brinkman (GARTLING; HICKOX; GIVLER, 1996), representa uma combinação da

equação de Stokes com a lei de Darcy, permitindo interpolar os aspectos destes escoamentos em uma única equação (BORRVALL; PETERSSON, 2003), sendo descrita por:

$$\begin{aligned}\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} &= \nabla p - \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0\end{aligned}\tag{2.5}$$

A aplicação da equação de Brinkman, no escopo deste projeto, é justificada pela necessidade de um modelo de material que permita descrever tanto materiais fluidos, quanto sólidos, os quais serão distribuídos dentro do domínio de otimização proposto. O modelo de material é um dos conceitos da aplicação do MOT, e é utilizado para descrever essa variação entre os diferentes materiais durante o processo de otimização. Esta equação é, portanto, utilizada como um recurso matemático para se obter ora o comportamento do fluido (permitindo o escoamento), ora para emular o comportamento de um material sólido (que não permita o escoamento), através do controle da permeabilidade do material poroso. Esse controle é feito através da *pseudo-densidade* (ρ), que é um parâmetro que permite determinar que tipo de material compõe um determinado ponto do domínio de otimização. A pseudo-densidade pode variar entre 0 e 1, e controla diretamente o valor da permeabilidade inversa (α) do material, conforme mostrado, posteriormente, na equação (3.3). No capítulo 3 é feito um detalhamento da função da pseudo-densidade no processo de otimização, bem como do conceito de modelo de material.

A permeabilidade inversa pode ser entendida como uma resistência ao escoamento do meio poroso, ou seja, quanto maior o valor de α , menor será o fluxo através desse ponto, e de forma contrária, quanto menor o valor de α , menor será a resistência ao escoamento, constituindo, no limite, um escoamento submetido apenas às dissipações viscosas.

Assim sendo, num determinado ponto, tem-se que, quando $\rho \sim 0$ (material “sólido”), o valor de α (permeabilidade inversa) é muito alto, impedindo o escoamento do fluido através da mesma. Ao contrário, quando $\rho \sim 1$ (material fluido), tem-se uma alta permeabilidade (α é desprezível) de modo que seja retomado um escoamento de Stokes “puro”. De forma simplificada, o modelo de Brinkman garante que as regiões “sólidas” tenham velocidade de escoamento nulas, enquanto as regiões fluidas, tenham o seu comportamento regido pelo modelo de escoamento de Stokes.

Como principais exemplos da potencialidade deste conceito da equação de Brinkman, pode-se citar a criação de obstáculos “virtuais” ao escoamento e a reprodução de condições de aderência e impermeabilidade nas paredes. Mais especificamente, é possível criar regiões fixas, como paredes ou obstáculos no interior do domínio, sem que seja necessário impor

condições de contorno de Dirichlet extras, tornando mais versátil a mudança do domínio de projeto.

2.2 Equacionamento de Transferência de Calor

Os fenômenos de troca de calor estão diretamente relacionados à aplicação de canais de escoamento de fluidos, principalmente em trocadores de calor, que aproveitam os efeitos de convecção térmica para aumentar a eficiência de troca de calor. Em referência a essa relação próxima entre o escoamento de um fluido e as trocas de calor promovidas por ele, torna-se importante o estudo dos processos de transferência de calor entre o fluido e o canal que o transporta. Um modelo robusto para o cálculo da interação termo-fluida é a chamada equação de conservação da energia (INCROPERA, 2006).

A equação de conservação da energia (Eq. 2.6) permite descrever os fenômenos envolvidos no processo de troca de calor em um fluido sob escoamento.

$$\rho_m c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_m (c_p \mathbf{u}) \cdot \nabla T + f_T = k \nabla^2 T \quad (2.6)$$

Esta equação é composta por um termo difusivo (condução térmica), que é controlado pela condutividade térmica do material (k), e por um termo convectivo, que é controlado diretamente pela velocidade do escoamento ($\mathbf{u}$) e pelo calor específico do material (c_p), além de uma fonte de calor (f_T). Em regiões de baixa velocidade, há predomínio da troca de calor por condução térmica (difusão), ao passo que, em regiões de velocidade mais alta, há predomínio dos efeitos convectivos na troca de calor. Da mesma forma que as equações de movimento, adota-se a hipótese de operação em regime permanente ($\partial T / \partial t = 0$).

Existem formulações que consideram os problemas de escoamento e troca de calor de forma acoplada, porém são mais complexas de se obter uma solução, exatamente pelo fato de serem acopladas. Neste trabalho, estuda-se estes 2 fenômenos de forma desacoplada, de tal modo que primeiro é determinado o campo de velocidades do sistema e com estas informações é obtida a solução do problema térmico. Portanto, conhecendo-se a distribuição de velocidades dentro de um canal, e as propriedades térmicas dos materiais que o compõem, é possível determinar a distribuição de temperaturas no interior deste domínio, através da equação de energia.

Conhecendo tanto a distribuição de velocidades quanto de temperaturas no canal, pode-se otimizá-lo, de modo que possua, ao mesmo tempo, um desempenho otimizado quanto às

perdas de carga e à dissipação térmica. Assim, é possível obter projetos de trocadores de calor, baseados em canais de escoamento de fluido, mais eficientes, e que permitam uma maior troca de calor.

2.3 Formulação do MEF para escoamento de fluidos

O MEF é um método numérico bastante difundido, sendo muito robusto e genérico, capaz de resolver diversos tipos de equações diferenciais parciais, as quais descrevem uma grande gama de fenômenos físicos.

Neste trabalho, o MEF é utilizado para a obtenção dos campos de velocidades e pressões no interior do domínio analisado. Estas informações são utilizadas na OT para o cálculo da função objetivo, bem como o cálculo dos gradientes da função objetivo ao longo do processo de otimização, conforme detalhado no capítulo 4.

Destacam-se para esta aplicação em mecânica dos fluidos, Zienkiewicz e Taylor (2002) e Glowinski e Pironneau (1992), que abordam as principais características, tipos de elementos e aspectos da implementação do MEF. Donea e Huerta (2003) descrevem a aplicação do MEF em escoamentos viscosos e incompressíveis.

Um importante trabalho foi realizado por Hughes, Franca e Balestra (1986) e revisitado por Aranha et al. (2003), versando sobre instabilidades numéricas oriundas da discretização espacial no domínio do MEF quando aplicado o método de Galerkin, conforme discutido posteriormente.

A partir da equação 2.5, pode-se obter a formulação do problema, pelo método dos resíduos ponderados, (com $\mathbf{v}$ e q sendo funções de ponderação de velocidades e pressão virtuais, arbitrárias impostas), descrita por (BORVALL; PETERSSON, 2002):

$$\begin{aligned} a_\alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) &= \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle \\ b(\mathbf{u}, q) &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde:

$$a_\alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \alpha(\rho) \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \mu \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega \quad (2.8)$$

$$b(\mathbf{v}, p) = - \int_{\Omega} p (\nabla \cdot \mathbf{v}) d\Omega \quad (2.9)$$

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega \quad (2.10)$$

A aplicação do Método dos Elementos Finitos consiste na definição de uma solução aproximada para a formulação fraca do problema, baseada na discretização do modelo contínuo. Essa discretização é realizada tomando-se a solução contínua em um conjunto de pontos discretos (nós), representados por variáveis nodais, de modo a aproximar da melhor forma possível a resposta real. As soluções para velocidades e pressões (contínuas) são transformadas utilizando funções aproximadoras em função das variáveis nodais (discretas) do problema, por:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{N}_u^T \mathbf{U}_i \quad (2.11)$$

$$\tilde{p} = \mathbf{N}_p^T \mathbf{P}_i \quad (2.12)$$

onde $\tilde{\mathbf{u}}$ e $\tilde{p}$ são as soluções aproximadas, $\mathbf{N}_u$ e $\mathbf{N}_p$ as funções aproximadoras e $\mathbf{U}_i$ e $\mathbf{P}_i$ são as variáveis nodais discretas.

Aplicando-se a solução aproximada (Eq. 2.11 e 2.12) à equação 2.7, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha(\rho) \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega + \mu \int_{\Omega} \nabla \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{p} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}) d\Omega &= \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega \\ \int_{\Omega} \tilde{q} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Reescrevendo a equação em forma matricial, e aplicadas as funções aproximadoras (Eq. 2.11 e 2.12) pelo método de Galerkin, tem-se, em relação aos vetores de variáveis nodais $\mathbf{u}$ e $\mathbf{p}$, para um elemento finito genérico:

$$\begin{bmatrix} \int_{\Omega_e} \alpha(\rho) \mathbf{N}_u \mathbf{N}_u d\Omega + \mu \int_{\Omega_e} \nabla \mathbf{N}_u \cdot \nabla \mathbf{N}_u d\Omega & - \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}_p)^T \nabla \cdot \mathbf{N}_u d\Omega \\ \int_{\Omega_e} (\nabla \mathbf{N}_u)^T \mathbf{N}_p d\Omega & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}_u)^T \mathbf{f} d\Omega \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (2.14)$$

2.3.1 Elemento Isoparamétrico de Quatro Nós

Os elementos finitos utilizados nesta aplicação do MEF são elementos do tipo isoparamétrico e permitem parametrizar um elemento de forma quadrilátera, “transformando-o” num elemento quadrado, por exemplo, através de uma função de transformação de coordenadas. O elemento isoparamétrico tem como característica que as funções de interpolação associadas aos graus de liberdade (deslocamentos, velocidades, etc.) de seus nós são equivalentes às funções de forma que descrevem as coordenadas locais em função de suas coordenadas nodais.

A vantagem do elemento isoparamétrico reside na possibilidade de calcular o comportamento do sistema nas chamadas coordenadas naturais (ou locais normalizadas), ξ e

η , simplificando o equacionamento e depois, convertê-lo às coordenadas globais (x, y) , para enfim, obter o comportamento global do sistema. A Figura 2.2 ilustra o elemento “real”, descrito nas coordenadas globais em (b), e o elemento parametrizado, descrito em coordenadas locais normalizadas (ou naturais) do elemento, em (a).

Figura 2.2 - Elementos de 4 nós: (a) parametrizado; (b) coordenadas globais.

Na implementação da equação de Brinkman (Eq. 2.5), o elemento finito bidimensional, apresentado na Figura 2.3, possui 4 nós de velocidade (1, 2, 3 e 4), com 2 graus de liberdade (velocidade em x e y) por nó e 1 nó de pressão (5), com 1 grau de liberdade.

Figura 2.3 – Elemento quadrilátero com 4 nós de velocidade e 1 nó de pressão.

As funções de forma deste elemento, que interpolam os valores nodais no interior do elemento, são do tipo linear, constituindo um elemento bilinear. Isso significa que a interpolação das velocidades intermediárias entre dois nós adjacentes é feita através de uma função linear.

A relação entre a distribuição contínua das variáveis no elemento e os seus valores nodais é dada por:

$$V(x, y) = \mathbf{N}^T \mathbf{V}_i \quad (2.15)$$

onde $V(x, y)$ é a distribuição da variável em cada ponto do elemento (contínuo), $\mathbf{V}_i$ é o vetor do valor das variáveis em cada nó (discreto) e $\mathbf{N}$ é a matriz de forma, composta pelas funções de

forma do elemento para cada nó, que nesse caso é composta por funções bilineares, conforme a equação 2.16:

$$\begin{aligned} N_1(\xi, \eta) &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)}{4} & N_2(\xi, \eta) &= \frac{(1+\xi)(1-\eta)}{4} \\ N_3(\xi, \eta) &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)}{4} & N_4(\xi, \eta) &= \frac{(1-\xi)(1+\eta)}{4} \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde ξ e η são as coordenadas locais do elemento (vide Fig. 2.2).

Para a distribuição de pressão, é considerado apenas um nó no interior do elemento (Fig. 2.2), o que conduz a uma distribuição constante da pressão no elemento. Cabe ressaltar que a adoção de apenas um nó por elemento leva a uma distribuição descontínua do campo de pressões no sistema, o que, porém, não prejudica o equacionamento proposto.

2.3.2 Discretização do domínio

Na aplicação do MEF na Mecânica dos Fluidos, a discretização espacial em elementos finitos, especialmente quanto à ordem de interpolação dos elementos escolhidos, é determinante na resposta da análise. Assim como em problemas da mecânica dos sólidos aplicados a materiais incompressíveis, o estudo de escoamentos incompressíveis, como é o caso, apresenta alguns conhecidos problemas de instabilidade na solução, resultantes da escolha do tipo de elemento finito na formulação do problema (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002; DONEA; HUERTA, 2003). Estes dois problemas envolvem a chamada formulação mista, que no caso do escoamento, relaciona o campo de velocidades e o campo de pressões, e se manifestam em especial quando se aplica o método de Galerkin no equacionamento do MEF.

Os problemas de instabilidade na solução, que afetam principalmente a determinação do campo de pressões do domínio, foram estudados por Ladyzhenskaya (1971), Babuska (1971) e Brezzi (1974), e geraram as condições de convergência "*div-stability condition*" ou "*Ladyzhenskaya–Babuska–Brezzi (LBB) condition*" (vide APÊNDICE A para mais detalhes). Basicamente existem combinações de discretização de velocidade e pressão que geram incompatibilidades entre seus respectivos espaços de solução, restringindo-os. Tais incompatibilidades, em geral, se manifestam com o surgimento de oscilações espúrias no campo de pressões do escoamento, e que, dependendo do caso, comprometem a confiabilidade dos resultados.

Conhecido este problema em relação à influência da discretização na convergência da resposta do sistema, foram realizadas análises com duas discretizações diferentes para o elemento quadrilátero na implementação do MEF para a equação de Stokes, uma utilizando-se 4 nós de velocidade e 1 de pressão, descontínuo (Q4/1D) e outra utilizando-se 9 nós de velocidade e 4 de pressão, contínuo (Q9/4C), conforme ilustrado na Figura 2.4.

Figura 2.4 - Elementos quadriláteros: (a) Q4/1D (b) Q9/4C.

A diferença entre os dois elementos mostrados acima, além do número de nós, está no grau do polinômio que interpola os valores das variáveis entre os nós. No primeiro elemento a interpolação entre os nós no interior do elemento é linear. Já no segundo elemento, a interpolação entre os nós é quadrática. Esta diferença entre estes 2 elementos se reflete numa maior precisão do elemento biquadrático (Q9/4C), porém com um maior custo computacional, à medida que são necessários mais nós para sua formação.

De forma geral, as condições de convergência LBB impõem que a relação entre a ordem do polinômio de interpolação do espaço de velocidades (P_u) e a ordem do polinômio do espaço de pressões (P_p) deve ser tal que $(P_u - P_p) > 1$.

O elemento Q9/4C obedece às condições de convergência LBB e, conseqüentemente, espera-se que apresente os resultados corretamente, sem a presença de oscilações espúrias na distribuição de pressão. O elemento Q4/1D não segue as condições de convergência LBB, o que se manifesta na presença de oscilações nas pressões ao longo do domínio. Em relação ao campo de velocidades, observa-se que os resultados obtidos são idênticos em ambos os casos. Tendo em vista a aplicação do MEF dentro de um processo iterativo de otimização, e visando uma maior definição (resolução) nos resultados, neste trabalho é adotado o elemento Q4/1D, por apresentar uma boa relação entre precisão do campo de velocidades e custo computacional, sendo este último um fator de grande peso na adoção deste elemento. Mais detalhes sobre as condições LBB e a verificação do MEF são apresentados no Apêndice A.

2.3.3 Matriz de Rigidez do Elemento

A partir das equações de Brinkman (Eq. 2.5) escritas em sua forma variacional (Eq. 2.7), desenvolve-se a formulação do modelo em elementos finitos, conforme detalhado em Borrvall e Petersson (2003). Escrevendo na forma matricial, e considerando a viscosidade constante no domínio, tem-se:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K} & -\mathbf{G}^T \\ -\mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}_G} \underbrace{\begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{Bmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}}_{\mathbf{F}_G} \quad (2.17)$$

onde:

$$\mathbf{K}_e = \int_{V_e} (\mu \mathbf{B}^T \mathbf{I}_0 \mathbf{B}) dV_e + \int_{V_e} (\alpha(\rho) \mathbf{N}^T \mathbf{N}) dV_e = \sum_{i=1}^{ne} \mu \mathbf{K}_s + \sum_{i=1}^{ne} \alpha(\rho) \mathbf{K}_a \quad (2.18)$$

$$\mathbf{G}_e = \int_{V_e} ((\nabla \mathbf{N}_u)^T \mathbf{N}_p) dV_e \quad (2.19)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_e = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_u^T \rho \mathbf{g} d\Omega_e + \int_{\Gamma_e} \mathbf{N}_u^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma_e \quad (2.20)$$

$$\mathbf{I}_0 = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

O termo $\mathbf{B}$ é a matriz que transforma as velocidades a partir do tensor de taxa de deformação, da mesma forma que os deslocamentos são relacionados com deformações em análises de elementos finitos aplicados à mecânica dos sólidos, conforme retomado por Bendsøe e Sigmund (2003) e mostrado na Eq. 2.24. $\mathbf{N}_u$ e $\mathbf{N}_p$ são as chamadas matrizes de forma do elemento fluido, compostas por suas funções de forma de velocidade (Eq. 2.16) e pressão, respectivamente. Nesta aplicação, com um elemento quadrilateral bilinear de 4 nós de velocidade por elemento, as matrizes $\mathbf{N}_u$, $\mathbf{N}_p$ e $\mathbf{B}$ são explicitadas a seguir. (Eq. 2.22 a 2.24). Os vetores das grandezas nodais são dados por $\mathbf{u}$ e $\mathbf{p}$, descritos pelas equações 2.25 e 2.26 respectivamente. Na implementação do cálculo dos termos que compõem a Eq. 2.17 foi utilizada a tradicional integração numérica de Gauss-Legendre (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002), com 2x2 pontos de integração por elemento.

$$\mathbf{N}_u = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{N}_p = [1] \quad (2.23)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_4}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_4}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial x} & \frac{\partial N_4}{\partial y} & \frac{\partial N_4}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

$$\mathbf{u} = \{u_1 \quad v_1 \quad u_2 \quad v_2 \quad u_3 \quad v_3 \quad u_4 \quad v_4\}^t \quad (2.25)$$

$$\mathbf{p} = \{p\} \quad (2.26)$$

Na equação 2.18, a matriz de rigidez $\mathbf{K}_e$ apresenta a combinação do escoamento de Stokes (1º termo) e do escoamento através de meios porosos (2º termo). Destaca-se a dependência do segundo termo em relação ao parâmetro α (permeabilidade inversa do meio) e que é função de ρ (pseudo-densidade). Conforme discutido anteriormente, para um valor de $\rho \sim 1$ (material fluido), $\alpha \sim 0$, e o segundo termo torna-se desprezível, resultando apenas o termo do escoamento de Stokes não-perturbado. Para valores de $\rho \sim 0$ (material sólido), α torna-se muito alto, agindo como um termo de alto amortecimento, ou resistência, impedindo o escoamento no elemento em questão. O segundo termo da equação 2.18 pode ser analisado como um termo de penalização que garante que a velocidade seja nula nos pontos penalizados, ou seja, garante que nas regiões sólidas, não haja escoamento.

O termo $\mathbf{G}$, na equação 2.17, é a representação na forma matricial do operador divergente na equação da continuidade e o seu transposto ($\mathbf{G}^T$) é o correspondente ao operador gradiente.

2.3.4 Termo de Penalização

A implementação do MEF com o termo de penalização (α) permite que apenas alterando-se o parâmetro ρ , obtenha-se um comportamento de sólido, ou de fluido. Este efeito é mostrado na Figura 2.5, onde é modelado o escoamento entre 2 placas com um obstáculo.

Figura 2.5 - Escoamento entre placas planas com penalização de velocidade na região central.

Na figura pode-se visualizar a imposição de $\rho=0$ na região central do domínio, criando-se uma região de baixa permeabilidade, permitindo emular um obstáculo sólido colocado nessa região. A velocidade ($\mathbf{u}$) ao centro é penalizada, fazendo-a tender a zero. A penalização permite restringir a velocidade em regiões específicas, sem que para isso seja necessário forçar-lhes através da aplicação de condições de contorno, e ainda assim mantendo-se as condições de aderência ($v_t = 0$) e impermeabilidade ($v_n = 0$), características nas paredes. Essa implementação permite manter as condições de contorno fixas durante toda a otimização, sem a necessidade de alterá-las a cada iteração. Ao mesmo tempo, possibilita a fácil criação de paredes dentro do domínio, delimitando um canal, ou um obstáculo em seu interior, conforme já ilustrado na figura anterior, simplesmente pela alteração da variável ρ .

2.4 Formulação do MEF aplicado à equação da conservação de energia

A equação da conservação de energia (Eq. 2.6), mostrada anteriormente, é uma equação convectivo-difusiva, que descreve os processos de transferência de calor num determinado meio. Nesta aplicação, o fenômeno de transporte de calor é ditado por duas grandezas principais: a condutividade térmica (k), associada à difusão térmica e o calor específico (c_p), associado à convecção térmica, que está relacionada à velocidade de escoamento do fluido no domínio de estudo.

Os problemas convectivo-difusivos são bastante estudados na literatura, sendo um dos mais importantes estudos realizados, por Brooks e Hughes (1982).

A formulação da equação de conservação da energia térmica, obtida a partir do método dos resíduos ponderados (PATANKAR, 1990), implica em encontrar T que seja solução de:

$$A(T, \eta) = F(\eta) \quad (2.27)$$

onde:

$$A(T, \eta) = \int_V \left[k \nabla T \cdot \nabla \eta + \rho_m c_p (\mathbf{u} \cdot \nabla T) \eta \right] dV \quad (2.28)$$

$$F(\eta) = \int_V q \eta dV \quad (2.29)$$

onde, ρ_m é a densidade do material, c_p é o calor específico e k é a sua condutividade térmica e η é uma temperatura virtual arbitrária aplicada e T a solução de equilíbrio.

Reescrevendo a equação da energia em sua forma fraca e considerando a função aproximadora genérica $\tilde{T}$ para a temperatura, tem-se (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002):

$$\int_V \tilde{T} [\rho_m c_p (\nabla T \cdot \mathbf{u})^T] dV + \int_V \tilde{T} [\nabla \cdot (k \nabla T)] dV = - \int_V \tilde{T} q_n dS + \int_V \tilde{T} Q dV \quad (2.30)$$

A partir do modelo contínuo, descrito na forma fraca, aplica-se uma solução baseada em uma função aproximadora da forma:

$$\begin{aligned} \tilde{T} &= \mathbf{w}_G \mathbf{T}_i \\ \mathbf{w}_G &= [N_1 \quad N_2 \quad N_3 \quad N_4] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Os termos N_1 , N_2 , N_3 e N_4 são os mesmos aplicados na formulação do elemento fluido, apresentados anteriormente na Eq. 2.16.

Substituindo a Eq. 2.31 em 2.30, a equação é aproximada no domínio discreto, e tem-se:

$$\left[\int_{V_e} \mathbf{w}_G [\rho_m c_p (\mathbf{N}_u \mathbf{u})^T \nabla \mathbf{w}_G] dV_e + \int_{V_e} [(\nabla \mathbf{w}_G)^T (k \nabla \mathbf{w}_G)^T] dV_e \right] \{\mathbf{T}\} = \left\{ \int_{S_e} \mathbf{w}_G^T \mathbf{q}_n dS_e + \int_{V_e} \mathbf{w}_G^T Q dV_e \right\} \quad (2.32)$$

A aplicação do MEF a equações de natureza convectiva-difusiva, apresenta freqüentemente instabilidades numéricas, principalmente nos casos em que o termo convectivo (primeiro termo da Eq. 2.30) é dominante sobre o termo difusivo (segundo termo da Eq. 2.30). Estas instabilidades se revelam sob a forma de oscilações espúrias na distribuição das temperaturas, conforme ilustrado na Fig. 2.6, na solução de um exemplo unidimensional (1D).

Estas oscilações são resultado da aplicação do método de Galerkin no equacionamento do MEF, bem como em problemas com discretização insuficiente, resolvidos utilizando o Método das Diferenças Finitas (MDF), como é o caso da Fig. 2.6, na qual é ilustrada a solução para diferentes problemas convectivo-difusivos 1D. Em casos pura ou predominantemente difusivos, a aplicação do Método de Galerkin na formulação do MEF, resulta em matrizes de rigidez térmica simétricas, que garantem uma solução aproximada, de mínimo resíduo. Entretanto, nos casos em que há predomínio do termo convectivo, a matriz de rigidez perde a simetria, resultando em uma solução degradada pela presença de oscilações nas regiões de maior gradiente de temperaturas. Isso ocorre pois nos problemas predominantemente convectivos, existem regiões nas quais os gradientes da solução tornam-se muito elevados e devido à discretização do problema, não é possível "acompanhá-los", gerando este tipo de comportamento oscilatório. Em geral, é necessária uma discretização muito grande do domínio para a eliminação destas oscilações.

Figura 2.6 – Presença de oscilações na solução numérica de um problema convectivo-difusivo, em 1D.

Porém, no caso de um processo de otimização iterativo, é praticamente inviável aumentar drasticamente a discretização do domínio de projeto, mesmo que de forma localizada, pois a princípio não se conhece a solução final nem as regiões onde é necessária uma maior discretização, e por isso, em geral, as malhas aplicadas na otimização de sistemas são mantidas fixas ao longo das iterações.

Uma outra alternativa, proposta por Brooks e Hughes (1982) é a aplicação do método de Petrov-Galerkin na implementação do MEF, associado a um esquema “*upwind*”, seguindo a direção e sentido do fenômeno convectivo, sem a necessidade de alterar a discretização do problema. O esquema “*upwind*” também pode ser aplicado nos problemas resolvidos através do MDF, atenuando as instabilidades previamente citadas.

Cabe neste momento, introduzir o número de Peclet (Pe), dado por:

$$Pe = \frac{\rho_m c_p UL}{k} = Re Pr \quad (2.33)$$

onde U é a velocidade média, e L o comprimento característico, Re é o número de Reynolds e Pr o número de Prandtl.

O número de Peclet é basicamente o que define a razão entre os efeitos convectivos sobre os efeitos difusivos em equações de natureza convectivo-difusiva, sendo que para altos valores de Pe , tem-se o domínio da convecção, enquanto que, para baixos valores de Pe , tem-se o domínio dos efeitos difusivos. Conforme mostrado na Fig. 2.6, à medida que o Pe aumenta, começam a surgir instabilidades na solução numérica, principalmente em regiões de gradiente mais alto.

A formulação de Petrov-Galerkin difere da formulação tradicional de Galerkin, pois ao contrário da última citada, as funções de ponderação utilizadas na formulação são distintas das funções de forma do elemento (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002). Em especial, tem-se uma relação do tipo:

$$w_{PG} = w_G + w_E \quad (2.34)$$

onde, w_{PG} é a nova função de ponderação aplicada ao termo convectivo, w_G é a função de ponderação tradicionalmente aplicada (idêntica à função de forma do elemento) e w_E é uma função estabilizadora.

A função estabilizadora é uma função do Pe do problema, sendo que quanto maior o Pe , maior será a estabilização, minimizando as oscilações numéricas, sem que seja necessário aumentar a discretização do domínio. Além de ser função do Pe , a função de estabilização é "direcionada" no sentido da velocidade do escoamento, garantindo que o termo estabilizador siga a direção de interesse, pois dessa forma, evita-se uma difusividade numérica excessiva na direção perpendicular ao escoamento, o que poderia levar a soluções “suaves”, porém, imprecisas, e por isso, a escolha da função estabilizadora deve ser feita com cautela. A função estabilizadora atua sobre a função peso original, aumentando o “peso” do nó de onde vem o escoamento (“*upwind*”), e diminuindo o “peso” do nó para o qual o escoamento caminha (“*downwind*”). A Figura 2.7 mostra os efeitos da função estabilizadora nas funções de ponderação tradicionais (Galerkin) em um nó.

Figura 2.7 – Efeito da função estabilizadora sobre a função de ponderação no método de Petrov-Galerkin.

A função estabilizadora w_E , para um dado elemento, é dada por (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002):

$$w_E = \alpha_E \frac{h}{2} \frac{\bar{u}(\partial w_G / \partial x) + \bar{v}(\partial w_G / \partial y)}{|\mathbf{U}_e|} = \alpha_E \frac{h}{2} \frac{\mathbf{U}_e \cdot \nabla w_G}{|\mathbf{U}_e|} \quad (2.35)$$

$$\alpha_E = \coth Pe - \frac{1}{Pe} \quad (2.36)$$

$$Pe = \frac{\rho_m c_p |\mathbf{U}_e| h}{2k} \quad (2.37)$$

$$|\mathbf{U}_e| = (\bar{u}^2 + \bar{v}^2)^{1/2} \quad (2.38)$$

onde h é o comprimento médio do elemento, $\mathbf{U}_e$ é o vetor da velocidade média no centro do elemento, e $\bar{u}$ e $\bar{v}$ são suas componentes horizontais e verticais, respectivamente.

Combinando o esquema “*upwind*” com a formulação de Petrov-Galerkin, tem origem o método *Streamline-Upwind Petrov-Galerkin* (SUPG), que ajuda a prevenir o surgimento das oscilações espúrias na solução.

Neste trabalho, a análise térmica utiliza um elemento isoparamétrico de 4 nós, idêntico ao elemento mostrado anteriormente no item 2.2.2, exceto pelo fato de que cada nó, neste caso, possui apenas 1 grau de liberdade, que é a temperatura T . A discretização espacial utilizada também é idêntica, utilizando-se os mesmos nós anteriormente utilizados na geração da malha de velocidade para o cálculo das temperaturas.

Desta forma, a partir da equação da conservação da energia térmica escrita na forma fraca (2.30), obtém-se a forma matricial (Eq. 2.39), e calculam-se as matrizes de rigidez conforme mostrado a seguir.

$$\underbrace{(\mathbf{n}_T + \mathbf{k})}_{\mathbf{K}_t} \mathbf{T} = \mathbf{f}_T \quad (2.39)$$

$$\mathbf{n}_{Te} = \int_V (\mathbf{w}_{PG})^T \rho_m c_p (\mathbf{w}_G \mathbf{u})^T (\nabla \mathbf{w}_G) dV \quad (2.40)$$

$$\mathbf{k}_e = \int_V (\nabla \mathbf{w}_G)^T k (\nabla \mathbf{w}_G) dV \quad (2.41)$$

$$\mathbf{f}_{Te} = \int_V (\mathbf{w}_G)^T Q dV \quad (2.42)$$

$$\mathbf{T} = \{T_1 \quad T_2 \quad T_3 \quad T_4\}^T \quad (2.43)$$

Novamente é utilizado o método de integração numérica de Gauss-Legendre para o cálculo das integrais acima, com 2x2 pontos de integração.

No Apêndice A são mostrados os resultados de verificação também para o MEF térmico.

3 Otimização Topológica (OT)

3.1 Introdução

A otimização topológica (OT) é um método de otimização de destaque nos projetos de Engenharia em todo o mundo, sendo robusto e eficiente. A principal característica da otimização topológica é a forma de distribuição de uma determinada quantidade de material no interior de um domínio de projeto, permitindo adicionar ou remover material de uma forma livre, porém, direcionada, objetivando a obtenção da topologia ótima do sistema.

Os métodos de otimização estão muito presentes na Engenharia, permitindo a obtenção de projetos mais eficientes, o que reflete em economia de recursos e de tempo. Existem diferentes abordagens que podem ser aplicadas no processo de otimização, sendo as três principais: otimização paramétrica, otimização de forma e otimização topológica, sendo cada uma mais adequada a um nicho de aplicações específicas, com objetivos distintos.

Na otimização paramétrica, cria-se um modelo básico do sistema, descrito através de diversos parâmetros (geométricos, de material, físicos). Estes parâmetros são as variáveis de projeto da otimização, e são alterados até se atingir uma solução otimizada para o sistema. Cabe ressaltar que nesta abordagem, a capacidade de otimização está diretamente ligada ao nível de detalhamento do modelo proposto e principalmente, aos parâmetros que o constituem.

A otimização de forma, conforme o próprio nome sugere, opera alterando a forma dos contornos de um determinado domínio. Define-se uma configuração inicial, composta pelos contornos que delimitam o sistema, e que podem ter sua forma alterada ao longo do processo de otimização. De maneira semelhante à otimização paramétrica, é necessária a criação de uma configuração prévia, contendo uma forma pré-definida, que serve de base à otimização. Desse modo, a otimização de forma depende muito do nível de detalhamento do “chute” inicial, o que leva a uma limitação de configurações estudadas na otimização, pois estas acabam ficando, de certo modo, presas à forma inicial. Por este motivo, em geral, este tipo de otimização é aplicada após a obtenção de uma configuração já mais aprimorada, sendo ideal para o refinamento de uma solução previamente otimizada, por exemplo, através da otimização topológica.

A otimização topológica é uma abordagem que difere das anteriores, pois não depende de uma configuração inicial pré-definida. Na OT busca-se a topologia ótima de um sistema

através da distribuição de material dentro de um domínio de projeto. Isso permite distribuir livremente o material disponível em qualquer ponto do sistema, permitindo colocar ou retirar material de qualquer região do domínio de projeto, sempre visando um melhor desempenho e que seja compatível com os requisitos de projeto. Essa característica da OT permite uma maior liberdade e torna-a mais versátil, em comparação às demais técnicas, previamente citadas, pois confere à OT uma maior generalidade, tornando-a mais adequada às etapas de projeto conceitual.

A Figura 3.1 ilustra a diferença entre as abordagens citadas, em diferentes aplicações na área de mecânica dos fluidos, voltadas à minimização de perda de carga em canais.

Figura 3.1 - Abordagens de Otimização.

O Método de Otimização Topológica (MOT), ou simplesmente Otimização Topológica (OT), consiste num método de otimização cuja finalidade é projetar a topologia ótima de um determinado sistema (estrutural, fluídico, elétrico, etc.) visando atingir uma determinada característica, definida através de uma função objetivo, ou função de custo (ex.: maximizar a rigidez de uma estrutura, ou minimizar a dissipação de energia dentro de um canal de escoamento de fluido).

Um dos conceitos básicos do MOT é o domínio estendido fixo de projeto, dentro do qual se deseja obter uma solução ótima. Dentro deste domínio, é distribuído um material (ex.: sólido, fluido, etc.) de uma forma direcionada e controlada, de tal modo que, ao final do processo, obtenha-se um sistema otimizado segundo uma determinada característica, obedecendo em geral, uma limitação no volume de material utilizado. Uma abordagem tradicional do MOT permite que cada ponto do domínio seja caracterizado como "vazio" ou "preenchido", caracterizando uma distribuição discreta, de '0' ou '1', ou seja, é possível definir, em cada ponto, a presença ou ausência do material. Neste momento, cabe definir,

mais detalhadamente, o papel da pseudo-densidade (ρ), citada anteriormente no capítulo 2. A pseudo-densidade é a variável que controla em cada ponto do domínio de projeto, qual é o tipo de material presente e conseqüentemente, suas características físicas.

Neste trabalho, especificamente, a distribuição de material mescla regiões de fluido (preenchido) e regiões sólidas (“não-fluidas”). Esta distribuição do material é realizada através de um algoritmo de otimização, sujeito a um conjunto de restrições (tipicamente restrição de volume de material), de forma iterativa, visando otimizar uma função objetivo previamente definida. O algoritmo de otimização realiza uma busca sistematizada e direcionada pelo ponto ótimo, tornando a análise mais rápida e objetiva. Do contrário, variando as configurações uma a uma, seriam necessárias milhares de análises até se obter uma configuração ótima, consumindo grande quantidade de tempo e recursos.

Em conjunto com o algoritmo de otimização, é necessário aplicar um método de análise, que possibilite analisar o fenômeno e os efeitos estudados. Tipicamente o método de análise adotado é o Método dos Elementos Finitos (MEF) (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002), podendo ser aplicado numa grande gama de análises, com generalidade. O MEF é um método bastante genérico quanto a sua aplicação, conforme já discutido anteriormente, e isso foi determinante na aplicação dentro do MOT, pois possibilita o estudo de diversos problemas. Além disso, devido à utilização de uma sub-divisão do domínio de projeto, a aplicação do MEF na otimização topológica tornou-se bastante proveitosa (BENDSØE; SIGMUND, 2003), pois comumente utiliza-se essa mesma discretização, da malha de elementos finitos, na definição das regiões de ‘0’ e ‘1’.

O MOT teve seu desenvolvimento acelerado no final da década de 90 (BENDSØE; KIKUCHI, 1988), principalmente na área estrutural, e desde então tem se difundido, e suas aplicações têm aumentado significativamente.

Mais recentemente, outras áreas foram desenvolvidas, e o conceito da OT foi expandido. Dentre elas, pode-se citar, projeto de mecanismos flexíveis (BENDSØE; SIGMUND, 2003; CARBONARI; SILVA; NISHIWAKI, 2005; 2006), projeto de trocadores de calor (GERSBORG-HANSEN; BENDSOE; SIGMUND, 2006; BRUNS, 2007; EVGRAFOV et al., 2009), projetos em bioengenharia (LIMA, 2006), projetos de atuadores com Materiais de Gradação Funcional (MGF) (CARBONARI, 2007), entre outros.

Neste projeto, será dado destaque à aplicação do MOT na mecânica dos fluidos. Neste caso, a idéia central é a distribuição de material fluido e “sólido” dentro do domínio, de modo a se otimizar uma função objetivo determinada. Exemplos típicos deste tipo de aplicação são a minimização do arrasto em fólios em escoamento de Stokes (PIRONNEAU, 1973), e projeto

otimizado do caminho do fluido (ex.: água) através de um canal. Nesta área foram desenvolvidos estudos por Borrvall e Petersson (2003), Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005), Bendsøe e Sigmund (2003) e Guest e Prévost (2006a, 2006b).

3.1.1 Procedimento de projeto através de OT

A implementação tradicional da OT consiste basicamente da combinação de um método de análise (ex.: MEF), e um algoritmo de otimização numérica, como o critério da optimalidade, de aplicação mais específica, até métodos de programação matemática, mais genéricos em sua aplicação, conforme será mais detalhado adiante.

Inicialmente define-se o domínio de projeto (Ω), que é a região na qual será realizado o processo de otimização.

A partir da definição do domínio de projeto, é feita a discretização do mesmo, podendo ser utilizada, em princípio, qualquer tipo de discretização, de modo a atender melhor os requisitos do projeto. Especificamente neste projeto, o domínio é discretizado numa malha estruturada e uniforme de elementos finitos quadrilaterais, sendo também definidos os nós que compõem cada elemento, com seus respectivos graus de liberdade. Além disso, define-se, para cada elemento, uma variável de projeto, ρ (pseudo-densidade), que define, em essência, o tipo de material que compõe o elemento (sólido ou fluido).

Após a discretização do domínio, definem-se as condições de contorno do problema, que são as condições pré-fixadas no domínio, como regiões de parede (velocidade nula) e de entrada e saída (velocidades prescritas), bem como possíveis forças envolvidas. Neste projeto, as principais condições a serem definidas são as condições de entrada e saída do escoamento, sob a forma de velocidades prescritas na fronteira do domínio ($\partial\Omega$), e temperaturas e fluxos de calor, no caso de transferência de calor.

O processo de otimização tem como primeira etapa a análise do problema proposto através do MEF, calculando-se os campos de velocidades, pressão e a temperatura em todo o domínio. A partir desses resultados, calcula-se a função-objetivo, que permite mensurar o “desempenho” do sistema em relação às características ou objetivos desejados. Além da função objetivo, calcula-se o gradiente da função objetivo e das restrições em relação à variável de projeto, juntamente com uma verificação das restrições impostas ao problema de otimização. O algoritmo de otimização modifica as variáveis de projeto de acordo com as informações calculadas, direcionando a topologia, iterativamente, para uma solução otimizada. Fisicamente, a alteração nas variáveis de projeto, consiste na distribuição do

material sólido/fluido ao longo do domínio. Este processo é realizado até a convergência da função objetivo.

Após a convergência do processo, e obtida a topologia ótima, os resultados passam por um pós-processamento, resultando na configuração final da topologia. O resultado pós-processado pode então ser analisado mais uma vez para verificação das suas características para que finalmente possa ser fabricado.

A Figura 3.2 mostra os procedimentos do projeto através do MOT aplicado a domínios fluidos.

Figura 3.2 - Procedimentos do MOT.

3.2 Histórico da Aplicação da Otimização a Sistemas Fluidos

Um dos trabalhos pioneiros envolvendo a otimização aplicada à mecânica dos fluidos foi realizado por Pironneau (1973), com a aplicação de otimização de forma em escoamentos de Stokes externos, ao redor de aerofólios. Buscava-se minimizar o arrasto em perfis de asa, ou minimizar a perda de carga em bocais/difusores (Figura 3.3). Trabalhos desenvolvidos posteriormente nesta área e que tiveram destaque, foram realizados por Mohammadi e Pironneau (2002, 2004), Yagi e Kawahara (2007) e Duan, Ma e Zhang (2008a, 2008b). Em outra abordagem, Volpe. et al. (2009) apresenta o estudo do projeto inverso de perfis aerodinâmicos e de asas, focado em minimização de interferência entre fuselagem e asa e minimização dos efeitos de ondas de choque. Estes estudos foram o ponto de partida para a implementação da otimização topológica aplicada a fluidos.

Figura 3.3 – Bocal estudado sob a ótica da otimização topológica. (BORRVALL; PETERSSON, 2003)

Borrvall e Petersson (2003) desenvolveram a primeira aplicação da otimização topológica no projeto de canais para escoamento de fluidos, mais especificamente de fluido Newtoniano e viscoso, em regime permanente. O modelo de escoamento utilizado neste trabalho é linear, baseado no escoamento de Stokes, aplicado a escoamento com baixo número de Reynolds, no qual os efeitos viscosos são predominantes sobre os efeitos inerciais no escoamento. O objetivo básico deste estudo era encontrar um canal que minimizasse a perda de carga do fluido sob certas condições de entrada e saída do fluido.

Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005) e Olesen, Okkels e Bruus (2006) estenderam esse trabalho através do estudo de uma faixa mais ampla de número de Reynolds, considerando efeitos de inércia do fluido, e não-linearidade, através da aplicação da equação de Navier-Stokes. Além da minimização da perda de carga, esta implementação permitia o projeto de dispositivos baseados na variação da velocidade do fluido no canal, como seletores direcionais de escoamento (Fig. 3.4), nos quais, de acordo com a velocidade, o fluido segue uma direção diferente através do canal.

Figura 3.4 – Exemplo de seletor direcional de escoamento: (a) topologia obtida; (b) baixa velocidade ($Re=0.5$); (c) alta velocidade ($Re=50$). (adaptado de GERSBORG-HANSEN; SIGMUND; HABER, 2005)

Evgrafov (2005) retoma o modelo aplicado por Borrvall e Petersson (2002) e compara o modelo de Brinkman, utilizado nas aplicações da otimização topológica realizadas anteriormente, com uma abordagem diferenciada, considerando a viscosidade do fluido como uma das variáveis do problema. Posteriormente foi estudada a extensão da OT a fluidos com efeito de compressibilidade (EVGRAFOV, 2006b) e os efeitos da aplicação da otimização topológica a fluidos não-Newtonianos (PINGEN; MAUTE, 2009). Wiker, Klarbring e Borrvall (2007) propuseram a otimização específica, apenas das regiões de escoamento de Stokes e regiões de predomínio de meios porosos (Darcy), ao invés de permitir a livre variação da permeabilidade, utilizada anteriormente por Borrvall e Petersson (2002). Outra abordagem diferente foi estudada para o modelo de material, atuando no projeto de estruturas com máxima permeabilidade ao escoamento, porém em um nível de micro-estruturas otimizadas (GUEST; PRÉVOST, 2006a; 2007).

Já Klarbring, et al. (2003) e Evgrafov (2006a), por sua vez, estudaram a otimização de redes de distribuição de um fluido ou gás por meio de tubulações (“flow network”), buscando minimizar a perda de carga ao longo desse sistema composto por uma rede de tubulações. A otimização opera sobre a rede de conexões e as dimensões das tubulações. Estudo semelhante foi realizado por Aragon et al. (2008), para otimização de redes vasculares de fluxo, através de algoritmos genéticos. Ainda utilizando algoritmos genéticos, Dipama, Teyssedou e Sorin (2008), estudam o projeto de trocadores de calor. Em contrapartida à utilização mais comum do MEF, Pinggen, Evgrafov e Maute (2007) utilizam o método de Lattice Boltzmann, que é derivado de um comportamento estatístico médio das partículas, baseado na teoria cinética de gases, na implementação do MOT.

Posteriormente foram realizados estudos de aplicação expandindo a problemas de larga escala, com grande número de elementos, através de computação paralela, (AAGE et al., 2008), incluindo domínios tri-dimensionais, como ilustrado na Figura 3.5.

Figura 3.5 - Projeto de reversor de fluxo 3D (AAGE et al., 2008).

3.3 Domínio Fixo Estendido de Projeto

A otimização topológica se apóia em dois conceitos básicos, sendo o primeiro deles, o domínio fixo estendido de projeto. Isto significa que o processo de otimização é realizado dentro de uma região fixa pré-determinada, na qual o material pode ser “adicionado” ou “removido” livremente, conforme ilustrado na Figura 3.6. A solução ótima (Ω_d) é desconhecida a priori. O domínio fixo estendido gera uma região de trabalho estendida (Ω) para o MOT, em torno da região onde se espera que a topologia ótima (Ω_d) se encontre. Dessa forma, através desse domínio estendido, cobre-se uma região maior na análise de soluções, permitindo uma maior liberdade de distribuição de material, que ainda garante que a solução

otimizada (Ω_d) esteja contida nesse espaço de soluções possíveis. Outra vantagem deste domínio estendido é que não é necessário adaptar a malha de projeto conforme a solução obtida, ao longo das iterações, uma vez que ela mantém-se fixa. Por outro lado, o domínio fixo estendido também acarreta a necessidade de se trabalhar sempre com um domínio com mais elementos do que seria o estritamente "necessário", e isso reflete em um aumento no custo computacional. Apesar disso, esta estratégia de trabalho é eficiente e facilita a implementação.

A Figura 3.6 ilustra o conceito de domínio fixo estendido de projeto.

Figura 3.6 - Domínio Fixo Estendido de Projeto.

Na implementação da OT, o principal método de análise utilizado é o MEF, que é bastante robusto e permite analisar geometrias complexas. O domínio fixo estendido é discretizado em elementos finitos sendo que esta discretização é mantida fixa ao longo da otimização, ou seja, o algoritmo de otimização não altera o modelo de elementos finitos, apenas a distribuição de material dentro destes elementos.

Uma observação importante a ser feita na otimização topológica, especialmente em relação ao MEF, é a escolha do tipo de elemento e a discretização adotada na otimização. Neste trabalho adotou-se um elemento finito de menor grau de interpolação (bilinear), que possui um menor custo computacional, ao invés de elementos de maior grau (biquadrático, por exemplo), conforme descrito anteriormente, na seção 2.3.2. A utilização de elementos de baixa ordem necessita de uma maior discretização da malha do sistema, e por isso são utilizados mais elementos na composição da mesma. Especificamente neste trabalho, em que cada elemento está associado individualmente a uma região sólida ou fluida, essa maior discretização reflete numa maior "resolução" na definição da topologia ótima. Isso porque quanto mais elementos são utilizados, estes serão proporcionalmente menores, e mais precisa pode ser a definição das regiões sólidas/fluidas.

3.4 Modelo de material

O segundo conceito básico do MOT é o modelo de material. O problema discreto de otimização (“0” ou “1”) é mal-posto, e tem como característica não possuir solução única, apresentando uma dependência da discretização do problema, ou seja, para cada discretização haverá uma solução diferente. Neste contexto, torna-se desejável adotar um modelo contínuo do problema, bem-posto, que permita obter uma solução única. Esse modelo que descreve a variação contínua de material é denominado modelo de material.

O modelo de material define quais são os tipos de material utilizados na otimização, e como ocorre a transição contínua entre esses diferentes tipos de material e suas propriedades, ou seja, de que forma é constituído o material em cada ponto, bem como suas características. A partir do modelo de material, é possível realizar a distribuição de material no domínio fixo estendido, e obter a topologia otimizada do sistema.

Destacam-se duas abordagens de modelos de material, sendo uma delas baseada na otimização do modelo de microestrutura que compõe o material, que utilizam métodos de homogeneização (CHENG; OLHOFF, 1981), enquanto a outra é baseada em modelos de material artificiais, como o chamado método das densidades (BENDSØE, 1989). O método das densidades, também conhecido como SIMP (“Solid Isotropic Material with Penalization”), permite relaxar o problema discreto e dessa forma possibilita a solução do problema de otimização. A relaxação no SIMP permite alterar uma propriedade do material num determinado ponto, de acordo com a variação contínua da densidade (0 a 1) nesta região, através de uma relação do tipo:

$$C(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x})C_0 \quad (3.1)$$

A equação (3.1) define que, a partir da propriedade C_0 (módulo de elasticidade, permeabilidade, condutividade térmica, etc.) do material base, isotrópico, é possível definir propriedades intermediárias de acordo com o valor da pseudo-densidade ρ ($0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1$). Matematicamente têm-se materiais com propriedades efetivas ($C(\mathbf{x})$) intermediárias, neste caso variando linearmente de 0 até o valor C_0 , constituindo um modelo artificial de material

3.4.1 Penalização

A relaxação do problema transforma o problema discreto, que em geral não tem solução única, em um problema contínuo e assim possibilita a solução do problema de otimização. Porém, ao introduzi-la, cria-se a liberdade para que a variável de projeto assumam valores

intermediários, conhecidos como “escalas de cinza”. Esses valores intermediários, porém, nem sempre são factíveis, do ponto de vista da manufatura e precisam ser controlados. É desejável que a solução final seja constituída apenas pelo material base (fluido) ou regiões “vazias” (sólido), reconstituindo um caráter discreto no projeto, evitando materiais com características intermediárias. Uma das formas de se fazer isso é penalizar as densidades intermediárias, “forçando-as” a um valor de 0 ou 1. Ao forçar as pseudo-densidades para valores extremos, numericamente, pode haver uma “degradação” da solução ótima, no sentido de que uma transição mais gradativa e contínua da solução poderia apresentar um melhor desempenho, quando comparada à solução 0-1. Porém, conforme colocado anteriormente, é necessário penalizar esses valores intermediários em favor de um projeto factível do ponto de vista da engenharia de manufatura.

No modelo SIMP, para evitar a formação de regiões de escalas de cinza, decorrentes da relaxação do problema, propôs-se a penalização da equação 3.1, conforme (BENDSØE, 1989):

$$C(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x})^p C_0 \quad (3.2)$$

onde p é o fator de penalização que proporciona uma redução no aparecimento de regiões de escalas de cinza, deixando a distribuição mais próxima de um caráter discreto (Figura 3.7).

Figura 3.7 - Influência do fator de penalização na propriedade efetiva do material.

Na figura 3.7 é possível visualizar o efeito da penalização em relação à distribuição dos valores de pseudo-densidades. A penalização “força” os valores intermediários a um dos extremos de propriedades efetivas. Nota-se que para valores maiores de penalização, a curva da propriedade efetiva do material fica mais próxima de um “degrau”, característico de uma

distribuição discreta. Entretanto, valores muito elevados do fator de penalização podem levar a otimização excessivamente próxima ao modelo discreto e novamente aos problemas característicos de uma abordagem discreta. Portanto, o valor da penalização deve ser bem avaliado e escolhido de forma moderada.

3.4.2 Método da Continuação

Em geral, os métodos de penalização são acompanhados da utilização do método de continuação, no qual o valor da penalização é modificado gradativamente, de um valor inicial até um valor final, limite. O método de continuação é utilizado pois, geralmente, os métodos de penalização tendem a alterar a função objetivo, podendo introduzir mínimos locais (Figura 3.8). A continuação das penalidades é feita ao longo do processo iterativo. Normalmente inicia-se com um valor de penalização pequeno, como por exemplo, $p=1$, e após convergir para uma solução, o valor de p é aumentado ($p=2$ ou $p=3$, por exemplo), para então convergir a uma segunda solução, e assim sucessivamente.

O método de continuação é necessário para que a solução MOT não convirja para um mínimo local indesejável, comum em soluções com valores muito altos de p .

Figura 3.8 - Representação esquemática da influência da penalização na solução da OT.

Uma representação esquemática dessa situação é ilustrada na Fig. 3.8, referente a uma aplicação mais “tradicional” do método SIMP, conforme a equação 3.2, mostrada anteriormente. Verifica-se que a função $f(\rho)$ é convexa, enquanto a função $f(\rho^3)$ é “mal comportada”, possuindo vários ótimos locais. Assim, iniciando com $p=1$ é possível que o método de otimização convirja para uma região próxima de um ótimo global, e posteriormente, com o aumento do valor de p , a solução convirja para o ótimo global de fato, do problema.

3.5 Modelo de Material adotado para o problema Fluido

Um dos focos, neste projeto, é a otimização de um canal para escoamento de fluidos. Portanto, o modelo de material deve abranger um comportamento de fluido em algumas regiões, permitindo o escoamento, enquanto em outras simule um comportamento de material sólido, emulando as paredes do canal, impedindo o escoamento do fluido através dele.

Para o caso do escoamento de fluidos, Borrvall e Petersson (2003) aplicam a relaxação, permitindo uma variação contínua das variáveis de projeto no domínio ($0 \leq \rho(x) \leq 1$), levando a uma variação na permeabilidade de cada elemento. Conseqüentemente a velocidade do escoamento em cada elemento é alterado, obtendo-se as nuances entre um material sólido e fluido.

Figura 3.9 - Modelo de escoamento entre 2 placas planas (GERSBORG-HANSEN; BENDSOE; SIGMUND, 2006).

Borrvall e Petersson (2003) definem um modelo de material a partir do escoamento de fluido confinado entre duas placas planas (Figura 3.9), baseado no modelo de escoamento de Couette plenamente desenvolvido, com a presença de um perfil de velocidades parabólico entre elas. Este modelo é baseado no escoamento de Stokes em 3D, considerando a distância entre as placas muito menor que o comprimento característico das mesmas. Desta forma, obtém-se um modelo bi-dimensional simplificado. Através da variação da distância entre as placas, tem-se controle sobre o escoamento, permitindo uma maior ou menor passagem de fluido.

O controle do escoamento é feito em cada elemento, ou seja, é possível controlar individualmente o escoamento em cada elemento e conseqüentemente a velocidade. Seguindo este princípio, conforme a distância entre as placas tende a zero, a passagem de fluido entre elas é restringida, e no limite, não há escoamento, simulando o comportamento de um elemento sólido. A Figura 3.10 ilustra um exemplo de domínio, que é composto por um conjunto de placas planas (13x13 elementos), sendo a distância entre cada placa inferior e superior variável. Na região central (mais escura) as placas estão mais próximas entre si, o

que provoca uma maior resistência ao escoamento e, portanto, um menor fluxo do fluido, enquanto nas bordas (acinzentadas) a distância entre elas é maior, permitindo um fluxo maior.

Figura 3.10 - Aplicação do modelo de material a um domínio (GERSBORG-HANSEN; BENDSOE; SIGMUND, 2006).

Este modelo de material está matematicamente relacionado ao modelo de Brinkman (GARTLING; HICKOX; GIVLER, 1996) que consiste basicamente na interpolação de um escoamento livre e um modelo de escoamento através de meio poroso, através do qual, pode-se controlar o escoamento do fluido, definindo a vazão de fluido que atravessa esse meio, conforme mostrado no capítulo 2. De forma simplificada, este modelo permite diferenciar regiões de baixa permeabilidade (~ 0), impedindo a passagem de fluido, de regiões de alta permeabilidade, que permitem um escoamento livre (desimpedido).

Para controlar o comportamento de cada elemento dentro do domínio de projeto, utiliza-se o conceito de pseudo-densidade (ρ). A pseudo-densidade é a variável correspondente ao valor da distância entre as placas planas $h(x)$, e basicamente define se um elemento é fluido ($\rho=1$, permite o escoamento livre) ou se é sólido ($\rho=0$, impede o escoamento totalmente). A pseudo-densidade é, portanto, a variável de projeto no MOT. A otimização será aplicada na definição dos valores ótimos de pseudo-densidade ao longo do domínio.

Aplica-se uma forma alternativa de penalização, cuja idéia é semelhante ao modelo SIMP. Neste caso, a penalização é feita através da relação entre a pseudo-densidade ρ e a permeabilidade inversa α , dada na equação (3.3).

$$\alpha(\rho) = \alpha_U + (\alpha_L - \alpha_U) \rho^{\frac{1+q}{\rho+q}} \quad (3.3)$$

onde $q>0$ é o parâmetro que controla a penalização, ρ é valor da pseudo-densidade no elemento, e $\alpha_U=2,5\mu/0,01^2$ e $\alpha_L=2,5\mu/100^2$, com $\mu=0,001$, são os limites superiores e inferiores da permeabilidade inversa.

Na Figura 3.11 pode-se visualizar o efeito da penalização (q) sobre a permeabilidade do elemento (α^{-1}). Pode-se notar que à medida que a penalização é aumentada, os valores

intermediários de ρ (entre 0 e 1) são “minimizados”, de modo a retomar um caráter mais próximo do discreto, obtendo-se um “degrau”, porém, sem uma descontinuidade. O comportamento dos valores intermediários é “forçado” a um comportamento de sólido ou fluido, conforme mostrado na figura.

Figura 3.11 – Diferentes penalizações aplicadas à permeabilidade inversa (α).

Quanto menor o valor de q , o problema tende a apresentar mais escalas de cinza na solução, ao passo que valores maiores de q , levam a uma solução mais definida, sem a presença de grandes regiões de cinza. No entanto, a utilização de valores elevados de penalização pode levar a solução a mínimos locais, conforme já mostrado e detalhado no item 3.4.2.

3.6 Modelo de Material Adotado no Problema Térmico

O modelo de material adotado no problema térmico é o SIMP, no qual a pseudo-densidade atua diretamente sobre os tensores constitutivos da condutividade térmica (k) e calor específico (c_p). Esta relação segue o modelo detalhado na seção 3.4.2, na qual basicamente a propriedade em questão é determinada pela interpolação entre as propriedades dos dois materiais (sólido e líquido). Desse modo, é possível se obter as propriedades efetivas que se aproximam de um material puramente sólido ($\rho \sim 0$), ou um material líquido ($\rho \sim 1$) e ainda materiais com propriedades intermediárias, para os valores de pseudo-densidade entre 0 e 1.

Cabe ressaltar que neste projeto, a pseudo-densidade (ρ) é compartilhada durante a otimização fluida e térmica. Isso significa que um único valor de ρ define as propriedades do

material tanto do ponto de vista do escoamento, quanto em relação às suas características térmicas, em cada ponto do domínio fixo estendido.

Em relação às propriedades térmicas dos materiais envolvidos na otimização, tem-se a interpolação das propriedades de dois materiais (A e B), em função da pseudo-densidade (ρ) segundo uma relação do tipo:

$$\phi(\rho(x)) = \rho(x)^p \phi_A + [1 - \rho(x)^p] \phi_B \quad (3.4)$$

onde ϕ é uma propriedade efetiva genérica, podendo representar tanto a condutividade térmica (k) quanto o calor específico (c_p) e densidade do material (ρ_m), ϕ_A e ϕ_B , são as propriedades-base dos materiais A e B, respectivamente, e p é o fator de penalização do modelo SIMP.

3.7 Métodos de Otimização Aplicados ao Problema da OT

Existem diversos algoritmos desenvolvidos para a utilização em processos de otimização em geral, cuja aplicação depende de muitos fatores, como o número de variáveis do problema e a generalidade de sua aplicação.

Os primeiros trabalhos envolvendo o MOT, por Bendsøe e Kikuchi (1988), foram desenvolvidos utilizando como otimizador um método baseado no Critério da Optimalidade (CO).

Os métodos baseados no CO, são algoritmos empíricos de atualização das variáveis de projeto, que se apóiam na condição de estacionaridade da função Lagrangeana do problema (BENDSØE; SIGMUND, 2003). Este tipo de método tornou-se bastante popular em aplicações de OT, devido a sua grande eficiência. Em contrapartida, o CO tem como característica ser muito específico em suas aplicações, uma vez que o procedimento de atualização das variáveis de projeto deve ser deduzido para cada problema. Por isso, a aplicação do CO em problemas mais genéricos fica comprometida, em especial, em problemas com grande número de restrições.

Existem alternativas à especificidade dos métodos baseados no CO, cuja aplicação é bem mais genérica. São os chamados métodos de programação matemática. Tais otimizadores podem ser aplicados a problemas mais diversos pois o critério de atualização das variáveis não é específico, como o CO.

Dentre os métodos de programação matemática aplicados à OT, destacam-se o Método das Assintotas Móveis (MAM) (SVANBERG; 1987) e a Programação Linear Sequencial (PLS) (VANDERPLAATZ 1984; HAFTKA; GURDAL; KAMAT, 1990).

A PLS consiste numa abordagem na qual o problema original é reproduzido em pequenas aproximações lineares que são resolvidas sequencialmente, permitindo obter a solução do problema. Para a resolução dos sub-problemas lineares, aplica-se um algoritmo de programação linear (PL), como por exemplo, o SIMPLEX (PRESS et al., 1999). A PLS será descrita mais adiante, no item 5.2. O MAM, proposto por Svanberg (1987), opera de modo semelhante à PLS, dividindo o problema original em aproximações mais simples, porém, nesse caso, são utilizadas aproximações não-lineares e convexas.

Neste projeto foi utilizado o método da PL, cuja disponibilidade e implementação na literatura são fartas, além de ser encontrado em bibliotecas de softwares comerciais, como o caso do *MatLab*®.

3.8 Aspectos da implementação do MOT

Aqui são abordados alguns aspectos comuns na aplicação do MOT, em geral, tais como as escalas de cinza e o padrão de tabuleiro, além da dependência de malha. Tais aspectos são comuns em aplicações na área estrutural e sua presença é ilustrada em um exemplo de otimização de uma viga bi-apoiada com carregamento central, conforme será mostrado a seguir. Entretanto, alguns destes aspectos, como por exemplo, o padrão de tabuleiro, apesar de comuns na área estrutural, não são presentes em problemas aplicados a fluidos (BORRVALL; PETERSSON, 2003), conforme será mostrado posteriormente.

3.8.1 Escalas de Cinza

As regiões de escala de cinza são inerentes à relaxação do problema devido à variação da variável de projeto de forma contínua, levando ao surgimento dessas regiões de valores intermediários. As escalas de cinza são consistentes dentro do modelo de material utilizado, porém, conforme descrito anteriormente, do ponto de vista de Engenharia, ainda são pouco factíveis, e por isso são utilizados artifícios, como a penalização, para controlar o surgimento dessas regiões.

3.8.2 Tabuleiro de Xadrez

Outro aspecto comum no MOT é surgimento do padrão de tabuleiro de xadrez (“*checkerboard*”) (Figura 3.12), que é uma instabilidade mais comum em problemas de otimização estrutural nos quais a função que se deseja maximizar é a rigidez. Nestes casos, uma configuração com o padrão tabuleiro de xadrez apresenta, numericamente, uma rigidez maior do que uma configuração de mesmo volume, homogênea, sendo por isto predominante em algumas regiões ao final da OT. Esta instabilidade pode ser controlada através da aplicação de filtros, como o controle de perímetro, que limita o tamanho das regiões “vazias” de modo a evitar a formação destes padrões. Porém, no caso de escoamento de fluidos, esse tipo de instabilidade, em geral, não é observado. No caso da otimização envolvendo escoamento de fluidos, esse padrão de tabuleiro proporciona um desempenho inferior, uma vez que proporciona perdas de carga maiores, e por isso é naturalmente eliminado. Isso se explica pois, fisicamente, um escoamento que é forçado a se dividir em diversos canais menores apresenta uma dissipação maior do que um canal único de vazão correspondente.

Figura 3.12 - Surgimento de padrão de tabuleiro de xadrez (“*checkerboard*”).

É interessante notar que, conforme mostrado por Jog e Haber (1996), a natureza do surgimento do padrão *checkerboard* é a mesma envolvida na convergência do MEF aplicado a fluidos, detalhado no Apêndice A. Em linhas gerais, trata-se de uma “incompatibilidade” entre a discretização dos campos de deslocamento e de densidades, que provoca o surgimento de uma distribuição de oscilações espúrias no campo de densidades.

3.8.3 Dependência de Malha

Ainda existe a questão da dependência de malha, citada anteriormente. Seria intuitivo pensar que quanto maior fosse o número de elementos em uma malha de elementos finitos, mais refinado seria o resultado final ótimo. Porém, o que se observa na realidade é que, com o aumento da discretização de um mesmo problema, um mesmo domínio fixo e com as mesmas condições de contorno, a topologia da estrutura ótima tende a se alterar, aumentando o número de membros da estrutura, caracterizando assim, o problema de dependência de malha.

Na figura a seguir (Figura 3.13) são apresentados diferentes resultados para um mesmo problema de otimização estrutural, alterando-se apenas a discretização da malha.

(a) Malha com 1200 elementos.

(b) Malha com 3000 elementos.

Figura 3.13 - Efeitos da dependência de malha.

3.8.4 Técnica de Projeção

Para eliminar problemas de dependência de malha, pode-se aplicar filtros ou técnicas específicas, que garantam a independência de discretização.

Guest, Prévost e Belytschko (2004) propuseram uma técnica de projeção onde a pseudo-densidade de cada elemento do domínio é uma função que depende de uma ponderação das pseudo-densidades de cada elemento pertencente a um raio de abrangência (vide Figura 3.14), mostrando que a aplicação deste tipo de técnica elimina a dependência de malha, para um raio de abrangência escolhido adequadamente.

Figura 3.14 - Representação da área de abrangência da projeção, independente de malha: (a) “padrão”; (b) refinada.

De modo a facilitar o entendimento desse tipo de abordagem, os conceitos de variável de projeto e pseudo-densidade devem ser separados. Até então, as pseudo-densidades, utilizadas no cálculo das propriedades do material, eram as próprias variáveis de projeto, as quais são utilizadas na rotina de otimização. Contudo, ao se utilizar a técnica de projeção, a pseudo-densidade passa a ser uma função da variável de projeto, ou seja, elas terão valores diferentes entre si. Então, de acordo com Guest, Prévost e Belytschko (2004), a pseudo-densidade de cada elemento do domínio é uma função que depende das variáveis de projeto de cada

elemento dentro da projeção e de suas respectivas distâncias. Quanto maior a distância de um elemento ao centro da projeção (i), menor será sua influência, ao passo que, quanto mais próximo ao centro, maior a influência sobre a pseudo-densidade (Figura 3.15).

Então, considerando que d_n seja a variável de projeto e ρ_n o valor da pseudo-densidade associados a cada elemento, tem-se que:

$$\rho_n = f(d_n) \quad (3.5)$$

onde f é a função de projeção definida por:

$$\rho_i = f(d_j) = \frac{\sum_{j \in S_i} d_j w(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)}{\sum_{j \in S_i} w(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)} \quad (3.6)$$

e S_i é o conjunto de elementos dentro do domínio de influência do elemento i (Ω_i na Figura 3.14), o qual consiste em um círculo de raio $R_{\max}$ e centro no elemento i . A função peso w é definida por:

$$w(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) = \begin{cases} \frac{R_{\max} - R_{ij}}{R_{\max}} & , se \quad \mathbf{x}_j \in \Omega_i \\ 0 & , caso \text{ contrário} \end{cases} \quad (3.7)$$

onde R_{ij} é a distância entre os centróides do elemento i e um elemento genérico j , dentro do domínio de influência.

$$R_{ij} = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| \quad (3.8)$$

A função que relaciona o peso w com a distância R_{ij} pode assumir diferentes funções (linear, exponencial, etc.). As equações 3.6 a 3.8 mostradas anteriormente constituem uma função linear da função peso em relação à distância R_{ij} . Neste caso, a função de ponderação assume o formato de um cone, com centro e valor máximo de ponderação, 1, em i , decrescendo linearmente até o valor 0, nos limites do raio de projeção, quando $R_{ij}=R_{\max}$, conforme mostrado na figura 3.15.

Figura 3.15 – Função de projeção.

4 Formulação da OT para projeto de dispositivos de canais

O problema de otimização topológica é formulado definindo-se a função-objetivo e as restrições do problema. Nesta seção serão discutidas as formulações para alguns casos de aplicação da otimização envolvendo dispositivos baseados em canais de escoamento de fluido e os seus efeitos em relação à troca de calor promovida.

4.1 Função objetivo

Nesse trabalho, uma das características principais a ser otimizada é a dissipação ao longo do canal, decorrente de perdas de carga no caminho do fluido em escoamento. Neste caso, busca-se a topologia do canal que minimize a perda de carga ao longo do domínio de projeto.

Outra possível função objetivo consiste na maximização da velocidade em pontos específicos do domínio. Neste caso, define-se um ponto ou uma região em que se deseja maximizar as velocidades em uma direção específica.

É possível agregar diversas funções objetivo ou mesmo diferentes fenômenos, baseados no escoamento do fluido ao longo do canal, combinando diferentes características desejadas num mesmo projeto, através de uma função multi-objetivo. Um importante fenômeno é a troca térmica promovida pelo escoamento do fluido ao longo do canal, supondo-se a presença de um gradiente de temperaturas, ou uma fonte de calor no domínio de projeto.

4.1.1 Minimização de perda de carga

A função objetivo a ser minimizada neste problema de otimização é a energia potencial total do sistema. A função da energia potencial é obtida através do princípio dos trabalhos virtuais, calculada na solução do equilíbrio, $\mathbf{u}$. Minimizar a energia potencial total corresponde a minimizar a "energia" dissipada no fluido juntamente com a maximização das velocidades nas regiões de força ($\mathbf{f}$) aplicada. Em um caso específico e comum em que não existem forças aplicadas sobre o fluido, a minimização da energia potencial total corresponde, portanto, à minimização da "energia" dissipada pelo fluido. No caso específico em que as velocidades prescritas nos contornos de entrada e saída serem normais às fronteiras, esta função objetivo corresponde à perda de carga no canal (BORRVALL; PETERSSON, 2003).

A função objetivo é dada na forma contínua pela equação:

$$\Phi = \frac{1}{2} \mu \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \alpha(\rho) \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} d\Omega \quad (4.1)$$

A equação 4.1 é composta basicamente por 3 termos, sendo o primeiro correspondente à dissipação devida aos efeitos dissipativos viscosos no plano de escoamento (plano no qual o fluido é conduzido), enquanto o segundo termo corresponde aos efeitos dissipativos do modelo de meios porosos. O terceiro termo representa a maximização das velocidades nos pontos de força aplicada.

Esta função objetivo é válida em várias aplicações, sendo principalmente importante em aplicações nas quais a energia disponível no bombeamento do fluido é limitada, necessitando um bom desempenho do canal em que o fluido escoar.

4.1.2 Maximização de Velocidade

Outro aspecto explorado na OT é a maximização da velocidade em uma determinada região do domínio. Neste caso, a função objetivo consiste em definir uma direção e sentido nos quais se deseja maximizar a velocidade. A função objetivo é definida como:

$$\zeta = u_i \quad (4.2)$$

onde u_i é o vetor da velocidade no ponto (i) e na direção de interesse especificada.

Este tipo de função objetivo torna-se interessante em casos de dispositivos que necessitam que o escoamento siga um caminho muito específico no interior do canal como, por exemplo, no caso de reversores de fluxo (vide Fig. 3.5).

4.1.3 Maximização da dissipação térmica

A função objetivo adotada no estudo da troca de calor é energia potencial térmica, apresentando-se como uma forma de mensurar a dissipação térmica do sistema, promovendo a máxima troca de calor possível, e desta forma, removê-lo de uma forma mais eficiente. A equação a seguir descreve a função objetivo adotado no problema térmico:

$$\Gamma = \frac{1}{2} \int_{\Omega} [k \nabla T \cdot \nabla T + \rho_m c_p (\mathbf{u} \cdot \nabla T)] d\Omega - \int_{\Omega} f_T T d\Omega \quad (4.3)$$

onde f_T é a fonte de calor e T é a distribuição de temperaturas do domínio.

O primeiro termo da Eq. 4.3 visa maximizar a troca de calor nos pontos de temperatura (T) fixa, e o segundo termo minimiza a temperatura nos pontos em que existe uma fonte de calor.

A maximização de dissipação térmica é aplicada principalmente em dispositivos nos quais deseja-se aumentar a eficiência da dissipação de calor, em especial, em trocadores de calor.

4.1.4 Função Multi-Objetivo

Finalmente, tem-se uma abordagem multi-física, combinando os efeitos do escoamento do fluido com a troca de calor associada a ele. Esta abordagem é realizada através de uma função multi-objetivo, que permite combinar estas características através de uma ponderação, conforme a equação a seguir:

$$\Psi = u \log(\Phi) + w \log(\Gamma) \quad (4.4)$$

onde Ψ é a função multi-objetivo, u e w são os coeficientes de ponderação que permitem controlar, respectivamente, o peso do termo de dissipação viscosa do fluido (Eq. 4.1), e o termo de dissipação de energia térmica (Eq. 4.3) na equação 4.4.

Definindo $u \gg w$, retoma-se a função objetivo de perda de carga, enquanto para $w \gg u$, retoma-se a função objetivo de dissipação térmica. A função logarítmica é aplicada para atenuar as diferenças de magnitude das diferentes funções objetivo envolvidas.

4.2 Restrições

Um dos principais tipos de restrição nos problemas de otimização topológica é a limitação de material a ser utilizada no projeto, através da definição de uma fração de volume. A fração de volume controla a porcentagem de volume de material que se deseja obter ao final da otimização, em relação ao volume total do domínio estendido de projeto inicial. Esta restrição tem maior relevância em aplicações de otimização estrutural, pois se deseja, em geral, obter a estrutura mais rígida possível, porém com a menor quantidade possível de material. No caso da aplicação em domínios fluidos, esta restrição, perde em parte, sua relevância em termos de limitação, sendo útil, principalmente como parâmetros de comparação de diferentes soluções utilizando o mesmo volume de fluido no sistema, bem como a comparação com os exemplos da literatura, nos quais esta restrição é largamente utilizada.

A definição básica da restrição de volume se dá através da equação (4.8):

$$\int_{\Omega} \rho d\Omega \leq V \quad (4.8)$$

$$0 \leq \rho \leq 1 \quad (4.9)$$

onde ρ representa o valor das pseudo-densidades em cada ponto do domínio e V o volume final que se deseja atingir na otimização.

4.3 Formulação dos Problemas de Otimização

Definida a função-objetivo e as restrições, pode-se formular os problemas a serem otimizados, na forma contínua.

Assim, a definição do problema de otimização proposto, no caso da minimização da perda de carga (Figura 4.1), é dada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \text{minimizar:} \quad & \Phi = \frac{1}{2} \mu \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \alpha(\rho) \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} d\Omega \\
 \text{sujeito a:} \quad & a_{\alpha}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle \\
 & b(\mathbf{u}, q) = 0 \\
 & \int_{\Omega} \rho d\Omega \leq V \\
 & 0 \leq \rho \leq 1
 \end{aligned}
 \tag{4.10}$$

Figura 4.1 - Domínio de projeto e condições de contorno para minimização de perda de carga.

Para o problema de otimização visando a maximização de velocidade (u_i) em um ponto i , numa dada direção preferencial (Figura 4.2), tem-se:

$$\begin{aligned}
 \text{minimizar:} \quad & \zeta = u_i \\
 \text{sujeito a:} \quad & a_{\alpha}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle \\
 & b(\mathbf{u}, q) = 0 \\
 & \int_{\Omega} \rho d\Omega \leq V \\
 & 0 \leq \rho \leq 1
 \end{aligned}
 \tag{4.11}$$

Figura 4.2 - Domínio de projeto e condições de contorno para maximização de velocidade.

Por fim, considera-se o sistema da Figura 4.3, e define-se a função multi-objetivo, combinando efeitos de perda de carga e dissipação térmica, descrita por:

$$\underset{\rho}{\text{minimizar:}} \quad \Psi = u \log(\Phi) + w \log(\Gamma)$$

$$\begin{aligned} \text{sujeito a:} \quad & a_{\alpha}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle \\ & b(\mathbf{u}, q) = 0 \end{aligned}$$

$$A(T, \eta) = F(\eta) \quad (4.12)$$

$$\int_{\Omega} \rho d\Omega \leq V$$

$$0 \leq \rho \leq 1$$

Figura 4.3 - Domínio de otimização e condições de contorno.

5 Implementação Numérica

A partir dos equacionamentos apresentados nas seções anteriores, pode-se implementar numericamente o software, que neste trabalho é realizado através de uma série de rotinas computacionais programadas no ambiente de programação comercial, *MatLab*®. Neste capítulo serão abordados os principais métodos utilizados, seus conceitos e os aspectos de sua implementação.

5.1 Funções Objetivo

As funções objetivo mostradas no capítulo 4 são apresentadas em sua forma discreta para a implementação numérica.

5.1.1 Minimização de perda de carga

A função de perda de carga no fluido, obtida a partir da eq. 4.1, na sua forma discreta, é análoga ao caso clássico de maximização de rigidez em estruturas ou "*mean compliance*" (Figura 3.1). Este caso é equivalente à minimização da flexibilidade média da estrutura (BENDSØE; SIGMUND, 2003), descrita por uma expressão idêntica à Eq. 5.1. Neste caso, a definição é equivalente a maximizar a "flexibilidade" do fluido, minimizando a perda de carga média no canal.

$$\Phi = \mathbf{F}^T \mathbf{U} = \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U} \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{U}$ é o campo de velocidades discreto do domínio de projeto e $\mathbf{K}$ é a matriz de rigidez do sistema de fluido (simétrica), e $\mathbf{F}$ é o vetor de carregamentos.

Para um sistema de n nós de velocidade, o vetor $\mathbf{U}$ possui dimensão $(2n \times 1)$, alternando as velocidades em x e y de cada nó, ou seja, $\mathbf{U}^T = [u_1 \ v_1 \ u_2 \ v_2 \ \dots \ u_n \ v_n]$.

5.1.2 Maximização de Velocidade

Conforme apresentado no item 4.1.2, a maximização da velocidade em um determinado ponto pode ser feita através da seguinte função objetivo:

$$\zeta = u_i = \mathbf{1}^T \mathbf{U} \quad (5.2)$$

O vetor $\mathbf{1}$ introduzido na Eq. 5.2 é da mesma dimensão do vetor $\mathbf{U}$ ($2n \times 1$), e basicamente extrai do vetor $\mathbf{U}$ a soma apenas os graus de liberdade de interesse, ou seja, dos pontos em que se deseja maximizar as velocidades. Esse vetor é composto basicamente por zeros, e valor unitário apenas nas posições correspondentes aos graus de liberdade de interesse. Como exemplo, no caso de um sistema de n nós de velocidade, e $2n$ graus de liberdade (2 graus de liberdade por nó), em que se deseja maximizar a velocidade em x no nó 1, o vetor $\mathbf{1}$ ($2n$ posições) seria composto de zeros *exceto* na posição 1, que é corresponde à velocidade em x do nó 1. Para maximizar a velocidade em y no nó 1, o vetor $\mathbf{1}$ teria valor 1 apenas na posição 2, correspondente à velocidade em y no nó 1.

5.1.3 Maximização da dissipação térmica

A função de dissipação térmica é dada em sua forma discreta por:

$$\Gamma = \mathbf{f}_T^T \mathbf{T} = (\mathbf{K}_t \mathbf{T})^T \mathbf{T} = \mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T \mathbf{T} \quad (5.3)$$

onde $\mathbf{T}$ é o vetor correspondente à distribuição de temperaturas no domínio, calculado a partir da equação de energia (Eq. 2.6) e $\mathbf{K}_t$ a matriz de rigidez térmica do sistema (Eq. 2.39).

5.1.4 Função Multi-Objetivo

A combinação das equações 5.1 e 5.3 sob a forma da função multi-objetivo é feita através de 2 fatores de ponderação u e w , correspondentes às parcelas de otimização de escoamento e de troca de calor, respectivamente, conforme:

$$\Psi = u \log(\Phi) + w \log(\Gamma) = u \log(\mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U}) + w \log(\mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T \mathbf{T}) \quad (5.4)$$

Em geral, as funções objetivo possuem diferentes ordens de grandeza, em termos de seus valores numéricos. Por isso, além dos fatores de ponderação u e w , é aplicada a função logarítmica (Eq. 5.4) às funções objetivo combinadas, de modo a atenuar as diferenças da ordem de grandeza das diferentes funções.

5.2 Programação Linear Seqüencial (PLS)

O problema de otimização foi definido, conforme descrito no item 4.4.

Para o processo de otimização é utilizado o método de programação linear seqüencial (PLS). A PLS é adequada para trabalhar com um grande número de variáveis e restrições de

projeto (VANDERPLAATZ 1984; HAFTKA; GURDAL; KAMAT, 1990), além de permitir a utilização de funções objetivo complexas. A rotina de otimização da PLS é baseada no cálculo dos gradientes (primeira derivada) da função objetivo e das restrições entre as iterações.

Além disso, a PLS permite operar com problemas de otimização não-lineares, dividindo-o numa sequência de sub-problemas lineares, que são resolvidos com a técnica de programação linear (PL).

O processo de divisão do problema não-linear em diversos problemas lineares utiliza a expansão em série de Taylor da função objetivo, em torno de um determinado ponto.

Seja $f(\mathbf{p})$ a função original não-linear, a qual se deseja otimizar, sujeita a restrições $g_j(\mathbf{p})$:

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{p}}{\text{minimizar:}} \quad & f(\mathbf{p}) \\ \text{sujeito a:} \quad & g_j(\mathbf{p}) \leq 0 \\ & \mathbf{p}_{\min} \leq \mathbf{p} \leq \mathbf{p}_{\max} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Expandindo-se a função $f(\rho)$ em torno de ρ_0 , tem-se:

$$f(\mathbf{p}) = f(\mathbf{p}_0) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial f(\mathbf{p}_0)}{\partial \rho_i} (\rho_i - \rho_{0_i}) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 f(\mathbf{p}_0)}{\partial \rho_i^2} \frac{(\rho_i - \rho_{0_i})^2}{2!} + \dots + \sum_{i=1}^N \frac{\partial^N f(\mathbf{p}_0)}{\partial \rho_i^N} \frac{(\rho_i - \rho_{0_i})^N}{N!} + \dots + e(\mathbf{p}) \quad (5.5)$$

onde $e(\mathbf{p})$ é o erro de truncamento da série de Taylor.

Considerando-se a aproximação utilizando-se apenas termos de primeira ordem, tem-se:

$$f(\mathbf{p}) \approx f(\mathbf{p}_0) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial f(\mathbf{p}_0)}{\partial \rho_i} \rho_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial f(\mathbf{p}_0)}{\partial \rho_i} \rho_{0_i} \quad (5.6)$$

Pode-se alterar a função objetivo mantendo apenas o termo de primeira ordem (termos não constantes da aproximação), deixando os termos constantes nas restrições. Desta forma, tanto a função objetivo quanto as restrições são representadas apenas por funções lineares em função de ρ :

$$\underset{\mathbf{p}}{\text{minimizar:}} \quad \tilde{f}(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f(\mathbf{p}_{0_i})}{\partial \rho_i} \rho_i \quad (5.8)$$

$$\text{sujeito a:} \quad \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial g_j(\mathbf{p}_{0_i})}{\partial \rho_i} \right)^T \rho_i \leq \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{\partial g_j(\mathbf{p}_{0_i})}{\partial \rho_i} \right)^T \rho_{0_i} - g_j(\mathbf{p}_{0_i}) \right] \quad (5.9)$$

Para essa linearização deve-se definir o conceito de limites móveis, que representa os valores limites para os quais a aproximação linear é válida. Neste caso, como a aproximação de primeira ordem é feita em torno de um valor ρ_0 , existe uma faixa de valores para ρ , na qual é aceitável a aproximação, conforme demonstrado na Figura 5.1.

Figura 5.1 - Aproximação linear da função e os limites móveis

Estes limites são chamados limites móveis exatamente porque são alterados ao longo da PLS, já que são feitas diferentes aproximações lineares em cada trecho da função original. Os limites móveis devem acompanhar a mudança das funções aproximadoras de modo a tornar seu intervalo compatível, ou seja, os limites móveis devem determinar o intervalo em que a aproximação linear é válida, conforme mostrado na Fig. 5.1.

5.2.1 Programação Linear (PL)

A programação linear é uma técnica de otimização para resolução de problemas em que a função objetivo e as restrições são lineares em relação às variáveis de projeto (YANG; CHUANG, 1994).

A solução do problema de Programação Linear pode ser obtida de algumas diferentes formas, através de diferentes métodos. Dentre os métodos mais conhecidos destacam-se o método Simplex e o método Karmarkar, que basicamente realizam uma busca, dentro de um conjunto de soluções possíveis para o problema de PL, para encontrar a solução que otimize a função objetivo, obedecendo às restrições impostas.

Rotinas que implementam estes métodos podem ser encontradas com relativa facilidade na literatura, como o algoritmo SIMPLX (PRESS et al., 1999) que utiliza o método Simplex. A rotina LINPROG (presente no *MatLab*®), utiliza como um de seus métodos, Karmarkar (HAFTKA; GURDAL; KAMAT, 1990).

Uma das vantagens da utilização do *MatLab*® é a presença de uma biblioteca de otimização, da qual faz parte uma rotina de programação linear já implementada, a qual contempla tanto o método Simplex quanto o método Karmarkar, aplicáveis de acordo com o número de variáveis do problema. Além disso, o *MatLab*® é eficiente para uma implementação rápida dos algoritmos, ou na criação de "protótipos" de algoritmos, apesar de algumas limitações em relação à memória disponível e à velocidade.

5.3 Implementação do Método de Otimização Topológica

A rotina computacional implementada aplica a PLS para a otimização do problema, dividindo o problema em diversos sub-problemas de Programação Linear, para o qual se utiliza o método Simplex.

Os passos de implementação do MOT são: cálculo do MEF para o domínio fluido, cálculo da função objetivo e restrições e a otimização do modelo. Repete-se o processo até se obter a convergência da solução, controlada pela diferença relativa entre iterações sucessivas.

O fluxograma de implementação é mostrado na Figura 5.2.

Figura 5.2 - Fluxograma de implementação do MOT.

5.4 Gradientes da Função Objetivo (Análise de Sensibilidade)

A PLS é um processo que depende da informação dos gradientes da função objetivo para direcionar a otimização e buscar o seu valor ótimo. Este cálculo é conhecido como análise de sensibilidade, na qual verifica-se de que forma uma alteração na variável de projeto pode modificar a função objetivo e as restrições, ou, em outras palavras, o quão sensíveis a função objetivo e as restrições são, em relação a uma mudança na variável de projeto. A partir deste conhecimento, a otimização é direcionada iterativamente ao ponto ótimo, até que haja a convergência.

O problema de otimização de minimização de perda de carga, formulado na sua forma discreta é dado por:

$$\begin{aligned} \text{minimizar:} \quad & \Phi = \frac{1}{2} \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U} \\ \text{sujeito a:} \quad & \begin{bmatrix} \mathbf{K} & -\mathbf{G}^T \\ -\mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \\ & \sum_{i=1}^N \rho_i \leq V \\ & \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\rho} \leq \mathbf{1} \end{aligned} \quad (5.10)$$

A partir da função objetivo de minimização da perda de carga (Eq. 4.2), calcula-se o seu gradiente em função da variável de projeto (ρ) para cada elemento do domínio de projeto, a partir da derivação direta da função objetivo. Neste caso, é possível determinar analiticamente o gradiente, como mostrado a seguir (Eq. 5.11). Neste caso, a matriz $\mathbf{K}$ é simétrica, e portanto $\mathbf{K}^T = \mathbf{K}$.

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2} \mathbf{U}^T \mathbf{K}^T \mathbf{U} = \frac{1}{2} \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U} \\ \Rightarrow \frac{d\Phi}{d\rho_i} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} \right)^T \mathbf{K} \mathbf{U} + \mathbf{U}^T \frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} \mathbf{U} + \mathbf{U}^T \mathbf{K} \frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} \right] = \frac{1}{2} \left[\mathbf{U}^T \frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} \mathbf{U} + 2\mathbf{U}^T \mathbf{K} \frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} \right] \end{aligned} \quad (5.11)$$

A partir do sistema de equações de equilíbrio do MEF, obtém-se o termo $d\mathbf{U}/d\rho_i$ através do sistema de equações mostrado a seguir (Eq. 5.12), onde a matriz $\mathbf{L}$ recupera do vetor $\mathbf{X}$ (velocidades e pressões nodais - Eq. 2.17) apenas os graus de liberdade correspondentes ao vetor de velocidades $\mathbf{U}$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_G \mathbf{X} &= \mathbf{F}_G \Rightarrow \frac{d\mathbf{K}_G}{d\rho_i} \mathbf{X} + \mathbf{K}_G \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} = \frac{d\mathbf{F}_G}{d\rho_i} \\
\Rightarrow \mathbf{K}_G \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} &= \frac{d\mathbf{F}_G}{d\rho_i} - \frac{d\mathbf{K}_G}{d\rho_i} \mathbf{X} = \mathbf{r}_i \\
&\text{com,} \\
\mathbf{U} &= \mathbf{L}^T \mathbf{X} \Rightarrow \frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} = \mathbf{L}^T \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} \\
\text{onde: } \mathbf{L}^T &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(m \times m)} & \mathbf{0}_{(m \times n)} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{5.12}$$

O vetor $\mathbf{L}$ é composto pela matriz identidade $\mathbf{I}$, de dimensão $m \times m$, sendo m o número de graus de liberdade de velocidade, e uma matriz de dimensão $(m \times n)$ composta apenas de zeros, onde n é o número de graus de liberdade de pressão.

Na definição do domínio de projeto são impostas condições de contorno de Dirichlet (u_{0j}), através das quais são prescritas as velocidades no contorno do sistema. O gradiente da velocidade em relação à variável de projeto nestes pontos é nulo (Eq. 5.13), pois não há alteração da velocidade nestes pontos, ao longo do processo de otimização.

$$\begin{aligned}
u_j = u_{0j} &\Rightarrow \frac{du_j}{d\rho_i} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{df_j}{d\rho_i} \neq 0 \\
f_j = f_{0j} &\Rightarrow \frac{du_j}{d\rho_i} \neq 0 \quad \text{e} \quad \frac{df_j}{d\rho_i} = 0
\end{aligned} \tag{5.13}$$

É importante destacar que no sistema de equações (Eq. 5.12), quando se define o valor de $\mathbf{U}$ em um determinado ponto, o valor respectivo de $\mathbf{F}$ neste ponto é mantido livre (incógnita do problema), e vice-versa. Portanto, aplicando-se as condições impostas pela Eq. 5.13 no sistema de equações descrito na Eq. 5.12, obtém-se um sistema reduzido de equações para cada elemento i , dado por:

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_{G_{red}} \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} &= \mathbf{r}_{red_i} \Rightarrow \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} = \mathbf{K}_{G_{red}}^{-1} \mathbf{r}_{red_i} \\
\frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} &= \mathbf{L}^T \frac{d\mathbf{X}}{d\rho_i} \Rightarrow \frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} = \mathbf{L}^T \mathbf{K}_{G_{red}}^{-1} \mathbf{r}_{red_i} = \mathbf{S}_i \\
\text{onde: } \mathbf{r}_{red_i} &= \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ \cdot \end{bmatrix} \leftarrow j \quad \text{e} \quad \mathbf{K}_{G_{red}} = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \cdot & \cdot & 0 & \cdot \end{bmatrix} \\
&\text{para todo grau de liberdade } j \text{ restrito}
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Conforme mostrado na expressão da Eq. 5.14, o processo de obtenção deste sistema reduzido (matrizes $\mathbf{K}_{G_{red}}$ e $\mathbf{r}_{red_i}$) é idêntico ao processo de imposição de condições de contorno num problema típico do MEF (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2002), ou seja, para cada grau de liberdade j restrito, o termo $K_{G_{ij}}$ da diagonal principal é preenchido pelo valor 1, enquanto as linhas e colunas correspondentes a esse grau de liberdade, na matriz, são zeradas e o termo r_{red_j} recebe o valor 0. Os outros termos destas matrizes (sem condição de contorno imposta) são mantidos idênticos às matrizes originais.

Aplica-se o Método Direto no cálculo das sensibilidades e além disso, evita-se o cálculo explícito do termo $d\mathbf{U}/d\rho_i$, de forma a reduzir o custo computacional.

A partir da equação 5.11, e combinando a Eq. 5.14, tem-se:

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi}{d\rho_i} &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{U}^T \frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} \mathbf{U} + 2\mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{S}_i \right] \\ \Rightarrow \frac{d\Phi}{d\rho_i} &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{U}^T \frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} \mathbf{U} + 2\mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{L}^T \mathbf{K}_{G_{red}}^{-1} \mathbf{r}_{red_i} \right]\end{aligned}\quad (5.15)$$

Para simplificar os cálculos da Eq. 5.15, define-se:

$$\boldsymbol{\beta}_1^T = \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{L}^T \quad (5.16)$$

Tal que pode-se escrever um vetor $\boldsymbol{\lambda}_1$, que é solução de:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\beta}_1^T \mathbf{K}_{G_{red}}^{-1} &= \boldsymbol{\lambda}_1^T \\ \mathbf{K}_{G_{red}}^T \boldsymbol{\lambda}_1 &= \boldsymbol{\beta}_1\end{aligned}\quad (5.17)$$

Assim, pode-se reescrever a Eq. 5.15, de forma que:

$$\frac{d\Phi}{d\rho_i} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{U}^T \frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} \mathbf{U} + 2\boldsymbol{\lambda}_1^T \mathbf{r}_{red_i} \right] \quad (5.18)$$

A partir da matriz $\mathbf{K}$ (Eq. 2.14), obtém-se diretamente:

$$\frac{d\mathbf{K}}{d\rho_i} = \frac{d\alpha_i(\rho)}{d\rho_i} \mathbf{K}_a \quad (5.19)$$

$$\mathbf{K}_a = \int_V \mathbf{N}^T \mathbf{N} dV \quad (5.20)$$

$$\frac{d\alpha_i(\rho)}{d\rho_i} = (\alpha_L - \alpha_U) q \frac{(1+q)}{(\rho+q)^2} \quad (5.21)$$

onde $\mathbf{K}_a$ é a matriz que multiplica a permeabilidade inversa ($\alpha(\rho)$), na equação (2.10), sendo explicitado na equação (5.20). Na equação 5.15, o vetor $\mathbf{U}$ é obtido a partir do resultado da análise através do MEF, e o termo da derivada (Eq. 5.21) é obtido a partir da equação (3.3).

No caso da função objetivo de maximização da velocidade (u_i) numa dada direção (Eq. 5.2), o cálculo da sensibilidade é obtido novamente através da derivação direta da função objetivo, considerando o vetor $\mathbf{1}$ (Eq. 5.2) fixo, conforme mostrado a seguir:

$$\max_{\rho} u_{out} = \min_{\rho}(g) \quad (5.22)$$

$$g = -\mathbf{1}^T \mathbf{U} \Rightarrow \frac{dg}{d\rho_i} = -\mathbf{1}^T \frac{d\mathbf{U}}{d\rho_i} \quad (5.23)$$

Substituindo a Eq. 5.14 em 5.23, tem-se:

$$\frac{dg}{d\rho_i} = -\mathbf{1}^T \mathbf{S}_i \quad (5.24)$$

A análise de sensibilidade da função objetivo de dissipação térmica (Eq. 5.3), é dada por:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \mathbf{f}_T^T \mathbf{T} = \mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T \mathbf{T} \\ \Rightarrow \frac{d\Gamma}{d\rho_i} &= \frac{d\mathbf{T}^T}{d\rho_i} \mathbf{K}_t^T \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \frac{d\mathbf{K}_t^T}{d\rho_i} \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T \frac{d\mathbf{T}}{d\rho_i} \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde $\mathbf{K}_t$ é a matriz de rigidez térmico do sistema (Eq. 2.39).

De forma análoga à Eq. 5.12, e a partir do sistema de equações da Eq. 2.39, obtém-se a expressão:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_t \mathbf{T} &= \mathbf{f}_T \Rightarrow \frac{d\mathbf{K}_t}{d\rho_i} \mathbf{T} + \mathbf{K}_t \frac{d\mathbf{T}}{d\rho_i} = \frac{d\mathbf{f}_T}{d\rho_i} \\ \Rightarrow \frac{d\mathbf{T}}{d\rho_i} &= \mathbf{K}_t^{-1} \left[\frac{d\mathbf{f}_T}{d\rho_i} - \frac{d\mathbf{K}_t}{d\rho_i} \mathbf{T} \right] = \mathbf{K}_t^{-1} \bar{\mathbf{f}}_{T_i} \end{aligned} \quad (5.26)$$

Considerando os graus de liberdade de temperatura prescritos na Eq. 5.26, tem-se:

$$\begin{aligned} T_j &= T_{0_j} \Rightarrow \frac{dt_j}{d\rho_i} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{df_{T^j}}{d\rho_i} \neq 0 \\ f_{T^j} &= q_{0_j} \Rightarrow \frac{dt_j}{d\rho_i} \neq 0 \quad \text{e} \quad \frac{df_{T^j}}{d\rho_i} = 0 \end{aligned} \quad (5.27)$$

A partir dos graus de liberdade prescritos (Eq. 5.27), reduz-se o sistema da eq. 5.26, resultando na equação a seguir:

$$(\mathbf{K}_t)_{red} \frac{d\mathbf{T}}{d\rho_i} = \left[\frac{d\mathbf{f}_T}{d\rho_i} - \frac{d\mathbf{K}_t}{d\rho_i} \mathbf{T} \right]_{red} = \bar{\mathbf{f}}_{T_i,red} \quad (5.28)$$

E substituindo a eq. 5.28 em 5.25, obtém-se a expressão:

$$\frac{d\Gamma}{d\rho_i} = \bar{\mathbf{f}}_{T_i,red}^T (\mathbf{K}_t^{-1})_{red}^T \mathbf{K}_t^T \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \frac{d\mathbf{K}_t^T}{d\rho_i} \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T (\mathbf{K}_t^{-1})_{red} \bar{\mathbf{f}}_{T_i,red} \quad (5.29)$$

Novamente, a fim de simplificação da Eq. 5.29, sejam:

$$\boldsymbol{\beta}_2 = \mathbf{K}_t^T \mathbf{T} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\beta}_3 = \mathbf{T}^T \mathbf{K}_t^T = \mathbf{f}_T^T \quad (5.30)$$

Tal que pode-se escrever vetores $\boldsymbol{\lambda}_2$ e $\boldsymbol{\lambda}_3$ de forma que:

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_t^{-1})_{red}^T \boldsymbol{\beta}_2 &= \boldsymbol{\lambda}_2 & \text{e} & \quad \boldsymbol{\beta}_3^T (\mathbf{K}_t^{-1})_{red} = \boldsymbol{\lambda}_3^T \\ \Rightarrow (\mathbf{K}_t^T)_{red} \boldsymbol{\lambda}_2 &= \boldsymbol{\beta}_2 & \Rightarrow \boldsymbol{\beta}_3^T &= \boldsymbol{\lambda}_3^T \mathbf{K}_{t,red} \\ & & \Rightarrow \mathbf{K}_{t,red}^T \boldsymbol{\lambda}_3 &= \boldsymbol{\beta}_3 = \mathbf{f}_T \end{aligned} \quad (5.31)$$

Portanto, a Eq. 5.29 pode ser reescrita como:

$$\frac{d\Gamma}{d\rho_i} = \bar{\mathbf{f}}_{T_i,red}^T \boldsymbol{\lambda}_2 + \mathbf{T}^T \frac{d\mathbf{K}_t^T}{d\rho_i} \mathbf{T} + \boldsymbol{\lambda}_3^T \bar{\mathbf{f}}_{T_i,red} \quad (5.32)$$

Dessa forma, primeiro são calculados os vetores $\boldsymbol{\lambda}_2$ e $\boldsymbol{\lambda}_3$ através dos sistemas de equações da Eq. 5.31. Os vetores $\boldsymbol{\lambda}_2$ e $\boldsymbol{\lambda}_3$ são iguais para todo elemento i , e portanto, podem ser calculados apenas 1 vez por iteração. A seguir calcula-se os valores de $\bar{\mathbf{f}}_{T_i,red}$ para cada elemento i e o segundo termo do gradiente, obtendo-se assim o gradiente da função objetivo em relação a cada elemento do domínio de projeto.

O segundo termo do gradiente (eq. 5.32) depende do gradiente da matriz de rigidez térmica do sistema ($\mathbf{K}_t$) em relação à variável de projeto (ρ). Para o cálculo deste termo, considera-se a montagem tradicional utilizada pelo MEF, da matriz de rigidez térmica do sistema ($\mathbf{K}_t$), a partir de uma composição das matrizes locais ($\mathbf{k}_t$) de cada elemento $i = 1, \dots, N$ do sistema através da operação A (responsável pela montagem da matriz global do sistema), dado por:

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{A} \left(\mathbf{k}_{t_e} \right) \quad (5.33)$$

A matriz térmica local de cada elemento $\mathbf{k}_{te}$ é composta de um termo referente à condução térmica $\mathbf{k}_{td}$ e outro referente à convecção $\mathbf{k}_{tce}$, (vide Eq. 2.41 e 2.40 respectivamente) de tal forma que:

$$\mathbf{k}_{t_e} = \mathbf{k}_{t_{d_e}} + \mathbf{k}_{t_{c_e}} \quad (5.34)$$

Portanto, considerando-se que a operação A é linear, pode-se escrever:

$$\mathbf{K}_t = A(\mathbf{k}_{t_e}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{d_e}} + \mathbf{k}_{t_{c_e}}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{d_e}}) + \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{c_e}}) \quad (5.35)$$

Derivando-se a Eq. 5.35 em relação a ρ_i , tem-se:

$$\frac{d\mathbf{K}_t}{d\rho_i} = \frac{d \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{d_e}})}{d\rho_i} + \frac{d \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{c_e}})}{d\rho_i} \quad (5.36)$$

O termo $\mathbf{k}_{td}$ de cada elemento i depende apenas do valor da variável de projeto (ρ_i) do próprio elemento (Eq. 2.41), ou seja, este termo é independente dos valores de ρ dos elementos vizinhos.

$$\mathbf{k}_{t_{d_{eq}}} = f(\rho_i) \quad (5.37)$$

Diferentemente de $\mathbf{k}_{td}$, o termo $\mathbf{k}_{tc}$ depende implicitamente de todos os elementos do sistema ($\mathbf{p}$) através do vetor de velocidades local $\mathbf{u}$, conforme mostrado anteriormente na Eq. 2.40. O vetor $\mathbf{u}$ por sua vez é parte do vetor de velocidades global $\mathbf{U}$ e isso implica que:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{t_{c_{eq}}} &= f(\mathbf{u}) \quad \text{e} \quad \mathbf{u} = g(\mathbf{U}(\mathbf{p})) \\ \Rightarrow \mathbf{k}_{t_{c_{eq}}} &= f(\mathbf{U}(\mathbf{p}), \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (5.38)$$

Portanto a derivada do segundo termo da Eq. 5.36 ($\mathbf{K}_{tc}$)_g pode ser escrita como:

$$\frac{d \sum_{i=1}^N (\mathbf{k}_{t_{c_e}})}{d\rho_i} = \frac{d\mathbf{K}_{t_{c_g}}}{d\rho_i} = \frac{\partial \mathbf{K}_{t_{c_g}}}{\partial \rho_i} + \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \rho_i} \right)^T \frac{\partial \mathbf{K}_{t_{c_g}}}{\partial \mathbf{U}} \quad (5.39)$$

O primeiro termo da Eq. 5.39 pode ser calculado localmente (a derivada depende somente do próprio elemento i), a partir da equação 2.39, conforme mostrado na equação a seguir:

$$\frac{\partial \mathbf{K}_{t_c}}{\partial \rho_i} = \frac{\partial \mathbf{k}_{t_c}}{\partial \rho_i} = \mathbf{w}_{PG}^T \frac{\partial \rho_m}{\partial \rho_i} c_p (\mathbf{w}_G \mathbf{U})^T \nabla \mathbf{w}_G + \mathbf{w}_{PG}^T \rho_m \frac{\partial c_p}{\partial \rho_i} (\mathbf{w}_G \mathbf{U})^T \nabla \mathbf{w}_G + (\nabla \mathbf{w}_G)^T \frac{\partial k}{\partial \rho_i} (\nabla \mathbf{w}_G) \quad (5.40)$$

onde $\mathbf{w}_G$ e $\mathbf{w}_{FG}$ são as matrizes de forma do elemento (Eq. 2.31 e 2.34, respectivamente) e ρ_m , c_p , k são as propriedades do material (Eq. 2.6).

Por outro lado, o segundo termo da Eq. 5.39 deve ser calculado globalmente (a derivada em relação ao elemento i depende de todos os elementos), sendo mais custoso computacionalmente.

A derivada parcial da velocidade ($\partial \mathbf{U} / \partial \rho_i$) é obtida conforme mostrado anteriormente na Eq. 5.14. O último termo da Eq. 5.39 é obtido, neste caso, utilizando-se o método de diferenças finitas, mais simples do ponto de vista de implementação, porém, mais custoso computacionalmente. Foi escolhida esta abordagem devido à complexidade da obtenção analítica da derivada parcial $\partial \mathbf{K}_{tcg} / \partial \mathbf{U}$. Apesar de ser potencialmente mais custosa do que o cálculo analítico, essa abordagem foi escolhida levando-se em consideração que a velocidade $\mathbf{u}$ de um determinado nó i afeta apenas a matriz de rigidez térmica (local) dos elementos que sejam formados por este mesmo nó, ou seja, somente afeta os elementos que contenham este nó, tornando o cálculo deste termo "localizado". Em outras palavras, a derivada $\partial \mathbf{K}_{tcg} / \partial \mathbf{U}$ pode ser calculada como uma composição de derivadas localizadas. Além disso, o cálculo desta derivada é realizado apenas uma vez por iteração, reduzindo em parte o tempo de processamento, dado que esta é a parcela de maior custo computacional.

Finalmente, a partir da função multi-objetivo (Eq. 5.4), e dos gradientes de Φ e Γ , calculados previamente (Eq. 5.18 e 5.32, respectivamente), calcula-se o gradiente da função combinada Ψ , como:

$$\begin{aligned} \Psi &= u \log(\Phi) + w \log(\Gamma) \\ \Rightarrow \frac{d\Psi}{d\rho_i} &= u \frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{d\rho_i} + w \frac{1}{\Gamma} \frac{d\Gamma}{d\rho_i} \end{aligned} \quad (5.41)$$

A verificação do cálculo dos gradientes é discutida no Apêndice B.

5.5 Pós-Processamento

Após o processo de otimização, são obtidos como resultados, a distribuição de pseudo-densidades no domínio de projeto, os campos de velocidade e pressão do fluido no interior do

sistema, bem como a distribuição de temperaturas no mesmo. Estes resultados são combinados e são realizados cálculos posteriores para obtenção de outros resultados relevantes à análise de desempenho da topologia final, tais como o cálculo do fluxo de calor no sistema.

5.5.1 Fluxo de Calor

O fluxo de calor é uma grandeza vetorial que denota o fluxo de energia que atravessa uma determinada unidade de área, por unidade de tempo, nos processos de transferência de calor. Neste trabalho são consideradas basicamente duas formas de transferência de calor: condução e convecção térmica, conforme mostrado anteriormente na equação de conservação de energia (Eq. 2.6).

Para o cálculo do fluxo de calor, de um determinado ponto, através de condução térmica é aplicada a Lei de Fourier, que propõe que o fluxo de calor ($\mathbf{q}_D$) é proporcional ao gradiente de temperatura, através do coeficiente de condutividade térmica (k), de modo que:

$$\mathbf{q}_D = -k\nabla T \quad (5.42)$$

Neste caso, o sinal negativo evidencia que o fluxo de calor tem sentido contrário ao gradiente de temperaturas, ou seja, o fluxo de calor é sempre da superfície mais quente para a superfície mais fria.

No caso do cálculo do fluxo de calor ($\mathbf{q}_C$) através de convecção térmica, utiliza-se as informações do campo de velocidades ($\mathbf{u}$) e da distribuição de temperatura absoluta (T [K]) no domínio, conforme a equação a seguir:

$$\mathbf{q}_C = \rho_m c_p \mathbf{u} T \quad (5.43)$$

Neste caso, a direção e o sentido do fluxo de calor acompanham o vetor de velocidades ($\mathbf{u}$), distribuindo o calor de acordo com o escoamento do fluido.

Portanto, o vetor de fluxo de calor total ($\mathbf{q}$) de uma é calculado a partir da soma dos fluxos de calor condutivo ($\mathbf{q}_D$) e convectivo ($\mathbf{q}_C$):

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_D + \mathbf{q}_C = -k\nabla T + \rho_m c_p \mathbf{u} T \quad (5.44)$$

6 Resultados

Inicialmente foram realizados alguns testes com a rotina implementada, para verificar os resultados considerando somente perda de carga, comparando com os resultados obtidos na literatura (BORRVALL; PETERSON, 2003). Ao final, são mostrados resultados envolvendo a formulação multi-física, combinando os efeitos do escoamento e da troca de calor. Como parâmetros de controle da otimização, tem-se os fatores de penalização (vide capítulo 3), os quais são, q , que é o fator de penalização do modelo de escoamento de fluido (Eq. 3.3), e p_1 , p_2 e p_3 (Eq. 3.4) que são, respectivamente, os fatores de penalização da condutividade térmica (k), calor específico (c_p) e densidade do material (ρ_m). As propriedades físicas dos materiais utilizados neste trabalho são dadas na Tabela 1.

Material	$k [W/m \cdot K]$	$c_p [J/Kg \cdot K]$	$\rho_m [Kg/m^3]$	$\mu [N \cdot s/m^2]$
Água	0,61	4180	1000	0,001
Alumínio	237	900	2700	--
Cobre	394	383	8960	--

Tabela 1 - Propriedades termo-físicas dos materiais utilizados.

6.1 Canal em curva de 90° (“cotovelo”)

Os primeiros testes realizados com o programa implementado do MOT foram baseados nos resultados apresentados por Borrvall e Petersson (2003) e Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005), e servem como forma de aferir os resultados obtidos neste trabalho. O primeiro refere-se a uma curva em “cotovelo”, no qual há uma entrada e uma saída, conforme ilustrado na Figura 6.1, e cuja função objetivo visa minimização da perda de carga. A velocidade é imposta sob a forma de um perfil parabólico de velocidade, com máximo 1m/s, obedecendo-se a condição de continuidade entre entrada e saída.

Figura 6.1 – Modelo de teste para canal em curva.

A figura 6.2 ilustra o resultado obtido para diversas frações de volume escolhidas. As regiões em branco são compostas por fluido e as pretas por material sólido. Como esperado, quanto maior a fração de volume, maiores as regiões de fluido (branco). Em relação aos valores da função objetivo, observa-se que as perdas de carga são menores para soluções com maior volume de fluido, até o limite da Figura 6.2e, sem restrição da fração de volume, em que praticamente todo o domínio é preenchido por fluido. Porém, como forma de comparação entre diferentes soluções, é utilizada a restrição de fração de volume. Todos os resultados foram obtidos para uma malha de 100x100 elementos, totalizando cerca de 30.000 graus de liberdade, utilizando-se o método de continuação, iniciando a otimização com penalização $q=0,01$ e após 15 iterações altera-se a penalização para $q=0,1$.

Figura 6.2 - Resultados obtidos para variação da fração de volume (V); (a) $V=0.25$; (b) $V=0.4$; (c) $V=0.6$; (d) $V=0.7$; (e) sem restrição de volume.

Na Figura 6.3a pode-se visualizar a distribuição dos vetores de velocidade no domínio otimizado. Ao lado, na Figura 6.3b, a magnitude do campo de velocidades.

Figura 6.3 – Resultados no projeto otimizado do canal em curva ($V=0.4$); (a) vetores de velocidade; (b) módulo da velocidade; (c) campo de pressões.

Conforme citado anteriormente, o elemento utilizado para o cálculo dos campos de velocidade e pressão apresenta oscilações no campo de pressões devido às incompatibilidades na discretização do domínio. A distribuição de pressões mostrada na figura 6.3 foi obtida após a filtragem de média do resultado, de modo a eliminar as oscilações espúrias na resposta.

A Figura 6.4 mostra a curva de convergência da função objetivo (perda de carga) ao longo das iterações, para a solução da Fig. 6.2(a).

Figura 6.4 - Curvas de convergência da solução numérica.

Na Figura 6.5, são mostrados os resultados da otimização ao longo do processo, para uma fração de volume $V=0,25$. Na figura, é possível visualizar os efeitos da aplicação do método da continuação no processo de otimização. A partir do domínio inicial (quadro1), com densidades distribuídas uniformemente, são realizadas 15 iterações com baixa penalização ($q=0,01$), representadas pelos quadros 2, 3 e 4, nos quais pode-se visualizar a grande presença de regiões de densidades intermediárias (cinzas). A partir da 16ª iteração (quadros 5, 6 e 7), a penalização é aumentada ($q=0,1$), reduzindo a presença de escalas de cinza no domínio. Ao final, aumenta-se a penalização ($q=1$), eliminando a presença de escalas de cinza no projeto, obtendo uma solução de caráter discreto. Em decorrência da alteração do fator de penalização durante a otimização, há a presença do pico visto na curva de convergência da função objetivo, na Figura 6.4.

Figura 6.5 - Iterações ao longo da otimização.

Outra análise realizada consiste no estudo de dependência de malha, no qual deve-se estudar a influência do nível de discretização da malha nos resultados. Os resultados obtidos estão ilustrados na Figura 6.6.

Figura 6.6 - Verificação de dependência de malha: (a) 20x20 elementos; (b) 40x40 elementos; (c) 80x80 elementos.

Os resultados da Figura 6.6 foram obtidos para o modelo da Figura 6.2, com fração de volume $V=0.4$ para todas as malhas. Conforme esperado e mostrado em Borrvall e Petersson (2003) e por Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005), os resultados obtidos pelo MOT nesta aplicação não são afetados pelo nível de discretização.

6.2 Bocal/Difusor

Outro exemplo encontrado na literatura é o projeto de bocais e difusores otimizados. O problema é descrito conforme o domínio de projeto mostrado na Figura 6.7, observando-se a continuidade das vazões de entrada e saída.

Figura 6.7- Domínio de Projeto de Difusor de Escoamento.

A função objetivo a ser minimizada é perda de carga ao longo do bocal.

Os resultados obtidos para uma fração de volume $V=0.5$, para diferentes discretizações são mostrados na Figura 6.8, mostrando resultados (sem pós-processamento) idênticos em ambos, evidenciando a independência de malha.

Figura 6.8 – Projeto de bocal para diferentes discretizações: (a) 60x60 elementos; (b) 120x120 elementos.

Os resultados obtidos foram idênticos aos resultados da literatura (BORRVALL; PETERSSON, 2003), mostrados anteriormente na Figura 3.3. Novamente aplicou-se o método da continuação, com $q=0,01$ no início e $q=0,1$ ao final da otimização.

As curvas de convergência referentes ao projeto do bocal são mostradas na Figura 6.9 e o módulo da velocidade na Figura 6.10a, bem como a distribuição de pressões médias na Figura 6.10b.

Figura 6.9 - Curvas de convergência no projeto do bocal.

Figura 6.10 – Resultados para campos: (a) de velocidade; (b) de pressão.

6.3 Canal Duplo

Neste exemplo, é retomado o problema mostrado na Figura 1.4. O problema proposto é composto por dois pontos de entrada e dois pontos de saída, cada um com um perfil parabólico de velocidade, conforme mostrado na Figura 6.11. A altura do domínio de projeto é fixa ($h=1$) enquanto o comprimento (δ) é variável, de modo que se possa verificar sua influência na solução final.

Figura 6.11 - Domínio de projeto de canal duplo.

Foram realizadas verificações considerando diferentes comprimentos, conforme mostrado na Figura 6.12, nas quais o objetivo é a minimização da perda de carga ao longo dos canais.

Figura 6.12 - Resultados para o projeto de canal duplo: (a) $\delta=1$, malha de 40x40 elementos; (b) $\delta=1$, malha de 80x80 elementos; (c) $\delta=1,5$, malha de 60x40 elementos; (d) $\delta=1,5$, malha de 120x80 elementos.

Analisando a figura, pode-se constatar que à medida que o comprimento do domínio aumenta, torna-se vantajoso unir os dois canais no interior do domínio, o que se explica pelo

fato de que um canal com a vazão unificada apresenta perda de carga menor do que dois canais independentes. Ainda na Figura 6.12 é possível verificar a independência do nível de discretização na solução do problema.

Neste exemplo, foi aplicado o método da continuação, para evitar mínimos locais na solução. Inicialmente aplicou-se um fator de penalização $q=0,01$, obtendo-se uma solução mais próxima do mínimo global (Figura 6.13), porém com maiores regiões de “cinza”. Ao final, a otimização foi conduzida com fator de penalização $q=0,1$, que permitiu eliminar as regiões de escalas de cinza (Figura 6.12(d)).

Figura 6.13 - Método da continuação (solução intermediária, obtida para $q=0,01$).

Na Figura 6.14 são mostrados os resultados dos campos de velocidade e pressão na solução final. Na Tabela 2 são mostrados os valores da função objetivo para as duas topologias obtidas na Figura 6.12 (b e d). Verifica-se que apesar de um comprimento maior ($\delta=1,5$) na solução da Figura 6.12d, o valor da função objetivo é menor do que o valor obtido para o canal menor ($\delta=1$), da Figura 6.12b.

Figura 6.14 - Resultados obtidos para a solução final; campos de: (a) velocidade; (b) pressão.

Comprimento do canal (δ)	Φ
$\delta=1$	23,83
$\delta=1,5$	22,28

Tabela 2 - Comparação da função objetivo para o canal duplo.

6.4 Escoamento externo

Outro exemplo de teste realizado consiste em um escoamento externo em que há um escoamento de entrada na região esquerda do domínio com a saída à direita, conforme mostrado na Figura 6.15, visando também a minimização da energia dissipada.

Figura 6.15 – Domínio de projeto para escoamento externo.

Os resultados para diferentes frações de volume estão ilustrados na Figura 6.16. Nesta análise foi aplicada uma malha de 80x80 elementos, totalizando cerca de 20.000 graus de liberdade.

Figura 6.16 - Perfis obtidos para diferentes frações de volume; (a) $V=0,85$; (b) $V=0,9$; (c) $V=0,95$;

É interessante notar na topologia obtida que as regiões frontal e traseira das regiões sólidas apresentam um ângulo de aproximadamente 90° , conforme observado por Borrvall e Peterson (2003) em sua implementação e que havia sido previamente obtido e discutido nos estudos de otimização de forma de Pironneau (1973).

Os resultados para a distribuição de velocidades e pressões estão mostrados na Figura 6.17.

Figura 6.17 - Resultados obtidos para a solução final; campos de: (a) velocidade; (b) pressão.

6.5 Canal com presença de obstáculos

Decorridos os primeiros testes, pôde-se testar outras condições de domínio de projeto. Inicialmente foi proposta a inclusão de um obstáculo ao escoamento do problema, conforme mostrado na Figura 6.18, em que mais uma vez o objetivo é minimizar a perda de carga.

Figura 6.18 – Teste de canal em curva com inclusão de obstáculo.

Os resultados obtidos, para diferentes frações de volume, estão ilustrados na Figura 6.19. Nela, nota-se na região central, a formação de “bicos”. Essa característica é a mesma obtida na Figura 6.16, e da mesma forma, os ângulos formados por estes “bicos” são aproximadamente iguais a 90° .

Figura 6.19 – Canal em curva com obstáculo, para diferentes frações de volume; (a) $V=0,4$; (b) $V=0,6$; (c) $V=0,8$.

Outro exemplo não-trivial foi testado, apresentando obstáculos ao escoamento, sob a forma de regiões sólidas, conforme ilustrado na Figura 6.20.

Figura 6.20 - Canal contendo regiões fixas (obstáculos) no domínio de projeto. Medidas em mm.

Os resultados obtidos, para diferentes valores de fração de volume, estão apresentados na Figura 6.21. Na Figura 6.22 pode-se visualizar a distribuição de velocidades e pressões do escoamento na configuração ótima obtida para a fração de volume $V=0,5$.

Figura 6.21 - Canal com inclusão de obstáculos, para diferentes frações de volume; (a) $V=0,25$; (b) $V=0,5$.

Figura 6.22 - Resultados para a topologia obtida: (a) módulo de velocidades; (b) campo de pressões.

6.6 Maximização de Velocidade em uma dada direção

Existem aplicações em que é necessário maximizar a velocidade do escoamento num determinado ponto e numa direção específica de interesse.

Neste caso, é aplicada a função objetivo de maximização da velocidade (Eq. 4.4) para se obter a velocidade máxima num ponto específico do domínio de projeto, dadas as condições de contorno do problema. A Figura 6.23 ilustra o problema proposto, que consiste basicamente em maximizar a componente de velocidade de escoamento (u_{out}) no sentido oposto ao de entrada. Este problema é uma modificação de exemplos propostos por Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005).

Figura 6.23 - Domínio de projeto de um reversor de escoamento.

Os resultados obtidos para a distribuição de material são mostrados na Figura 6.24, para diferentes discretizações, bem como a curva de convergência do problema (Figura 6.25) e a distribuição de velocidades na direção de interesse (Figura 6.26). Para a otimização foi utilizado fator de penalização inicial $q=0,01$, com o método da continuação, variando este valor, até atingir $q=10$.

Na Figura 6.26a pode-se visualizar que a componente horizontal da velocidade na região central foi maximizada no sentido de interesse, com módulo de aproximadamente $u=4\text{m/s}$.

Neste exemplo foi utilizada a técnica de projeção, com raio de projeção 0,1 e a técnica de continuação, com penalização inicial $q=0,01$ e penalização final, $q=1$.

A Figura 6.26b mostra a distribuição de pressões no domínio.

Figura 6.24 - Distribuição de densidades: (a) 40x40 elementos; (b) 80x80 elementos.

Figura 6.25 - Curvas de convergência da velocidade no ponto de interesse (u_{out}).

Figura 6.26 – Resultados para a solução final do reversor: (a) módulo da velocidade; (b) componente horizontal da velocidade; (c) campo de pressões.

6.7 Maximização de dissipação Térmica

Para verificar o funcionamento da função objetivo relacionada à dissipação térmica através do MOT, foi proposto um exemplo envolvendo condução pura dentro de um dissipador de calor, cuja proposição é mostrada na Fig. 6.27. O problema proposto consiste em um domínio sujeito a uma fonte de calor distribuída uniformemente ($\dot{q}$) por todo o domínio, com uma única região de temperatura especificada ($T=T_0$), por onde o calor é removido. Um exemplo típico deste tipo de aplicação é a dissipação de calor num microprocessador, o qual gera uma grande quantidade de calor em pequenas superfícies.

Figura 6.27 - Domínio de projeto de dissipador de calor.

Na formulação da otimização multi-objetiva (Eq. 4.12), define-se os parâmetros $u=1$ e $w=1000$, caracterizando uma otimização envolvendo prioritariamente a troca térmica.

Neste caso específico, os materiais distribuídos são puramente condutivos, desprezando-se efeitos de convecção térmica. Um dos materiais (branco) possui condutividade térmica de $k_1=1000$ e o outro (preto) possui condutividade térmica $k_2=1$. Os resultados para uma fração de volume $V=0,4$ são mostrados na Fig. 6.28, em conformidade com os resultados obtidos em Gersborg-Hansen, Bendsøe e Sigmund (2006). Neste exemplo $\dot{q} = 1W/m^3$ e $T_0=0^\circ C$.

Figura 6.28 - Distribuição de densidades: (a) sem projeção; (b) projeção, 40x40 elementos; (c) projeção, 80x80 elementos.

A distribuição de temperaturas,e o fluxo de calor são mostrados na Fig. 6.29.

Figura 6.29 - Distribuição de temperaturas (a) e fluxo de calor total (b) no dissipador de calor.

6.8 Otimização Multi-objetiva

A seguir, são mostrados os resultados da implementação da função multi-objetiva, descrita na Eq. 4.12. A partir do exemplo mostrado, de condução térmica pura, inclui-se os efeitos de convecção térmica. Neste caso, são utilizadas as propriedades da água como fluido de trabalho. O domínio de projeto e as condições de contorno são mostrados de forma genérica na Fig. 6.30, assim como o modelo considerando a condição de simetria do problema (velocidade horizontal $u_x=0$ e fluxo de calor $q_n=0$), que reduz o custo computacional. Na figura são mostrados também alguns parâmetros variados nas análises promovidas, tais como a velocidade máxima do perfil de velocidades parabólico de entrada (v_{max}), a largura do domínio (L) e a altura (H). O domínio é submetido a uma fonte de calor ($\dot{q}$) distribuída

uniformemente em todo ele (tanto regiões sólidas quanto fluidas), com 2 regiões de saída na parte inferior, onde tem-se pressão relativa nula. Nas demais fronteiras do domínio são aplicadas condições de parede adiabática. São distribuídos 2 materiais: alumínio e água (vide Tabela 1).

Figura 6.30 - Domínio de projeto e condição de simetria.

Na otimização multi-objetiva, foram utilizados os parâmetros de ponderação u e w da equação 4.12 para controlar a influência da troca de calor na otimização, sendo que para valores tais que $w \gg u$ tem-se uma otimização prioritariamente de troca térmica, enquanto que para $u \gg w$, tem-se um problema de otimização de perda de carga. Portanto, para estudar o desempenho do software desenvolvido, são realizadas otimizações baseadas em combinações destes parâmetros, de forma a analisar a influência de cada um destes sobre a topologia otimizada final. É utilizada uma malha de 40×20 elementos (simétrica) nas análises a seguir.

6.8.1 Canal unitário em larga escala ($L=1, H=1$)

Neste exemplo, definem-se as dimensões principais do domínio de projeto, com largura e altura iguais a 1 metro. Na região central superior há a entrada de fluido com um perfil parabólico de velocidades, de valor máximo 1m/s. Considera-se uma fonte de calor distribuído no domínio $\dot{q} = 175\text{kW}/\text{m}^3$.

Foram realizadas otimizações variando-se a ponderação das diferentes funções objetivo (u e w), conforme mostrado a seguir, na Fig. 6.31. Nos resultados mostrados, quanto maior o valor de w , mais otimizado será em relação à troca de calor, enquanto que maiores valores de u refletem canais de menor perda de carga. Neste caso, foi utilizado o método da continuação, iniciando com fator de penalização $q=0,01$, aumentado até $q=10$ (Figura 3.11). Na análise térmica, os fatores de penalização das propriedades do material, k , c_p e ρ_m (p_1 , p_2 e p_3) são iniciados respectivamente com valores, 1, 1 e 1, e ao final da otimização, seus valores são 3, 3 e 2 (modelo SIMP da Figura 3.7).

Conforme o esperado, quanto maior o valor do fator de ponderação w na função multi-objetiva, menor será o valor da função Γ , o que em suma, reflete uma menor temperatura média na topologia obtida. Já a função Φ será menor à medida que se aumenta o valor do fator de ponderação u , relacionado à minimização de perda de carga, conforme verificado nos exemplos a seguir.

Figura 6.31 - Resultados obtidos para canal de larga escala (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica).

A Figura 6.32 mostra a distribuição de temperaturas na topologia final obtida para $u=1$ e $w=50$, assim como o campo de velocidades e os fluxos de calor, condutivo e convectivo.

Figura 6.32 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=50$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

Já na Figura 6.33 é mostrada a distribuição de temperaturas e velocidades para $u=1000$ e $w=1$, configurando uma otimização prioritariamente de minimização de perda de carga. Neste caso, pode-se verificar que o fluxo de calor no domínio é menor em relação ao exemplo anterior, que priorizava a dissipação térmica do sistema. Em consequência, as temperaturas neste canal também são mais elevadas. Em comparação com o exemplo da Figura 6.32a, que apresenta uma distribuição de temperaturas mais dispersa, verifica-se uma distribuição de temperaturas mais concentrada, caracterizada principalmente pelo escoamento central com uma temperatura muito próxima à temperatura de entrada, e o pico de temperaturas ($T \sim 375\text{K}$) distribuído na região superior, e pelo calor conduzido pela convecção.

Figura 6.33 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1000$ e $w=1$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

Na Figura 6.34 são mostradas as curvas de convergência das 2 funções objetivos (perda de carga e dissipação térmica), para cada combinação de pesos aplicados na função multi-objetiva. Pode-se verificar que a medida que o valor de u aumenta, a função Φ tende a ser minimizada, ao passo que com maiores valores de w , a função Γ tem seu valor reduzido.

Figura 6.34 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.

Alterando-se a faixa de penalizações utilizadas no método da continuação, tem-se uma variação nos resultados, conforme mostrado na Fig. 6.32, no qual as topologias apresentam-se mais definidas. O domínio estudado é o mesmo utilizado no exemplo anterior, porém as penalizações são variadas de modo que: $q=0,01$ até $0,1$; $p_1=1$ até 2 ; $p_2=1$ até 2 e $p_3=1$. Novamente, o aumento de u leva a uma menor perda de carga, enquanto o aumento de w leva a uma maior dissipação de energia e portanto, uma menor temperatura média.

Figura 6.35 - Resultados obtidos para canal de larga escala com penalização alterada. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica)

Neste caso, a topologia obtida apresenta menos escalas de cinza, o que proporciona um escoamento melhor do fluido (menores valores de Φ), e uma melhor troca de calor do canal, conforme mostrado na Fig. 6.37. A função de dissipação térmica (Γ), neste caso específico em que há uma fonte de calor distribuída uniformemente no domínio, pode ser interpretada como a temperatura média global do domínio.

O calor é melhor removido do sistema através da criação de canais auxiliares, ao contrário do exemplo anterior, onde basicamente somente os canais principais contribuíam para a troca de calor no interior do domínio. Na Figura 6.36, as curvas de convergência para o exemplos mostrados acima.

Figura 6.36 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.

Figura 6.37 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=50$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

Variando-se a velocidade de entrada do fluido na entrada para $v_{max}=0,5\text{m/s}$, obtêm-se os resultados mostrados na Figura 6.38.

Figura 6.38 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,5\text{m/s}$.

Para um perfil de velocidades de entrada do fluido com $v_{max}=0,25\text{m/s}$, obtêm-se os resultados mostrados na Figura 6.39.

Figura 6.39 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25\text{m/s}$.

A Figura 6.40 mostra a resposta da topologia obtida para $u=1$ e $w=100$. Neste caso, conforme esperado, devido à menor velocidade do escoamento, a troca de calor é reduzida, e

as temperaturas são maiores, porém, ainda se observa a formação de ramificações no canal, formando mais interfaces sólido/fluido, levando a uma distribuição mais uniforme do calor. As ramificações do escoamento dão origem a "ilhas" de material sólido, que absorvem o calor da fonte de calor distribuído e transferem-no para outras regiões do domínio.

Figura 6.40 - Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, com $v_{\max}=0,25\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; ((c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

Utilizando-se a mesma configuração aplicada no exemplo anterior, ou seja, $v_{\max}=0,25\text{m/s}$, foi realizada a otimização considerando-se um material sólido diferente, neste caso, o cobre (Tabela 1). O cobre, apresenta uma condutividade térmica mais alta (cerca de 70% maior), além de possuir uma densidade maior que a do alumínio (cerca de 3 vezes maior). Com este exemplo deseja-se verificar o comportamento da rotina de otimização na distribuição de diferentes materiais no domínio de projeto e a sua influência nas respostas obtidas.

Figura 6.41 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25\text{m/s}$. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica)

Na Fig. 6.41 são mostradas as topologias finais obtidas para diferentes pesos na função multi-objetiva, e na Fig. 6.42 as respostas de temperatura e velocidades para uma das soluções obtidas. Verifica-se uma leve alteração na característica das topologias obtidas, principalmente devido à maior condutividade térmica do cobre em relação ao alumínio. Porém, neste caso, observa-se uma maior presença de escalas de cinza nas topologias obtidas, do que observado para o alumínio como material sólido (Fig. 6.39).

Figura 6.42- Respostas da topologia obtida para $L=1$ e $H=1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, material sólido cobre, com $v_{max}=0,25\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

Como forma de eliminar a presença dessas regiões de cinza, os valores da penalização aplicados nos modelos de material térmicos (p_1 , p_2 e p_3) foram elevados, passando a abranger a faixa de 1 (inicial) a 9 (final). Desta forma, obteve-se as topologias mostradas na Fig. 6.43, em que pode-se observar uma topologia mais "limpa", com a presença de menos escalas de cinza. Pode-se notar também que houve uma diminuição considerável nos valores das funções objetivo Φ e Γ , em relação ao exemplo anterior (Fig. 6.41), caindo de 1,647 para 0,674 e de $2,551 \times 10^7$ para $2,549 \times 10^7$, respectivamente, para o caso em que $u=1$ e $w=100$. Nota-se a presença de regiões em que o fluido apenas "preenche" o domínio de projeto, sem necessariamente escoar, somente distribuindo o calor.

Figura 6.43 - Resultados obtidos para canal de larga escala com velocidade $v_{max}=0,25\text{m/s}$.

6.8.2 Canal em média escala ($L=0,1$, $H=0,1$)

Estuda-se um canal em média escala, de $100 \times 100\text{mm}$, submetido à mesma fonte de calor uniforme $\dot{q} = 175\text{kW/m}^3$, baseado no modelo da Fig. 6.30. Inicialmente são mostrados resultados considerando-se as propriedades do alumínio como material base, para uma velocidade máxima $v_{max}=0,1\text{m/s}$ (Fig. 6.44) e posteriormente para uma faixa menor de velocidades, $v_{max}=0,05\text{m/s}$ (Fig. 6.45), com leve aumento da função Γ .

Figura 6.44 - Resultados obtidos para canal de média escala com velocidade $v_{max}=0,1$ m/s.

Figura 6.45 - Resultados obtidos para canal de média escala com velocidade $v_{max}=0,05$ m/s.

Nos exemplos mostrados, a continuação na penalização teve valor inicial de $q=0,001$ até $q=0,1$. Os valores de penalização para a otimização térmica foram: $p_1=1$ até 2; $p_2=1$ até 2; e $p_3=1$.

Também neste caso, porém em menor escala, observou-se a formação de ramificações que auxiliam na distribuição de calor pelo domínio de projeto.

A Figura 6.46 mostra a distribuição das temperaturas, velocidades e fluxos de calor no interior do domínio otimizado da Figura 6.45.

Figura 6.46 - Respostas da topologia obtida para $L=0,1$ e $H=0,1$, com pesos $u=1$ e $w=100$, material sólido alumínio, com $v_{max}=0,05\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

6.8.3 Canal em pequena escala ($L=0,040$, $H=0,040$)

Neste caso, estuda-se um canal em escala reduzida, de $40 \times 40\text{mm}$, submetido a uma fonte de calor de 175kW/m^2 , distribuído uniformemente no domínio, baseado no modelo da Figura 6.30. Este valor de calor distribuído é o valor aproximado de dissipação de um microprocessador de um computador pessoal. Neste caso, é estudada a influência da velocidade de entrada nos resultados da otimização, conforme são variados os pesos das funções objetivo. Na figura 6.47 são mostrados resultados para um perfil de velocidades na entrada com valor máximo, $v_{max}=10\text{mm/s}$. Observa-se que não é possível obter uma topologia "discreta", havendo muita presença de cinzas na solução. Isso se deve principalmente à escala de operação destes canais, bem como às velocidades as quais estão submetidos, levando em consideração o número de Peclet (Pe) do problema (Eq. 2.33).

Nestes exemplos mostrados, a continuação na penalização teve valor inicial de $q=0,01$ até $q=1$. Os valores de penalização para a otimização térmica foram: $p_1=1$ até 3; $p_2=1$ até 3; e $p_3=1$ até 3.

Figura 6.47 - Resultados obtidos para o canal em pequena escala e $v_{max}=10\text{mm/s}$.

Considerando que as propriedades do material envolvidos na equação citada são fixas para o material utilizado, tem-se que o Pe torna-se uma função do produto da velocidade pelo comprimento característico do canal. De forma geral, isso reflete que em termos comparativos, as soluções dos exemplos anteriormente mostrados trabalham em uma faixa maior de Pe . Conforme foi diminuída a escala do problema, não foi possível obter-se uma solução livre de cinzas, pois os efeitos da condução térmica começam a ter predomínio sobre a otimização, e neste caso, uma "solução cinza" tem predomínio numérico.

Como estudo, foi aumentada a faixa da velocidade de entrada do canal, com $v_{max}=0,1\text{m/s}$, aumentando-se conseqüentemente o valor da faixa de Reynolds e do Peclet. Os resultados obtidos estão mostrados na Fig. 6.48. Pode-se visualizar que a topologia do canal converge para uma solução discreta, livre de escalas de cinza. Pode-se perceber também a formação de ramificações que favorecem a distribuição do calor pelo domínio. Percebe-se, que em comparação com os resultados da Fig. 6.47, a função Γ aumentou, refletindo uma menor dissipação térmica. Nesse caso, a solução "cinza" é numericamente mais vantajosa em termos de dissipação, distribuindo melhor o calor, porém, apresenta o problema da difícil manufatura.

Figura 6.48 - Resultados obtidos para o canal em pequena escala e $v_{max}=0,1\text{m/s}$. (Φ - função de perda de carga; Γ - função de dissipação térmica)

Na figura 6.49 são mostrados resultados para um perfil de velocidades com $v_{max}=0,1\text{m/s}$, com penalizações:

Figura 6.49 - Respostas da topologia obtida para $L=0,04$ e $H=0,04$, com pesos $u=100$ e $w=1$, material sólido alumínio, com $v_{max}=0,1\text{m/s}$: (a) temperaturas; (b) velocidades; (c) e (e) fluxo de calor condutivo; (d) e (f) fluxo de calor convectivo.

A Figura 6.50 mostra as curvas de convergência das funções objetivo ao longo das iterações para os diferentes valores de ponderação das mesmas. Novamente, para maiores valores de u , a função Φ é minimizada, enquanto que para maiores valores de w , a função Γ tem maior peso na otimização multi-física.

Figura 6.50 - Curvas de convergência para diferentes ponderações: (a) perda de carga; (b) dissipação térmica.

7 Conclusões

7.1 Discussão e Conclusões

De forma geral, o projeto de dispositivos de microcanais, utilizando o MOT, mostrou-se viável e atendeu aos objetivos propostos. A partir dos resultados obtidos, será realizada uma breve discussão e as devidas conclusões serão aqui discorridas.

7.1.1 Otimização considerando somente o escoamento fluido

A aplicação do modelo de Brinkman, combinando o escoamento de Stokes com o modelo de escoamento em meios porosos (Darcy) mostrou-se eficiente, permitindo descrever de forma realista os dois tipos de material envolvidos na otimização topológica (fluido e sólido). Um dos aspectos mais importantes durante o processo de otimização é a escolha dos fatores de penalização envolvidos neste modelo. Conforme mostrado na seção de resultados, há uma grande influência do fator de penalização nos resultados obtidos, principalmente no que concerne a presença ou a ausência de escalas de cinza.

No caso do projeto de curva em cotovelo, escoamento externo e do difusor/bocal (Fig. 6.2, 6.6, 6.8, 6.12 e 6.16), em comparação com os resultados obtidos na literatura (BORRVALL; PETERSSON, 2003), constata-se a coerência dos resultados apresentados, através do qual pode-se verificar a funcionalidade do software desenvolvido.

Verificou-se a importância do método de continuação ao longo do processo de otimização em diversos casos, o qual permitiu evitar os ótimos locais na função objetivo, associados à utilização de fatores de penalização muito altos desde o início da otimização, e ao mesmo tempo permitiu a obtenção de soluções com mínima presença de escalas de cinza. Neste caso, há uma razão de compromisso entre as soluções ótimas e a questão da manufatura da topologia obtida. Embora as soluções com a presença de escalas de cinza possam ser numericamente mais eficientes, em muitos casos, esses valores intermediários configuram soluções de difícil manufatura, e por isso mostra-se a importância do controle na penalização do modelo de material ao longo da otimização.

Foram realizados testes com geometrias e condições de contorno mais complexas (Fig. 6.20 e 6.21) para verificação do comportamento do software, o qual se mostrou bastante robusto. Mesmo com o acréscimo de obstáculos ao escoamento, o algoritmo de otimização foi capaz de traçar um caminho otimizado ao longo do domínio de projeto. Além disso, neste

caso definiu-se na saída uma condição de contorno de pressão nula (definida nos elementos de contorno), ao contrário dos outros exemplos, nos quais a condição de contorno na saída era dada por um perfil pré-definido de velocidades. A vantagem de definir uma região de saída com pressão nula em detrimento a um perfil de velocidades, é que há uma maior liberdade na definição da região efetiva de saída do fluido, que não necessariamente ocupa toda a região de saída prescrita, podendo ocupar apenas uma porção da mesma.

Os resultados mostrados ilustraram também a independência da malha da solução. Foram estudados diversos problemas (Fig. 6.6, 6.8, 6.12, 6.24 e 6.28) com diferentes níveis de discretização, sendo obtidos os mesmos resultados, independentemente da malha escolhida. Em nenhum dos exemplos de otimização de perda de carga mostrados foi necessária a aplicação da técnica de projeção, devido à natureza “bem-comportada” do problema do escoamento de fluido. Neste caso, o comportamento é distinto da otimização aplicada à análise estrutural, na qual, em geral, quanto maior a discretização, mais sub-estruturas são geradas, a fim de deixar o projeto mais rígido. No problema de minimização de perda de carga, verifica-se que, em geral, quanto mais canais são gerados, maiores são as perdas de carga. Por isso as soluções deste tipo de problema tendem a não se alterar com diferentes discretizações.

Outro aspecto a se destacar é a utilização da restrição de fração de volume na solução do problema de otimização de perda de carga. Em geral, quanto mais fluido é utilizado, menor é a perda de carga dentro do domínio, devido a maior disponibilidade do meio para o escoamento. Neste trabalho, porém, adotou-se a restrição de fração de volume na solução, principalmente para efeito de comparação com os resultados obtidos na literatura, além de utilizá-la como parâmetro de comparação entre soluções.

7.1.2 Otimização considerando escoamento fluido e dissipação térmica

Quando combinados os efeitos do escoamento do fluido com a transferência de calor no sistema, pode-se obter trocadores de calor mais eficientes. O modelo desenvolvido permite uma ponderação entre as diferentes características de projeto desejadas, conforme mostrado, através dos fatores de ponderação u e w .

Foi possível obter-se canais visando prioritariamente um melhor desempenho no escoamento do fluido, e também canais visando promover uma maior transferência de calor. No caso da função de troca de calor, o objetivo principal é a remoção da maior quantidade possível de calor do sistema, dada a presença de uma fonte de calor distribuído ao longo de toda a superfície do domínio de projeto. Um exemplo típico deste caso é a aplicação em

microprocessadores, os quais geram uma grande quantidade de calor, e necessitam que esse calor seja eficientemente removido.

Pode-se verificar uma influência da escolha dos fatores de penalização nas soluções obtidas, principalmente em relação às escalas de cinza, que alteram consideravelmente o comportamento do escoamento do fluido no domínio e conseqüentemente a distribuição de temperaturas no mesmo. No caso da otimização multi-objetivo, observa-se que conforme é aumentado o peso da otimização térmica dentro do problema, existe a tendência da criação de canais "auxiliares", na forma de ramificações, ao longo do domínio, de modo a distribuir e remover mais efetivamente o calor aplicado ao sistema, utilizando-se da condução térmica. A formação destas ramificações, em contrapartida, proporciona um aumento nas perdas de carga do canal. Fica portanto criada uma razão de compromisso entre estas 2 características, e que depende, fundamentalmente, da necessidade de cada projeto.

Verificou-se também a influência da escala do problema na topologia final obtida. O comportamento da otimização varia conforme a mudança das dimensões do problema, e obviamente com relação à ordem de grandeza das velocidades de entrada dos canais. Alguns fenômenos sobressaem-se em determinadas escalas, ao passo que em outras não são verificados. Isso pode ser indicado e tem influência direta do número de Reynolds (Re) e, conseqüentemente do Peclet (Pe) do problema. Em problemas de escala reduzida, com canais menores e menores velocidades, o Reynolds é mais baixo, levando a um Peclet menor, caracterizando problemas regidos pela condução térmica (menores Pe), nos quais a solução tende a apresentar mais escalas de cinza, enquanto que para maiores valores de Pe (conseqüentemente maior Re) o problema é regido pela convecção térmica, e a solução do problema é mais bem comportada, tendendo a uma solução "preto e branco". Entretanto, em alguns casos, este aumento do Reynolds (e da velocidade) deve ser controlado, de forma a não desrespeitar as hipóteses do modelo de escoamento (modelo de Stokes), que não engloba escoamentos com número de Reynolds muito elevado.

Em termos de custo computacional, a rotina implementada mostrou algumas limitações. Trata-se de uma aplicação que exige uma grande quantidade de cálculos e processamento de dados, porém, para exemplos relativamente pequenos (até 40x40 elementos) o tempo total de processamento não chega a ser limitante para o projeto. Um fator que se mostrou limitante durante a implementação foi o gerenciamento de memória pelo *MatLab*®. Durante a aplicação do MEF, quando é feita a montagem da matriz global do sistema, o tamanho do sistema de equações fica limitado devido ao limite de memória disponível, e portanto, o número de graus de liberdade que pode ser estudado, fica limitado, e conseqüentemente, o

número de elementos que compõem a malha também. Por outro lado, a implementação em *MatLab*® facilitou a implementação em outros aspectos, principalmente graças às bibliotecas de funções já inclusas no programa, destacando-se o tratamento de matrizes esparsas, típicas em análises através do MEF, e a biblioteca de algoritmos de otimização disponível, além de bibliotecas próprias à distribuição de processamento em paralelo, em processadores de múltiplos núcleos.

A utilização do elemento bilinear na formulação do MEF aplicado às equações do escoamento de Stokes mostrou-se satisfatória na determinação do campo de velocidades, conforme mostrado no apêndice, apesar de não obedecer as condições LBB de convergência. Em relação ao MEF térmico, observou-se instabilidades numéricas na formulação de Galerkin, necessitando de uma formulação de estabilização (SUPG), que atenua o surgimento das mesmas. A formulação SUPG mostrou-se eficiente na estabilização da solução, e também pode ser verificada nos apêndices.

7.2 Trabalhos Futuros

O trabalho desenvolvido neste projeto mostrou-se bastante promissor e abrangente, permitindo o projeto sistemático de dispositivos de microcanais. Além de tudo, a aplicação do MOT no projeto de dispositivos de fluido mostrou um grande potencial de expansão.

Como trabalhos futuros, o autor sugere a aplicação de uma formulação mais abrangente para o modelo de escoamentos (GERSBORG-HANSEN; SIGMUND; HABER, 2005), considerando-se também os efeitos inerciais do escoamento e uma maior faixa de número de Reynolds, através das equações de Navier-Stokes, combinada com o modelo de transferência de calor utilizado neste projeto. Além disso, a utilização de um elemento mais robusto no que se refere às condições de convergência LBB (Apêndice A), seria aconselhável. Desta forma, é possível descrever uma gama maior de escoamentos e de efeitos proporcionados por sua interação com os canais desenvolvidos. Embora o modelo de escoamento em meios porosos aplicado neste projeto para descrever o modelo de material não seja válido para escoamentos turbulentos (valores mais altos de Reynolds) devido aos diferentes efeitos da turbulência neste tipo de meio, este modelo ainda permite matematicamente representar regiões sólidas, uma vez que sua principal função neste caso é servir como um termo de absorção, penalizando as velocidades do fluido nas regiões de baixa pseudo-densidades. Pode-se também aplicar modelos mais abrangentes em relação à transferência de calor, como por exemplo, considerar efeitos de convecção natural, na qual o escoamento do fluido se desenvolve a partir do calor

trocado, e da alteração das propriedades térmicas do fluido com a temperatura, fator que neste projeto não é considerado.

Como outra alternativa de sequência deste trabalho, o autor sugere a implementação de um modelo de otimização topológica com interação fluido-estrutural, combinando os efeitos do escoamento do fluido com o cálculo das respostas (deslocamento e tensões) em uma dada estrutura otimizável, causados pela interação entre estes dois meios. Este estudo pode ser desenvolvido visando tanto a maximização da rigidez de estruturas expostas a um escoamento, considerando eventualmente restrições de tensão na mesma, como pode ser aplicado ao desenvolvimento de dispositivos ou mecanismos flexíveis baseados em atuação controlada pelo fluido, como por exemplo atuadores hidráulicos.

Outra modificação importante, visando um aumento no desempenho do software, e principalmente visando expandir as capacidades de tamanho de domínio de projeto, é a implementação do programa em uma linguagem mais eficiente computacionalmente, como a linguagem C, que permite também um melhor gerenciamento de memória. Isso possibilitaria trabalhar com problemas maiores, com malhas mais refinadas, permitindo um melhor detalhamento da solução, ou inclusive, domínios 3D.

Por fim, o autor sugere a verificação experimental dos resultados obtidos através da aplicação do MOT neste projeto. Sugere-se desenvolver um aparato experimental para a operação e medição de dispositivos baseados em microcanais, que permitam aferir a eficácia dos dispositivos aqui projetados. Como propostas, estão: a medição das velocidades do escoamento e dos diferenciais de pressão do fluido, além da distribuição de temperaturas em pontos específicos, nos casos de trocadores de calor.

8 Referências Bibliográficas

Aage, N., T. H. Poulsen, A. Gersborg-Hansen, e O. Sigmund. "Topology optimization of large scale stokes flow problems." *Structural And Multidisciplinary Optimization* 35 (2008): 175-180.

Aragon, A. M., J. K. Wayer, P. H. Geubelle, D. E. Goldberg, e S. R. White. "Design of microvascular flow networks using multi-objective genetic algorithms." *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 197 (2008): 4399-4410.

Aranha, J.A.P., I.C. Barbeiro, R.P. Strambi, e J.R. Meneghini. *Div-Stability Condition and Spurious Pressure Modes in Discrete Navier-Stokes Equation*. Notas de Aula - Método dos Elementos Finitos Aplicado à Mecânica dos Fluidos (PME5020), São Paulo: EPUSP, 2006.

Babuska, I. "Error-bounds for finite element method." *Numerische Mathematik; V. 16* , 1971: 322-333.

Beebe, D.J., G.A. Mensing, e G.M. Walker. "Physics and applications of microfluidics in biology." *Annual Review of Biomedical Engineering* 4, 2002: pp. 261-286.

Bendsøe, M. P. "Optimal shape design as a material distribution problem." *Struct. Optim. I*, 1989: 193-202.

Bendsøe, M. P., e N. Kikuchi. "Generating optimal topologies in structural design using homogenization method." *Comput. Methods Appli. Mec. Engrg*, 71, 1988: 197-224.

Bendsøe, M. P., e O. Sigmund. *Topology Optimization - Theory, Methods and Applications*. Berlin Heidelberg: Springer Verlag, 2003.

Bendsoe, M. P., E. Lund, N. Olhoff, e O. Sigmund. "Topology optimization - broadening the areas of application." *Control And Cybernetics* 34 (2005): 7-35.

Borrvall, T., e J. Petersson. "Topology optimization of fluids in Stokes flow." *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 41, 2003: 77-107.

Bourdin, B. "Filters in topology optimization." *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 50, n. 9, 2001: pp. 2143-2158.

Brezzi, F. "On the Existence, Uniqueness And Approximation Of Saddle-Point Problems Arising From Lagrangian Multipliers." *Revue Francaise D Automatique Informatique Recherche Operationnelle; V. 8* , 1974: 129-151.

Brooks, A.N., e T.J.R. Hughes. "Streamline Upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes

Equations.” *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 32 (1-3) , 1982: pp. 199-259 .

Bruns, T. E. “Topology optimization of convection-dominated, steady-state heat transfer problems.” *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 50 (2007): 2859-2873.

Buchholz, B. A., E. A. S., M. N. Albarghouthi, F. M. Bogdan, J. M. Zahn, e A. E. Barron. “Microchannel DNA sequencing matrices with a thermally controlled "viscosity switch".” *Analytical Chemistry* 73 (2001): 157-164.

Carbonari, R. C., E. C. N. Silva, e S. Nishiwaki. “Design of Piezoelectric Multiactuated Microtools Using Topology Optimization.” *Smart Materials and Structures* 14 (2005): 1431-1447.

Carbonari, R. C., E. C. N. Silva, e S. Nishiwaki. “Optimum Placement of Piezoelectric Material in the Piezoactuator Design.” *Smart Materials and Structures* in press (2006).

Cardoso, E. L., e J. S. O. Fonseca. “Intermediate density reduction and complexity control in the topology optimization.” *In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering. CILAMCE v.20, 1999.*

Cheng, K.T., Olhoff, N. “An investigation concerning optimal design of solid elastic plates.” *Int. J. Solids Struct.* 17, 1981: pp. 305–323.

Choban, E. R., L. J. Markoski, A. Wieckowski, e P. J. A. “Microfluidic fuel cell based on laminar flow.” *Journal Of Power Sources* 128 (2004): 54-60.

Codina, R. “A stabilized finite element method for generalized stationary incompressible flows.” *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 190 (2001): 2681-2706.

Dipama, J., A. Teyssedou, e M. Sorin. “Synthesis of heat exchanger networks using genetic algorithms.” *Applied Thermal Engineering* 28 (2008): 1763-1773.

Dittrich, P. S., e A. Manz. “Lab-on-a-chip: microfluidics in drug discovery.” *Nature Reviews Drug Discovery* 5 (2006): 210-218.

Donea, J., Huerta, A. *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley & Sons, 2003.

Duan, X. B., Y. C. Ma, e R. Zhang. “Optimal shape control of fluid flow using variational level set method.” *Physics Letters A* 372 (2008): 1374-1379.

Duan, X. B., Y. C. Ma, e R. Zhang. “Shape-topology optimization of stokes flow via variational level set method.” *Applied Mathematics And Computation* 202 (2008): 200-209.

Erickson, D., e D. Q. Li. “Integrated microfluidic devices.” *Analytica Chimica Acta* 507 (2004): 11-26.

- Evgrafov, A. "Simultaneous optimization of topology and geometry of flow networks." *Structural And Multidisciplinary Optimization* 32 (2006): 99-109.
- Evgrafov, A. "The limits of porous materials in the topology optimization of stokes flows." *Applied Mathematics And Optimization* 52 (2005): 263-277.
- Evgrafov, A. "Topology optimization of slightly compressible fluids." *Zamm-Zeitschrift Fur Angewandte Mathematik Und Mechanik* 86 (2006): 46-62.
- Evgrafov, A., K. Maute, R. G. Yang, e M. L. Dunn. "Topology optimization for nano-scale heat transfer." *International Journal For Numerical Methods In Engineering* 77 (2009): 285-300.
- Figeys, D., e D. Pinto. "Lab-on-a-chip: A revolution in biological and medical sciences." *Analytical Chemistry* 72 (2000): 330A--335A.
- Franca, L. P., e S. L. Frey. "Stabilized Finite-Element Methods .2. The Incompressible Navier-Stokes Equations." *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 99 (1992): 209-233.
- Galeao, A.C., e E.G.D. Do Carmo. "A Consistent Approximate Upwind Petrov-Galerkin Method For Convection-Dominated Problems." *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 68 (1), 1988: pp. 83-95.
- Gao, J., J. D. Xu, L. E. Locascio, e C. S. Lee. "Integrated microfluidic system enabling protein digestion, peptide separation, and protein identification." *Analytical Chemistry* 73 (2001): 2648-2655.
- Gartling, D., C. Hickox, e R. Givler. "Simulation of coupled viscous and porous flow problems." *Compu. Fluid. Dyn.* 7, 1996: 23-48.
- Gerlach, T. "Microdiffusers as dynamic passive valves for micropump applications." *Sensors And Actuators A-Physical* 69 (1998): 181-191.
- Gersborg-Hansen, A., M. P. Bendsøe, e O. Sigmund. "Topology optimization of heat conduction problems using the finite volume method." *Structural And Multidisciplinary Optimization* 31 (2006): 251-259.
- Gersborg-Hansen, A., O. Sigmund, e R. B. Haber. "Topology optimization of channel flow problems." *Structural And Multidisciplinary Optimization* 30 (2005): 181-192.
- Glowinski, R., e O. Pironneau. "Finite-Element Methods For Navier-Stokes Equations." *Annual Review Of Fluid Mechanics* 24 (1992): 167-204.
- Gonzalez, M., N. Jelisavcic, R. J. Moral, D. Sahoo, G. S. Dulikravich, e T. J. Martin. "Multi-objective design optimization of topology and performance of branching networks of cooling passages." *International Journal Of Thermal Sciences* 46 (2007): 1191-1202.

Guest, J. K., e J. H. Prévost. "Design of maximum permeability material structures." *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 196 (2007): 1006-1017.

Guest, J. K., e J. H. Prévost. "Optimizing multifunctional materials: Design of microstructures for maximized stiffness and fluid permeability." *International Journal Of Solids And Structures* 43 (2006): 7028-7047.

Guest, J. K., e J. H. Prévost. "Topology optimization of creeping fluid flows using a Darcy-Stokes finite element." *International Journal For Numerical Methods In Engineering* 66 (2006): 461-484.

Guest, J. K., J. H. Prévost, e T. Belytschko. "Achieving minimum length scale in topology optimization using nodal design variables and projection functions." *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, v. 61, n. 2, 2004: pp. 238-254.

Haftka, R.T, Gurdal, Z., Kamat, M.P. *Elements of Structural Optimization*. Dordrecht : Kluwer Academic, 1990.

Hansen, C., e S. R. Quake. "Microfluidics in structural biology: smaller, faster... better." *Current Opinion In Structural Biology* 13 (2003): 538-544.

Harms, T. M., M. J. Kazmierczak, e F. M. Gerner. "Developing convective heat transfer in deep rectangular microchannels." *International Journal Of Heat And Fluid Flow* 20 (1999): 149-157.

Hughes, T.J.R., L.P. Franca, e M Balestra. "A new finite element formulation for computational fluid dynamics, V. circumventing the Babuska-Brezzi condition, A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 59 59 (1986): pp. 85-99.

Husain, A., Kim, K.Y. *Thermal Optimization of a Microchannel Heat Sink With Trapezoidal Cross Section*. J. Electron. Packag. - Volume 131, Issue 2, 2009.

Incropera, F. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley & Sons, 2006.

Jang, S. P., e S. U. S. Choi. "Cooling performance of a microchannel heat sink with nanofluids." *Applied Thermal Engineering* 26 (2006): 2457-2463.

Jiang, L. A., M. Wong, e Y. Zohar. "Forced convection boiling in a microchannel heat sink." *Journal Of Microelectromechanical Systems* 10 (2001): 80-87.

Jog, C., e R.B. Haber. "Stability of Finite Element Models for Distributed-Parameter Optimization and Topology Design." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, V. 130, 1996: pp. 203-226.

Johnson, T. J., D. Ross, e L. E. Locascio. "Rapid microfluidic mixing." *Analytical Chemistry* 74 (2002): 45-51.

Klarbring, A, J Petersson, B Torstenfelt, e M. Karlsson. "Topology optimization of flow networks." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192 (35-36), 2003: pp. 3909-3932.

Kleiner, M. B., S. A. Kuhn, e K. Habberger. "High performance forced air cooling scheme employing microchannel heat exchangers." *Ieee Transactions On Components Packaging And Manufacturing Technology Part A* 18 (1995): 795-804.

Knight, R. W., D. J. Hall, J. S. Goodling, e R. C. Jaeger. "Heat Sink Optimization With Application To Microchannels." *Ieee Transactions On Components Hybrids And Manufacturing Technology* 15 (1992): 832-842.

Koo, J.M., e C. Kleinstreuer. "Laminar nanofluid flow in microheat-sinks." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 48 (2005): 2652-2661.

Kuczenski, B., W.C. Ruder, W.C. Messner, e P.R. LeDuc. "Probing Cellular Dynamics with a Chemical Signal Generator." *PLoS ONE* 4(3): e4847, 2009.

Ladyzhenskaya, O.A. "The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow." *SIAM Rev. Volume 13, Issue 1*, 1971: 103-106.

Lazar, I. M., e B. L. Karger. "Multiple open-channel electroosmotic pumping system for microfluidic sample handling." *Analytical Chemistry* 74 (2002): 6259-6268.

Li, J., e G. P. Peterson. "Geometric optimization of a micro heat sink with liquid flow." *Ieee Transactions On Components And Packaging Technologies* 29 (2006): 145-154.

Liu, W. M., e G. Makhviladze. "An implicit finite element solution of thermal flows at low Mach number." *Journal Of Computational Physics* 227 (2008): 2743-2757.

Maiga, S. E., S. J. Palm, C. T. Nguyen, G. Roy, e N. Galanis. "Heat transfer enhancement by using nanofluids in forced convection flows." *International Journal Of Heat And Fluid Flow* 26 (2005): 530-546.

Mitchell, P. "Microfluidics - downsizing large-scale biology." *Nature Biotechnology* 19 (2001): 717-721.

Mohammadi, B., e O. Pironneau. "Applied optimal shape design." *Journal Of Computational And Applied Mathematics* 149 (2002): 193-205.

Mohammadi, B., e O. Pironneau. "Shape optimization in fluid mechanics." *Annual Review Of Fluid Mechanics* 36 (2004): 255-279.

Morini, G. L. "Viscous heating in liquid flows in micro-channels." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 48 (2005): 3637-3647.

Okkels, F., e H. Bruus. "Design of micro-fluidic bio-reactors using topology optimization." *Journal Of Computational And Theoretical Nanoscience* 4 (2007): 814-816.

Olesen, L. H., F. Okkels, e H. Bruus. "A high-level programming-language implementation of topology optimization applied to steady-state Navier-Stokes flow." *International Journal For Numerical Methods In Engineering* 65 (2006): 975-1001.

Olsson, A., G. Stemme, e E. Stemme. "Numerical and experimental studies of flat-walled diffuser elements for valve-less micropumps." *Sensors And Actuators A-Physical* 84 (2000): 165-175.

Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, 1980.

Pattekar, A. V., e M. V. Kothare. "A microreactor for hydrogen production in micro fuel cell applications." *Journal Of Microelectromechanical Systems* 13 (2004): 7-18.

Peng, X. F., e G. P. Peterson. "Convective heat transfer and flow friction for water flow in microchannel structures." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 39 (1996): 2599-2608.

Pingen, G., A. Evgrafov, e K. Maute. "Topology optimization of flow domains using the lattice Boltzmann method." *Structural And Multidisciplinary Optimization* 34 (2007): 507-524.

Pingen, Georg, e Kurt Maute. "Optimal design for non-Newtonian flows using a topology optimization." *Computers & Mathematics with Applications* 59, 2009: 2340-2350.

Pironneau, O. "On optimal profiles in Stokes flow." *Journal of FluidMechanics* 59, 1973: 117-128.

Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, e W. T. and Vetterling. In: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, pp. 430-444. Cambridge University Press, 1999.

Psaltis, D., S. R. Quake, e C. H. Yang. "Developing optofluidic technology through the fusion of microfluidics and optics." *Nature* 442 (2006): 381-386.

Qu, W. L., e I. Mudawar. "Analysis of three-dimensional heat transfer in micro-channel heat sinks." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 45 (2002): 3973-3985.

Qu, W. L., e I. Mudawar. "Experimental and numerical study of pressure drop and heat transfer in a single-phase micro-channel heat sink." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 45 (2002): 2549-2565.

Siddiqui, A. M., A. Zeb, e Q. K. Ghor. "Some exact solutions of 2D steady flow of an incompressible viscous fluid through a porous medium." *Journal Of Porous Media* 9 (2006): 491-502.

Sigmund, O. "A 99 line topology optimization code written in MATLAB." *Structural and Multidisciplinary Optimization* 21, 2001: 120–127.

Sigmund, O. "On the design of compliant mechanisms using topology optimization." *Mechanics of Structures and Machines*, v. 25, n. 4, 1997: pp. 493–524.

Stone, H. A., A. D. Stroock, e A. Ajdari. "Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a-chip." *Annual Review Of Fluid Mechanics* 36 (2004): 381–411.

Suzuki, H., e R. Yoneyama. "Integrated microfluidic system with electrochemically actuated on-chip pumps and valves." *Sensors And Actuators B-Chemical* 96 (2003): 38–45.

Svanberg, K. "The method of moving asymptotes - A new method for structural optimization." *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 24, 1987: 359–373.

Swan, C. C., e I. Kosaka. "Voigt-reuss topology optimization for structures with linear elastic material behaviours." *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 40, n. 16, 1997: pp. 3033–3057.

Toh, K. C., X. Y. Chen, e J. C. Chai. "Numerical computation of fluid flow and heat transfer in microchannels." *International Journal Of Heat And Mass Transfer* 45 (2002): 5133–5141.

Tsai, J. H., e L. W. Lin. "Active microfluidic mixer and gas bubble filter driven by thermal bubble micropump." *Sensors And Actuators A-Physical* 97–8 (2002): 665–671.

Vanderplaats, G. N. *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design: with Applications*. McGraw-Hill, 1984.

Verpoorte, E., e N. F. De. "Microfluidics meets MEMS." *Proceedings Of The Ieee* 91 (2003): 930–953.

Volpe, E, G Oliveira, L Santos, M Hayashi, e M. Ceze. "Inverse aerodynamic design applications using the MGM hybrid formulation." *Inverse Problems in Science and Engineering* 17 (2), 2009: pp. 245–261.

Wang, B., G. D. Cheng, e L. Jiang. "Design of multi-tubular heat exchangers for optimum efficiency of heat dissipation." *Engineering Optimization* 40 (2008): 767–788.

Wang, J. G., C. F. Leung, e Y. K. Chow. "Numerical solutions for flow in porous media." *International Journal For Numerical And Analytical Methods In Geomechanics* 27 (2003): 565–583.

Wang, X. Q., e A. S. Mujumdar. "Heat transfer characteristics of nanofluids: a review." *International Journal Of Thermal Sciences* 46 (2007): 1–19.

Wei, X. J., e Y. Joshi. "Optimization study of stacked micro-channel heat sinks for micro-electronic cooling." *IEEE Transactions On Components And Packaging Technologies* 26 (2003): 55-61.

Weibel, DB, M Kruithof, S Potenta, SK Sia, A Lee, e GM Whitesides. "Torque-actuated valves for microfluidics." *Analytical Chemistry*, 77 (15) , 2005: pp. 4726-4733.

Weigl, B. H., R. L. Bardell, e C. R. Cabrera. "Lab-on-a-chip for drug development." *Advanced Drug Delivery Reviews* 55 (2003): 349-377.

Whitesides, G. M. "The origins and the future of microfluidics." *Nature* 442 (2006): 368-373.

Wiker, N., A. Klarbring, e T. Borrvall. "Simplified shallow water flow equations and their potential use in bottom profile optimization." *Zamm-Zeitschrift Fur Angewandte Mathematik Und Mechanik* 87 (2007): 792-808.

Wiker, N., A. Klarbring, e T. Borrvall. "Topology optimization of regions of Darcy and Stokes flow." *International Journal For Numerical Methods In Engineering* 69 (2007): 1374-1404.

Woolley, A. T., K. Q. Lao, A. N. Glazer, e R. A. Mathies. "Capillary electrophoresis chips with integrated electrochemical detection." *Analytical Chemistry* 70 (1998): 684-688.

Yagi, H., e M. Kawahara. "Optimal shape determination of a body located in incompressible viscous fluid flow." *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering* 196 (2007): 5084-5091.

Yamazaki, I., N. Tamai, H. Kume, H. Tsuchiya, e K. Oba. "Microchannel-Plate Photomultiplier Applicability To The Time-Related Photon-Counting Method." *Review Of Scientific Instruments* 56 (1985): 1187-1194.

Yang, R.J., Chuang, C. H. "Optimal topology design using linear programming." *Computer and Structures*, v. 52, n. 2, 1994: pp. 265-275.

Yu, Q., J. M. Bauer, J. S. Moore, e D. J. Beebe. "Responsive biomimetic hydrogel valve for microfluidics." *Applied Physics Letters* 78 (2001): 2589-2591.

Zhang, Y. C., e S. T. Liu. "Design of conducting paths based on topology optimization." *Heat And Mass Transfer* 44 (2008): 1217-1227.

Zienkiewicz, O. C., e R. L. Taylor. *The Finite Element Method*. 5th. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2002.

Apêndice A – Aspectos de convergência e verificação do MEF

A.1 Condições de Convergência LBB (Ladyzhenskaya–Babuska–Brezzi)

É conhecido que o problema de escoamento incompressível em fluidos pode apresentar problemas de convergência da solução numérica através do MEF, sob a forma de instabilidades, dependendo do tipo de discretização adotado para o campo de velocidades e pressões. Tal problema tem o mesmo princípio também no estudo da mecânica dos sólidos, em análises numéricas com materiais incompressíveis.

A partir de estudos realizados por Ladyzhenskaya (1971), Babuska (1971) e Brezzi (1974), foram criadas as condições de convergência LBB, que se aplicam para garantir a convergência da solução numérica destes casos.

Este problema de convergência acontece principalmente na aplicação do MEF através do método de Galerkin. Existem formulações alternativas que previnem estas instabilidades numéricas, tais como a formulação de Petrov-Galerkin (HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986) e a formulação de mínimos quadrados (XIA; YAO, 2007). Nestas formulações é possível utilizar discretizações iguais para o campo de velocidades e pressão, o que facilita a implementação, e principalmente, sem a presença de instabilidades.

A principal manifestação dos problemas na solução numérica pelo MEF, quando não são obedecidas as condições LBB, é o surgimento de modos espúrios no campo de pressões, caracterizado por um comportamento oscilatório na distribuição de pressões ao longo do domínio. Isso decorre das relações entre os sub-espacos solenoidal (divergência nula) e gradiente (associado ao surgimento de oscilações espúrias). Dependendo da relação entre o espaço das velocidades e das pressões, o sub-espaço de soluções solenoidal fica muito restrito (ARANHA et al., 2003) e por isso não há convergência da solução numérica. É como se o número de restrições atrelado ao sistema fosse muito grande, limitando o espaço de soluções. De forma prática, a instabilidade numérica no MEF apresenta-se sob a forma de oscilações espúrias no campo de pressões calculado.

É importante ressaltar, no entanto, que as condições LBB são suficientes para garantir convergência, porém, não são necessárias. É reportado em Zienkiewicz e Taylor (2002) e Donea e Huerta (2003) que algumas combinações de discretização, apesar de não obedecerem ao critério LBB, apresentam resultados satisfatórios.

A.2 Verificação do MEF aplicado à Mecânica dos Fluidos

A implementação do MEF foi testada comparando-se os resultados obtidos para um caso *benchmark*, conforme ilustrado a seguir.

A Figura A.1 mostra os resultados preliminares na implementação do MEF, comparando resultados da literatura com os resultados obtidos pelo autor. Nela são exibidos resultados obtidos para cada tipo de elemento, considerando um caso “benchmark” (HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986) de escoamento confinado (“lid-driven cavity”). Nestes exemplos podem-se observar as oscilações no campo de pressões, quando aplicado o elemento do tipo Q4/1D (discutido anteriormente). O campo de velocidades é equivalente em ambos os casos, não sendo afetado pela instabilidade referente à condição LBB. Para efeito comparativo, foi utilizado o mesmo número de nós de velocidade nos dois exemplos (576 nós). Em A.1(a) o exemplo do problema “lid-driven cavity”, com $u = 1$ na parede superior e condições de impermeabilidade e de aderência em todas as demais. Este exemplo simula uma cavidade preenchida por um fluido, confinada por todos os lados, sendo que em apenas um dos lados (superior) há uma abertura sobre a qual uma placa escorrega com a componente de velocidade u descrita. Em A.1(b) o resultado da literatura para o campo de velocidades e em A.1(c) o resultado esperado para o campo de pressões. Em A.1(d) e (e) os resultados obtidos para o elemento Q4/1D, para velocidade e pressão, respectivamente, e em A.1(f) e (g) os resultados para o elemento Q9/4C, para velocidade e pressão. Em ambos os casos, são consideradas as propriedades físico-químicas da água como fluido em escoamento ($\mu=0,001\text{Pa}\cdot\text{s}$ e $\rho_m=1000\text{Kg/m}^3$).

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

(g)

Figura A.1 - Comparação dos resultados: (a) problema de verificação; (b) campo de velocidades (Hughes; Franca; Balestra, 1986); (c) campo de pressões (Hughes; Franca; Balestra, 1986); (d) campo de velocidades (Q4/1D); (e) campo de pressões (Q4/1D); (f) campo de velocidades (Q9/4C); (g) campo de pressões (Q9/4C).

No exemplo estudado, é utilizada uma malha de 24x24 elementos, com 625 nós de velocidade e 576 nós de pressão, para o elemento Q4/1D, e uma malha de 12x12 elementos, com 625 nós de velocidade e 169 nós de pressão.

Através dos resultados pôde-se constatar a influência da discretização na distribuição de pressões, com o surgimento de oscilações espúrias ao redor da solução, como era esperado, devido às condições LBB de convergência. Porém, no que diz respeito ao campo de velocidades, os resultados foram idênticos, não sendo afetados de nenhuma forma, e em ambos os casos, coerentes com os valores da literatura.

Conforme apresentado no capítulo 4.2 e também observado por Gersborg-Hansen, Sigmund e Haber (2005), as funções objetivo adotadas no processo de otimização não dependem do campo de pressões, sendo função apenas da distribuição de velocidades no domínio. Sendo assim, apesar das oscilações presentes na distribuição de pressões dos resultados, é possível utilizar a formulação do elemento do tipo Q4/1D, mesmo este não obedecendo às condições LBB, uma vez que os resultados do campo de velocidade não são comprometidos. A vantagem deste elemento em relação ao elemento Q9/4C é o menor custo computacional, além de sua fácil implementação, apresentando um melhor custo/benefício, que ganha ainda mais importância ao se considerar a natureza iterativa do processo de otimização.

A.3 Verificação do MEF aplicado à equação de energia

Para a verificação do MEF aplicado à equação de energia, foi estudado o problema estabelecido na Fig. A.2, o qual consiste de um domínio quadrado, sujeito às condições de contorno de temperatura, especificadas na figura. Nas paredes não especificadas, têm-se regiões adiabáticas. O problema estudado consiste na convecção do calor, transportado através do fluido, com velocidade de módulo unitário, na direção especificada, a 45° em relação à horizontal. A formulação aplicada na implementação do MEF, conforme já citado, é a *Streamline-Upwind Petrov-Galerkin* (SUPG).

A utilização do Método de Galerkin gera o surgimento de oscilações numéricas quando o problema estudado é predominantemente convectivo. Uma das formas de contornar este problema é a utilização de uma discretização maior do domínio, aumentando o custo computacional. O método SUPG permite evitar o surgimento destas oscilações, sem a necessidade de um refinamento excessivo da malha.

Figura A.2 – Domínio de verificação e condições de contorno.

Na Fig. A.3, observa-se o resultado obtido, em comparação com os valores de literatura (BROOKS; HUGHES, 1982; GALEAO; DO CARMO, 1988).

Figura A.3 – Comparação entre resultados: (a) Obtido na implementação (SUPG); (b) Exato; (c) Obtido utilizando SUPG (GALEAO; DO CARMO, 1988).

A figura A.4 ilustra o efeito dos métodos aplicados na formulação do MEF, conforme citado no capítulo 2.3, no qual é possível notar a presença de oscilações na solução obtida através do método de Galerkin. Estas mesmas oscilações são eliminadas utilizando-se o método SUPG.

Figura A.4 – Efeito da aplicação de diferentes métodos na formulação do MEF; (a) Solução exata; (b) Método de Galerkin; (c) Método SUPG. (extraído de BROOKS; HUGHES, 1982).

A.4 Verificação do MEF considerando o problema multi-físico

Neste item são realizados testes de verificação do desempenho das rotinas do MEF implementadas pelo autor em comparação com os resultados da análise utilizando-se, como referência, um software comercial de elementos finitos, o COMSOL® Multiphysics.

Uma das vantagens do ambiente do COMSOL é a facilidade de modelagem do problema físico, graças a uma vasta biblioteca de modelos de elemento, e principalmente à facilidade de interação entre os diferentes fenômenos analisados, facilitando a integração em análises multi-físicas. Especificamente neste trabalho, o interesse reside principalmente na interação termo-fluídica do sistema.

Como exemplo de teste realizado, a Fig. A.5 mostra a topologia ótima obtida (b) para um canal em bifurcação, de acordo com as condições de contorno impostas (a). O sistema como um todo está submetido a uma fonte de calor que fornece 135kW/m^2 , uniformemente distribuídos sobre a superfície do domínio de projeto. Os materiais utilizados são o alumínio e a água, cujas propriedades físicas foram mostradas anteriormente na Tabela 1, no capítulo 6.

Figura A.5 - Modelo de Verificação: (a) domínio de projeto; (b) topologia final obtida.

A partir da topologia obtida (Fig. A.5b), foi realizado um pós-processamento para a obtenção de um modelo geométrico (CAD), conforme mostrado na Fig. A.6(a). Este modelo foi transferido para o COMSOL, no qual foi criado um modelo com 1745 elementos finitos quadriláteros (Fig. A.6b), e foram aplicadas as condições de contorno originais do problema, conforme mostrado anteriormente na Fig. A.5(a).

Figura A.6 - Modelo analisado: (a) geometria em CAD; (b) malha de elementos finitos.

O modelo de análise utilizando o MEF no COMSOL considera 2 fenômenos: o escoamento do fluido e a troca de calor promovida.

O escoamento do fluido é resolvido através do modelo de 'escoamento incompressível de Navier-Stokes', considerando um valor de Reynolds menor que 1, para modelar o comportamento de um escoamento de Stokes. Considera-se um perfil parabólico de velocidades na entrada do domínio, e 2 regiões de saída, com pressão nula. As demais fronteiras externas são modeladas como paredes, ou seja, são aplicadas as condições de aderência e impermeabilidade às mesmas.

O modelo de transferência de calor no COMSOL aplica o módulo de 'convecção e condução', que utiliza as informações calculadas na solução do escoamento para determinar a distribuição de temperaturas no domínio. Todas as paredes externas do modelo são consideradas adiabáticas, exceto na região de entrada do fluido, no qual a temperatura é fixa e igual a 20°C (293K). Utilizou-se o SUPG (capítulo 2.4) para estabilização do problema.

A partir das condições expostas anteriormente, os sistemas de equações são resolvidos através do *solver* do COMSOL, e obtêm-se os campos de velocidade e pressão, além da distribuição de temperaturas do domínio e o fluxo de calor no sistema, representados na figura A.7, à direita, em comparação com os resultados obtidos na implementação do MEF (Fig. A.5b) dentro da rotina de otimização deste trabalho, à esquerda.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

(g)

(h)

Figura A.7 - Comparação dos resultados obtidos na rotina implementada (à esquerda), com resultados obtidos utilizando software comercial COMSOL® Multiphysics (à direita): (a) e (b) campo de velocidades; (c) e (d) campo de pressões; (e) e (f) distribuição de temperaturas; (g) e (h) módulo do fluxo de calor total.

A Figura A.8 mostra os perfis de distribuição dos resultados para algumas seções específicas.

Figura A.8 - Comparação dos perfis de distribuição de: (a) módulo de velocidades ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$); (b) pressão ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$); (c) temperaturas ao longo da linha de corte transversal ($y=0$); (d) temperaturas ao longo da linha de corte longitudinal ($x=0$).

Comparando-se os resultados (Figuras A.7 e A.8), constata-se uma concordância em ambas as soluções. As maiores diferenças são encontradas na distribuição das pressões e nas temperaturas encontradas. Isso se deve principalmente à discretização adotada no código implementado no programa, que utiliza uma malha composta por 40×40 (1600) elementos retangulares, uniformemente distribuídos, em contraposição aos 1745 elementos quadriláteros utilizados na verificação através do COMSOL. O modelo criado no COMSOL foi gerado a partir de um pós-processamento da topologia original, no qual há uma suavização dos contornos do modelo original, levando a um modelo mais bem comportado. A malha aplicada no COMSOL também tem como diferença um melhor "acompanhamento" das fronteiras da geometria simulada, conforme visto na Figura A.6b, o que permite que a descrição dos contornos na malha seja mais fiel à geometria. Já no caso do modelo

implementado, como a malha é composta por elementos retangulares, a tendência é a formação de um "serrilhado", conforme mostrado na Figura A.9.

Figura A.9 - Detalhe da malha do MEF: (a) "serrilhado" na discretização; (b) malha no COMSOL.

A presença desse serrilhado, naturalmente, leva a uma pequena diferença no perfil de velocidades das regiões de fronteira entre sólido e fluido, causando uma leve diferença entre as distribuições de temperaturas, que fica mais clara na região central do domínio, justamente a região mais afetada pela presença do "serrilhado". Tais diferenças porém estão dentro de uma faixa aceitável e não chegam a afetar o desempenho da rotina de otimização.

Uma importante observação relacionada ao MEF é em relação a malha a ser utilizada no problema de otimização. Nos exemplos mostrados neste apêndice foram utilizados domínios de discretização relativamente pobres, de cerca de 1600 elementos. A escolha da discretização deste domínio tem relação com o custo computacional envolvido na análise do problema, tendo em vista que a cada iteração são resolvidos 2 sistemas de equações (fluido e térmico), além da análise de sensibilidades (apêndice B) necessária na rotina de otimização. Neste caso, tem-se uma razão de compromisso entre trabalhar com uma discretização maior (mais elementos) e o custo computacional inerente a ela, principalmente levando em consideração a natureza iterativa da solução de otimização. Essa ponderação, juntamente com limitações operacionais no *MatLab*®, conduziram à utilização de malhas de até cerca de 2000 elementos nas análises multi-físicas.

Uma observação deve ser feita em relação ao campo de pressões obtido na análise através do MEF. Mesmo nas regiões "sólidas", ou seja, onde a permeabilidade de meio poroso é muito baixa e, conseqüentemente, a velocidade é próxima de zero, existe a presença de um campo de pressões, conforme mostrado na Figura A.10. Embora este campo de pressões não seja realista, pois nas regiões sólidas não existe sentido na presença de uma pressão de escoamento, este fato não causa problemas na distribuição de pressões e de velocidades, nas regiões compostas por fluido, que são as regiões que guiam diretamente o processo de otimização. Cabe ressaltar também que a utilização do filtro de média no campo de pressões

revela que o comportamento geral da distribuição de pressões nos exemplos mostrados não é comprometido pelas oscilações numéricas relativas às condições *LBB*, previamente citadas.

Figura A.10 - Distribuição de pressões no domínio completo: (a) sem pós-processamento; (b) depois do pós-processamento.

Apêndice B - Verificação dos gradientes da análise de sensibilidade

Aqui serão abordados os cálculos dos gradientes, previamente descritos no capítulo 5, e serão mostradas as comparações entre os gradientes calculados analiticamente e seus valores calculados através do método de diferenças finitas.

B.1 Método de Diferenças Finitas (MDF)

Inicialmente, o cálculo dos gradientes da função objetivo, em relação às variáveis de projeto, é realizado através do MDF, sendo este utilizado como referência para verificação da rotina desenvolvida.

O cálculo do gradiente através do MDF é baseado na divisão do domínio de projeto em sub-domínios finitos, nos quais é realizado o cálculo dos mesmos. A idéia básica da análise de sensibilidade é mensurar de que forma a alteração de uma das variáveis de projeto afeta o comportamento do sistema como um todo, ou da função objetivo, no caso. A expressão genérica que descreve o cálculo do gradiente de uma função genérica f em função de uma variável de projeto específica x_i , é dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{f(x_i + \delta) - f(x_i)}{\delta} \quad (\text{B.1})$$

No caso do cálculo através do MDF, inicia-se com uma configuração inicial (x_i) para as variáveis de projeto, na qual calcula-se o valor da função, $f(x_i)$. A partir da configuração inicial, incrementa-se o valor de uma variável de projeto específica de um valor conhecido, δ , e calcula-se o valor novo da função, $f(x_i + \delta)$. A partir da expressão B.1, calcula-se a derivada para cada variável de projeto, e finalmente, obtém-se o gradiente da função objetivo. Nota-se que, de forma geral, quanto menor o valor de δ , mais preciso o cálculo do gradiente.

B.2 Comparação dos gradientes calculados

Utilizando-se como referência os resultados obtidos no cálculo dos gradientes da função objetivo através do MDF, pode-se comparar os resultados obtidos analiticamente (capítulo 5), implementados na rotina do software desenvolvido neste trabalho.

Para a comparação do cálculo de gradientes, foi tomada a análise multi-física, cujo gradiente está representado pela equação 5.2, o qual envolve o cálculo dos gradientes tanto da área térmica, quanto em relação ao escoamento, uma vez que há dependência do campo de velocidades na determinação da distribuição de temperaturas do sistema.

A análise comparativa baseia-se em um domínio inicial igual para os dois métodos de cálculo. Neste caso, adotou-se um domínio com uma distribuição uniforme das variáveis de projeto, a partir do qual foram calculados os gradientes. As figuras B.1 e B.2 mostram a comparação dos resultados obtidos, para malhas de 10x10 e 20x20 elementos, respectivamente. Juntamente com os gráficos do gradiente, também são mostradas as diferenças relativas entre os dois métodos de cálculo, as quais ficaram em níveis aceitáveis, da ordem de décimos, em termos percentuais. Os gráficos mostrados descrevem de que forma a função objetivo é alterada para uma dada perturbação no valor de cada uma das variáveis de projeto, neste caso, uma por elemento.

Figura B.1 - Comparação dos gradientes da função objetivo para uma malha de 10x10 elementos.

Figura B.2 - Comparação dos gradientes da função objetivo para uma malha de 20x20 elementos.