



Las matemáticas del diseño aeronáutico

Enrique Zuazua, Director de IMDEA-Matemáticas - UAM

El momento de las matemáticas

Las matemáticas son a la vez una ciencia básica, el lenguaje en el que está escrito el universo, como decía Galileo Galilei, y también una disciplina que interacciona permanentemente con todos los demás ámbitos de nuestra sociedad. En efecto, la sociedad actual reposa cada vez más en la comprensión que las matemáticas aportan y que están en la base de la innovación en tecnología, ciencia, transporte, comunicaciones, etc. Por otra parte, las crecientes demandas de progreso exigen un esfuerzo añadido en investigación matemática.

En este artículo presentamos un breve panorama de las matemáticas que se desarrollan en el campo del diseño óptimo, orientándonos al ámbito aeronáutico y haciendo especial énfasis en algunos de los problemas más relevantes aún por resolver, que tienen una motivación

Enrique Zuazua. Doctor por la UPV/EHU y por la Universidad Pierre et Marie Curie. Actualmente dirige el instituto IMDEA-Matemáticas de la Universidad Autónoma de Madrid. Premio Nacional de Investigación 2007 y Premio Euskadi de Investigación 2006. Además, ha sido reconocido como "Highly Cited Researcher" por el Instituto ISI (Thomson).



Financiado por los proyectos MTM2005-00714, Domino CIT-370200-2005-10 del programa Profit, el Proyecto Ingenio Mathematica (i-Math) del Programa Consolider Ingenio 2010 del MEC y el proyecto Simumat de la CM. Este trabajo ha sido redactado durante la visita de su autor al Isaac Newton Institute de Cambridge en el marco del programa "Highly Oscillatory Problems". El autor agradece a Eduardo Artamendi (Departamento de Arquitectura de la UPV/EHU) por su revisión del manuscrito y valiosas sugerencias.

fuertemente tecnológica y a la vez un marcado acento matemático.

Las matemáticas son una ciencia amplia, que abarca diferentes campos entre los que destaca la matemática aplicada, que tiene como uno de sus principales objetivos contribuir a la comprensión y al diseño de numerosos mecanismos y estructuras de gran importancia en nuestra vida diaria y en muy diversos ámbitos del I+D+i, haciéndolos más funcionales, más económicos, más respetuosos con el medio ambiente, más atractivos, etc. Este es el principal cometido de la disciplina del *Diseño óptimo* a la que dedicamos este artículo. Sus aplicaciones son muy variadas: biotecnología y biomedicina (sistema cardiovascular, el diseño de bypasses y fármacos), física cuántica (control laser en mecánica cuántica, diseño molecular, nanoestructuras, optoelectrónica), estructuras y edificios inteligentes (en particular, que resistan los temblores sísmicos), ingeniería química (reactores y columnas de destilación), medioambiente (descontaminación, diques, reducción del ruido, la barrera del Támesis), sistemas de comunicaciones e irrigación, prospección y extracción de recursos naturales, aeronáutica, automoción, robótica,...

En el ámbito de la aeronáutica, en el que nos centramos en este artículo, uno de los principales objetivos de las matemáticas es contribuir al diseño de aeronaves más seguras, eficaces y respetuosas con el medio ambiente. Son ya muchos años de investigación matemática en este campo desde que los hermanos Wright, hace ahora algo más de un siglo, se convirtieron en los pioneros del aire. Pero es aún mucho lo que

queda por hacer para ser capaces de realizar simulaciones numéricas lo bastante rápidas y eficaces que permitan desarrollar herramientas interactivas que sirvan a los diseñadores e ingenieros para trabajar con un conocimiento fiable del rendimiento previsible de sus diseños en tiempo real. Las grandes empresas del sector y los más prestigiosos laboratorios científicos se afanan en este empeño, en el que las matemáticas tienen mucho que aportar. A pesar de los importantes avances que se producen constantemente en la capacidad de cómputo de los modernos supercomputadores, un verdadero salto cualitativo en este campo sólo será posible si somos capaces de avanzar significativamente en algunos de los problemas matemáticos que describiremos en este artículo.

El reto es grande, pero se confirma la oportunidad de la célebre frase de Isaac Newton según la cual “caminamos a hombros de gigantes”. En efecto, son las contribuciones de Euler y el propio Newton, entre otros, las que nos permiten entender el estado del arte y planificar la investigación futura.

Diseño óptimo en aeronáutica

En muchas disciplinas de ingeniería, y esencialmente en aeronáutica, el uso sistemático de los métodos matemáticos para simular y optimizar procesos tiene ya una larga tradición y resulta indispensable para ahorrar energía, reducir costes y polución y para aumentar la seguridad. Por ejemplo, no hay prototipo de nuevo automóvil de turismo que sea construido sin haber previamente recorrido millones de kilómetros en simulaciones por ordenador. A pesar de ello, aún a día de hoy, la simulación y optimización de una aeronave entera tiene un coste computacional prohibitivo.¹

Son varias las razones para que ésto sea así y es por eso que ésta es un área en la que se continúa haciendo un esfuerzo investigador importante y en el que las matemáticas tienen cada vez más protagonismo.

Desde un punto de vista matemático, el problema se formula de la siguiente manera: el avión ocupa una región o dominio del espacio tridimensional, que denotamos mediante el símbolo Ω , en torno a la cual fluye el aire. Nótese que adoptamos un punto de vista más propio del de los ensayos en túneles de viento que en el vuelo real, en el que la nave está en movimiento mientras que en nuestro modelo matemático consideramos que la aeronave está fija y es el aire el que fluye en torno a la misma, lo cual nos permite trabajar en un sistema de coordenadas fijo. En la práctica, se pretende determinar la forma de la aeronave que optimice algún criterio de interés industrial, comercial o medioambiental. Por ejemplo, que se maximice la sustentación de la aeronave o se minimice el consumo de combustible. Con el objeto de medir estas cantidades introducimos una función o funcional de coste² $J(\Omega)$, por ejemplo el consumo de combustible. Para simplificar un poco la presentación

1 Entendemos por ello que, con la capacidad de cálculo de los ordenadores actuales, el tiempo necesario para realizar el cálculo es tan largo que, en la práctica, éste resulta irrealizable o simplemente exige más tiempo del que disponemos. Es también frecuente que, cuando las simulaciones numéricas se prolongan excesivamente, las inestabilidades que introduce el propio algoritmo computacional acaben corrompiendo los resultados y los hagan finalmente inservibles.

2 La terminología “coste” en este contexto se utiliza en el sentido que, en muchas aplicaciones, el funcional J representa en efecto el coste económico que supone una determinada configuración. Minimizar el “coste”, tal y como nos proponemos aquí, es pues un objetivo natural desde un punto de vista de la rentabilidad económica.

3 Se trata en la práctica de un vector de tres componentes que proporciona la velocidad (rapidez escalar y direccionamiento) de la partícula de aire que ocupa el lugar x en el exterior de la región Ω ocupada por la aeronave, en el instante t .

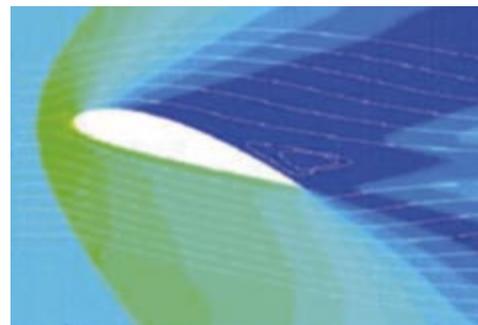
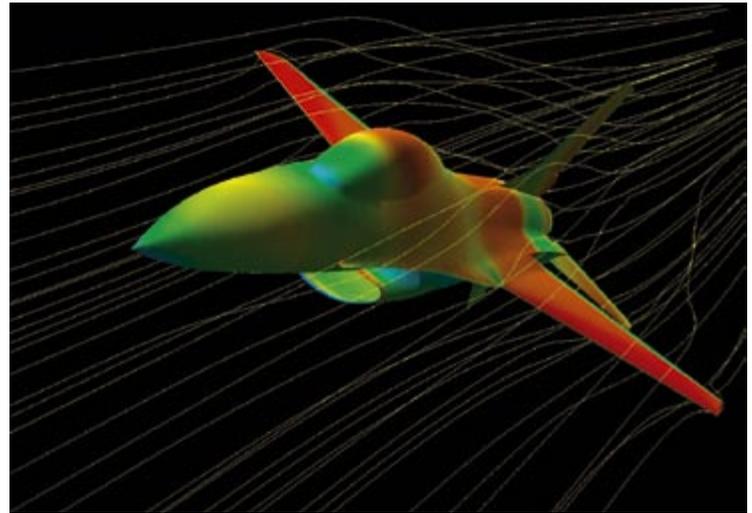


Figura 1: Forma típica de una aeronave y simulación numérica bidimensional de las líneas de corriente del aire en torno a un ala.

supongamos que buscamos un mínimo de J , lo cual es, además, un problema muy natural cuando hablamos del consumo de combustible. El problema consiste por tanto en buscar

$$\Omega^* \in C_{ad} : J(\Omega^*) = \min_{\Omega \in C_{ad}} J(\Omega)$$

o, lo que es lo mismo, construir o encontrar el dominio óptimo Ω^* , dentro del conjunto de configuraciones geométricas admisibles C_{ad} , es decir, de las posibles formas geométricas de la aeronave, de modo que el funcional coste J alcance el valor mínimo posible.

Este tipo de problemas son ubicuos en muy diversos ámbitos de la actividad humana y son los que han dado lugar al desarrollo de campos tan importantes de las matemáticas como el cálculo de variaciones o la investigación operativa. Este último se ocupa, en particular, de problemas de planificación en las que el gran número de parámetros hace imposible una solución basada en la mera intuición (planificación del funcionamiento de los semáforos de una gran ciudad, por ejemplo, o distribución de personal en una gran empresa, con diversos departamentos y turnos.)

Volviendo al caso de la aeronáutica que nos ocupa, una de las principales dificultades radica frecuentemente en la complejidad del funcional J , que depende del dominio Ω (la aeronave) de manera muy poco evidente, a través del campo de velocidades del fluido que lo rodea (el aire). Mediante el símbolo $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t)$ denotamos el campo de velocidades del aire en el exterior del recinto Ω ocupado por la aeronave.³

Es por eso que una de las piezas clave de la metodología matemática que aquí describimos es disponer de modelos fiables para el comportamiento del aire en torno al diseño Ω y métodos computacionales aproximados para su cálculo y previsión. Este es precisamente el papel de la mecánica de fluidos, que proporciona diversos modelos que permiten identificar este campo de velocidades \mathbf{u} a través de sistemas de Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP) que describen el movimiento del aire en torno a la aeronave. Hay toda una jerarquía de tales modelos dependiendo de que consideremos un modelo tridimensional ($3 - d$) completo que evoluciona en el tiempo, estacionario (independiente del tiempo), que tengamos en cuenta los efectos de la viscosidad del aire o no, de la turbulencia que se genera en torno a la aeronave, que adoptemos un modelo reducido bi o unidimensional ($2 - d$ o $1 - d$), etc. Entre ellos cabe destacar las ecuaciones de Navier-Stokes, las de Euler, los modelos de turbulencia (Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS), el modelo de Spalart-Allmaras) y las ecuaciones de Burgers.

Como estamos viendo, todo esto es un proceso complejo en el que intervienen diferentes ingredientes de las más diversas áreas: mecánica de fluidos, ecuaciones en derivadas parciales, diseño óptimo, geometría,... Sería materialmente imposible concluir con éxito este programa sin la ayuda del análisis y la simulación numérica mediante los ordenadores más potentes. En este punto conviene también que tengamos en cuenta que, a pesar de que en cada uno de los pasos que debemos dar en el desarrollo de este ambicioso programa usemos los métodos computacionales más eficaces, el pequeño error computacional que cometamos en cada paso puede tener un efecto acumulado importante en el resultado final. Obviamente, en la práctica, el diseño óptimo nunca se alcanza, ni es imprescindible hacerlo, pues una mejora significativa del diseño previo suele resultar rentable y suficiente. Ahora bien, sólo la combinación de las herramientas más punteras existentes y el diseño de nuevos métodos matemáticos y computacionales puede dar lugar a una mejora de los diseños ya existentes, incluso si el objetivo final es la mejora de su rendimiento en un porcentaje aparentemente pequeño.

El punto de vista que adoptamos al abordar el diseño de las aeronaves desde las matemáticas es aquél según el cual al alterarse la forma del dominio Ω en búsqueda del óptimo, se altera el flujo del fluido, el aire en este caso, a su alrededor. Es la interacción del dominio Ω que ocupa la aeronave con el aire la que determina el grado de eficacia del diseño, a través del valor correspondiente del funcional de coste J , que normalmente está definido sobre la superficie exterior de la aeronave (lo que en matemáticas se denomina frontera: $\partial\Omega$) y que mide cantidades físicas que afectan al rendimiento del avión, como la resistencia, la presión o la sustentación de dicha configuración.

Los métodos de descenso

La mayoría de los métodos computacionales que se desarrollan en el ámbito de la matemática aplicada son de carácter iterativo. Es el caso de los métodos de descenso que describimos en esta sección. El principio básico es tan sencillo y natural como eficaz y reposa en el hecho de que, si somos capaces de encontrar un método que mejore un diseño previo, aplicando este método de manera reiterada, deberíamos obtener diseños cada vez mejores, del mismo modo que la práctica constante en cualquier actividad nos permite mejorar el rendimiento.

Veamos cómo podemos diseñar un método iterativo que pueda ser de

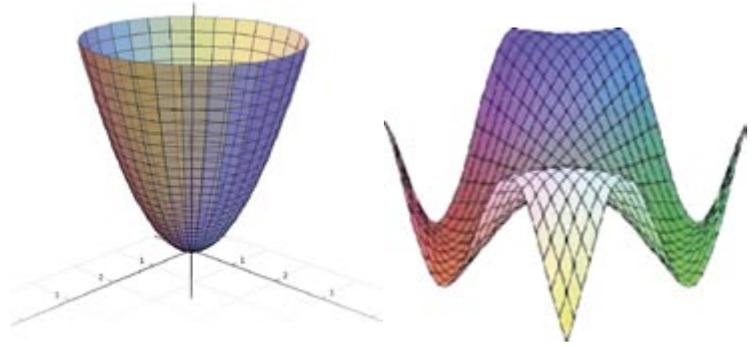


Figura 2: Izquierda: Superficie de un paraboloides cuyo mínimo está bien identificado y que un método de descenso encuentra con facilidad. Derecha: superficie más compleja en la que los métodos de descenso corren el riesgo de no converger.

utilización sistemática en la minimización de funcionales y por tanto en diseño óptimo.

En aquellos casos en que el funcional es convexo⁴ (tal y como se muestra en la izquierda de la Figura 2), es relativamente fácil calcular su mínimo a través de un método iterativo de descenso que lo que hace es reproducir algorítmicamente la trayectoria que una canica en el interior de la superficie seguiría hasta caer en el punto de mínimo por efecto de la gravedad, o la que adoptaríamos para descender una ladera lo más rápido posible.

Desafortunadamente, en las aplicaciones aeronáuticas que nos ocupan, a causa de la compleja dependencia del funcional con respecto al dominio a través de las ecuaciones de la mecánica de fluidos antes mencionadas, no podemos asegurar que se tenga la forma convexa que tanto conviene a los métodos iterativos de minimización (véase la Figura 2, derecha).⁵ Pero, en la práctica, a pesar de no poder garantizar que estemos en una configuración en la que el mínimo del funcional existe, este hecho no es un obstáculo para seguir aplicando la metodología que estamos presentando, puesto que, como habíamos visto anteriormente, lo que realmente se busca en una aplicación es una nueva configuración que mejore la anterior.

Recordemos brevemente el algoritmo iterativo del método de gradiente, también denominado, muy elocuentemente, de máxima pendiente o “steepest descent” que reproduce precisamente la dinámica de la canica sometida a la fuerza de la gravedad a la que antes hacíamos alusión.⁶

El método consiste en, a partir de un diseño inicial de arrancada Ω_0 , producir la sucesión de diseños Ω_k , a medida que avanzamos en el valor del índice entero $k = 0, 1, 2, 3, \dots$, de modo que, en cada paso, deforme el dominio previo Ω_k en la dirección de máximo descenso del funcional J , con un paso de avance de amplitud fija $\rho > 0$, para obtener el nuevo dominio Ω_{k+1} .⁷ Hay otras versiones y variantes de este método de máximo descenso, como el método de gradiente conjugado, el de Newton, etc. que son más eficaces pero que están inspirados en el mismo tipo de ideas y que, en definitiva, producen una sucesión que aproxima el mínimo que supone una variante de la anterior.

La aplicación de los métodos iterativos, como el método del gradiente, necesitan, en cada paso de la iteración, calcular el gradiente del funcional a minimizar que representa la sensibilidad del funcional con respecto a cada uno de los parámetros de diseño. Es un principio fundamental que una buena estrategia de optimización ha de estar basada

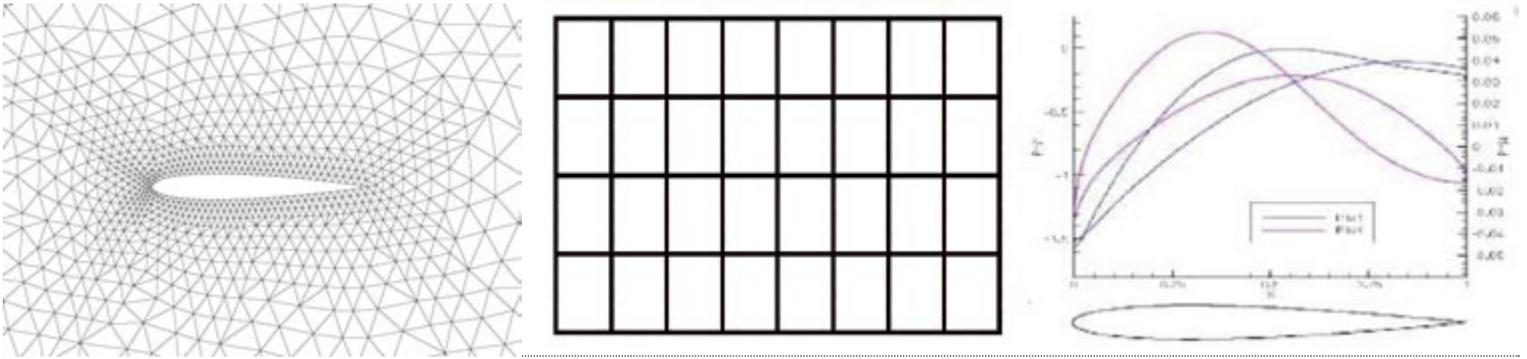


Figura 3: Izquierda: mallado o triangulación del dominio computacional constituido por el exterior de una sección bidimensional de un ala. Centro: mallado regular del plano. Derecha: deformaciones de Hicks-Henne en el diseño de la sección 2 - d de un ala.

en una buena comprensión del funcional a minimizar, lo mismo que el pilotaje de un vehículo con destreza exige un buen conocimiento de la respuesta del mismo al accionamiento de los diversos mandos que lo regulan. El gradiente codifica precisamente la sensibilidad del funcional frente a la alteración de los parámetros de diseño.

El cálculo del gradiente, como vamos a ver, es formalmente fácil de realizar aunque, cuando abordamos las aplicaciones reales a las que nos referimos, puede resultar sumamente costoso y complejo cuando el número de parámetros de diseño es elevado. Por ejemplo, en el ámbito del diseño de una aeronave el número de parámetros relevantes puede ser del orden del centenar, correspondiendo cada uno de ellos a diferentes elementos geométricos de la aeronave (alas, sustentadores, cola, motores, etc.), sin contar otros como los propios materiales de los que está constituida, tema de gran actualidad también en el mundo de la aeronáutica que comienza a incorporar nuevos materiales en sus modelos más vanguardistas.

En la práctica, el campo fluido $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\Omega)$ obedece a las ecuaciones de la Mecánica de Fluidos en el exterior de la región Ω ocupada por la aeronave. Este sistema puede ser representado de forma abstracta del siguiente modo: ⁸

$$A(\Omega)\mathbf{u}(\Omega)=\mathbf{b}(\Omega)$$

Al derivar estas ecuaciones con respecto a las deformaciones del dominio Ω , con el objeto de calcular la sensibilidad del fluido $\delta\mathbf{u}$, con respecto a variaciones de la misma, se obtiene $A\delta\mathbf{u} = \delta\mathbf{b} - \delta A \mathbf{u}$, que es una ecuación semejante a las del propio campo fluido \mathbf{u} , en las que en el segundo miembro interviene el propio estado del fluido \mathbf{u} , que ya conocemos, y las variaciones del modelo (δA y $\delta\mathbf{b}$) que podemos calcular a partir de los datos de los que disponemos sobre el mismo. En la práctica, estas ecuaciones han de resolverse de manera aproximada mediante el uso de herramientas computacionales, gracias a los ordenadores, discretizando el dominio fluido, y generando un mallado computacional. Cada nodo de este mallado es un punto en el que aproximamos la solución \mathbf{u} .

Antes hablábamos del gran número de parámetros de diseño que se presentan habitualmente en las aplicaciones. En principio, a nivel computacional, la deformación de la geometría Ω (la sección bidimensional del ala en la Figura 3) podría realizarse moviendo cada nodo que

está sobre su superficie, pero esto sería inmanejable. En la práctica, no es ésto lo que se hace sino que se identifican zonas o perfiles que deforman simultáneamente un cierto número de nodos, con unas formas predeterminadas, fruto de desarrollos analíticos o experimentales, como las que mostramos en la derecha de la Figura 3. A pesar de ello, el número de parámetros de diseño resulta aún del orden de las decenas, lo que tiene un coste computacional excesivo.

Esto puede ser remediado por la técnica del “estado adjunto” que constituye una versión moderna de los clásicos multiplicadores de Lagrange, que nos permite, mediante la resolución de un sólo sistema adicional, calcular la sensibilidad con respecto a cualquier parámetro. ⁹

- 4 Desafortunadamente, hay una cierta ambigüedad en la terminología que se emplea para denominar las figuras que presentan la forma que se indica en a izquierda de la Figura 2. En efecto, mientras que en la literatura matemática avanzada éstas se denominan “convexas”, tal y como lo hacemos aquí, en cursos elementales de matemáticas se denominan “cóncavas”.
- 5 En este caso, en ausencia de convexidad, es fácil imaginar cómo la canica se perdería en una dinámica ininterrumpida sobre la superficie con esta geometría compleja, por efecto de la gravedad, sin nunca llegar a un punto de mínimo.
- 6 En este punto y en lo sucesivo abusamos de la notación. Para dar un sentido riguroso a estas fórmulas deberíamos considerar el funcional definido en un espacio de Hilbert, definir la distancia entre dominios, sus deformaciones a través de campos que apunten en la dirección normal, etc. Se dispone una teoría matemática consistente que arranca en los trabajos de J. Hadamard y que permite dar rigor a todo lo que aquí describimos.
- 7 De manera más rigurosa la regla de avance que permite obtener el nuevo dominio Ω_{k+1} a partir del anterior Ω_k es $\Omega_{k+1} = \Omega_k - \rho \nabla J(\Omega_k)$, $k \geq 0$, siendo $\nabla J(\Omega_k)$ el gradiente del funcional J , en la configuración Ω_k que representa la dirección de máxima pendiente sobre la gráfica del funcional J .
- 8 En esta ecuación $\mathbf{b}(\Omega)$ representa los datos del problema, el operador $A(\Omega)$ el modo en que el sistema responde ante estos datos, y $\mathbf{u}(\Omega)$, el estado en consideración, es precisamente la respuesta del sistema. Formalmente la solución $\mathbf{u}(\Omega)$ puede simplemente obtenerse por la fórmula $\mathbf{u}(\Omega) = A(\Omega)^{-1}(\mathbf{b}(\Omega))$. En la práctica, esto no es, sin embargo, fácil de hacer. Dar sentido a esta inversión del operador $A(\Omega)$ es, de hecho, en algunos casos, un verdadero reto intelectual aún pendiente de realizar.
- 9 Con el objeto de ilustrar el método adjunto, consideremos, para simplificar la presentación, un funcional de la forma:

$$J(\Omega) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{B}\mathbf{u}(\Omega), \mathbf{u}(\Omega) \rangle,$$

en el que \mathbf{B} es un operador simétrico. Entonces la variación del funcional J es $\delta J(\Omega) = \langle \mathbf{B}\mathbf{u}, \delta\mathbf{u} \rangle$, donde $\delta\mathbf{u}$ es la variación del estado. Para evitar el cálculo de $\delta\mathbf{u}$ que, para cada parámetro de diseño, nos obliga a la resolución de un sistema semejante al de las propias ecuaciones de estado, introducimos el estado adjunto \mathbf{p} que satisface $A^*(\Omega)\mathbf{p} = \mathbf{B}\mathbf{u}$. Aquí, mediante $A(\Omega)^*$ denotamos el operador adjunto de $A(\Omega)$ que se caracteriza por la propiedad de que $\langle A(\Omega)^*v, w \rangle = \langle v, A(\Omega)w \rangle$. Vemos entonces que

$$\langle \mathbf{B}\mathbf{u}, \delta\mathbf{u} \rangle = \langle A^*(\Omega)\mathbf{p}, \delta\mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{p}, A(\Omega)\delta\mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{p}, \delta\mathbf{b} - \delta A\mathbf{u} \rangle,$$

y, por lo tanto, δJ puede ser calculado tomando productos escalares del estado adjunto \mathbf{p} con cantidades que sólo dependen del estado ya conocido \mathbf{u} y de las variaciones de los coeficientes del sistema, pero sin necesidad de recalculer $\delta\mathbf{u}$. El método adjunto permite por tanto realizar cada paso de la iteración del método gradiente resolviendo dos sistemas: la ecuación de estado para el cálculo de \mathbf{u} , y la de estado adjunto, para el cálculo de \mathbf{p} .

Las matemáticas de los fluidos

Los modelos matemáticos de los fluidos son algunos de los objetos matemáticos más complejos y relevantes sobre los que aún no se dispone de una comprensión completa. Son muchos los factores que hacen que esto sea así. Uno de ellos es el hecho de que las soluciones desarrollen choques o discontinuidades, del mismo modo que las olas marinas se rompen al llegar al litoral. Esto hace que los métodos matemáticos habituales, basados en la intuición y técnicas desarrolladas en el ámbito de las superficies y funciones regulares y que conducen a los gradientes de los funcionales que hemos de emplear en la implementación de los métodos de descenso, no puedan ser utilizados sin una revisión a fondo de los mismos.¹⁰

Los choques o singularidades en mecánica de fluidos son un tema clásico y sin duda uno de los más importantes para la teoría actual de EDP. Por otra parte, las ondas de choque son de hecho uno de los fenómenos más relevantes en muy diversos ámbitos de la mecánica (detonaciones, terremotos, fracturas, etc.) y, como vamos a ver, influyen de manera decisiva en los diseños aeronáuticos.

Desde un punto de vista matemático, sin ir más lejos, la unicidad y regularidad de las soluciones de las ecuaciones de Navier-Stokes en tres dimensiones espaciales constituye uno de los problemas del milenio de la Fundación Clay.¹¹ El modelo más sencillo en el que este tipo de fenómenos queda de manifiesto es la ecuación de Burgers unidimensional. En su versión viscosa, las ecuaciones correspondientes son¹²

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

con un parámetro de viscosidad $\nu > 0$ dependiente del fluido en cuestión, y sus soluciones son regulares. Sin embargo, en ausencia de viscosidad, es decir $\nu = 0$, obtenemos el modelo

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

que se asemeja a las ecuaciones de Euler de los fluidos perfectos en tres dimensiones espaciales. Sus soluciones desarrollan discontinuidades, también denominadas choques, de igual modo que las olas del mar, con perfiles suaves en alta mar, se rompen al llegar a la costa, tal y como se ilustra en la Figura 4. Esto es debido a que las soluciones toman valores constantes a lo largo de las trayectorias que describen las denominadas curvas características, que son las que trazan las propias partículas del fluido en movimiento. Al colisionar dos partículas, las soluciones se encuentran ante el conflicto de tomar dos valores distintos, generando una discontinuidad, del mismo modo que el tubo de una ola, antes de romperse, se enrolla sobre sí mismo en una configuración aparentemente imposible.

Tal y como hemos señalado, uno de los elementos clave en el desarro-

el material de laboratorio en cuanto lo necesite



SUMINISTRO URGENTE AL LABORATORIO
94 472 17 45

- » Instrumentación analítica WATERS:
UPLC, HPLC, HPLC-MS, GC-MS, MS-Alta Resolución,
Aplicaciones Clínicas, Seguridad Alimentaria,
Industria Farmacéutica
- » Instrumentación Auxiliar
- » Reactivos y productos químicos
- » Material de vidrio y plástico
- » Mobiliario de laboratorio
- » Reparaciones

llo de la metodología que acabamos de presentar es la utilización de esquemas numéricos eficaces para la aproximación de las soluciones puesto que éstas rara vez pueden ser obtenidas de forma explícita. En el marco de la ecuación de Burgers, en ausencia de viscosidad, los esquemas más habituales son de la forma,

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \lambda (g_{j+1/2}^n - g_{j-1/2}^n) = 0, \quad \lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (4.1)$$

donde, $g_{j+1/2}^n = g(u_j^n, u_{j+1}^n)$, siendo g el flujo numérico¹³ que ha de satisfacer la relación de consistencia $g(u, u) = u^2/2$. Esta condición de consistencia garantiza que el esquema numérico es, efectivamente, una aproximación de la ecuación de fluidos en consideración, en este caso la ecuación de Burgers.

Se trata de esquemas en diferencias finitas de tres puntos que proporcionan, a través del valor de la función discreta u_j^n , una aproximación de la solución u en los puntos $(j\Delta x, n\Delta t)$, donde Δx ; y Δt son los pasos del mallado en la dirección espacial x y temporal t , respectivamente. Tal y como hemos mencionado anteriormente e ilustrado en la Figura 3, en la práctica, los mallados considerados han de ser irregulares para adaptarse a la compleja geometría de las aeronaves, aunque el análisis numérico muchas veces se restringe, en una primera etapa, a los mallados cartesianos regulares (gráfica de la derecha de la Figura 3) en los que la bondad de los esquemas de discretización empleados puede verificarse con mayor facilidad.

Existen muchos esquemas numéricos que satisfacen estas condiciones de consistencia (Lax-Friedrichs, Engquist-Osher, Godunov, Roe, etc.) y se distinguen, en particular, por tener una eficacia muy distinta cuando se trata de aproximar soluciones que presentan choques.

Frecuentemente, los esquemas más eficaces, como el de Godunov y Roe, no son diferenciables, al involucrar una función de flujo g que no lo es,¹⁴ lo cual impide la aplicación de los métodos de descenso basados en el gradiente del funcional, tal y como los hemos presentado. En efecto, la posible presencia de discontinuidades o choques en las soluciones hace que los esquemas tengan que ser sensibles al direccionamiento del flujo e incluso a su amplitud. Esto hace que todo buen esquema haya de incorporar limitadores, términos que se activan sólo en determinadas circunstancias en función del valor de ciertos sensores que miden, en particular, la inminencia de los posibles choques. De este

modo, los esquemas dejan de ser suaves en el paso de un nodo a otro y el formalismo de linealización anterior deja de ser válido. Este problema es inevitable, pues los esquemas suaves, para capturar los choques de las soluciones, necesitan unos mallados tan finos que en la práctica suponen un coste computacional excesivo y no pueden ser utilizados. Esto conduce a un difícil dilema: necesitamos esquemas que resuelvan bien los posibles choques que se presentan en el fluido, pero esto nos obliga a utilizar esquemas numéricos que no son diferenciables, lo cual dificulta considerablemente el empleo de los métodos de descenso. Se trata éste de un tema de gran importancia, que se acrecienta en problemas más complejos derivados de las aplicaciones a la aeronáutica que describimos y que son objeto aún de investigaciones exhaustivas.

Inestabilidades

Una vez de haber desarrollado el programa matemático expuesto y el algoritmo de descenso en alguno de los lenguajes de programación más avanzados, pondremos el programa en marcha en el ordenador (normalmente un superordenador o granja de ordenadores para simulaciones de características realistas) a la espera de obtener un diseño algo mejor que el que teníamos anteriormente, tal y como se ilustra a la izquierda de la Figura 5. En la tabla comparativa del centro de dicha gráfica mostramos experimentos numéricos realizados en la ecuación de Burgers sin viscosidad en presencia de choques. Constatamos cómo los diferentes métodos empleados, que se diferencian esencialmente en el esquema numérico utilizado para discretizar la ecuación y el modo en que se tiene en cuenta la presencia de choques en la solución, evolucionan en función del número de iteraciones del algoritmo gradiente. Algunos de ellos descienden de manera muy lenta, lo cual, en la práctica, supone la no convergencia del método, pues en las aplicaciones reales, el número de iteraciones que se puede realizar, debido a su gran coste computacional, es muy pequeño. El algoritmo que presenta un mejor rendimiento, llegando en cuatro iteraciones a un valor mucho menor de lo que los demás métodos son capaces de alcanzar en 30, ha sido diseñado en el seno del proyecto DOMINO.

Pero no hay que excluir que nos encontremos, de manera inesperada y contrariamente a nuestras expectativas, con resultados un tanto desconcertantes. En efecto, es frecuente que cuando, al cabo de un gran número de iteraciones y de haber consumido el tiempo computacional disponible, paramos un algoritmo, observar un resultado fuertemente ➔

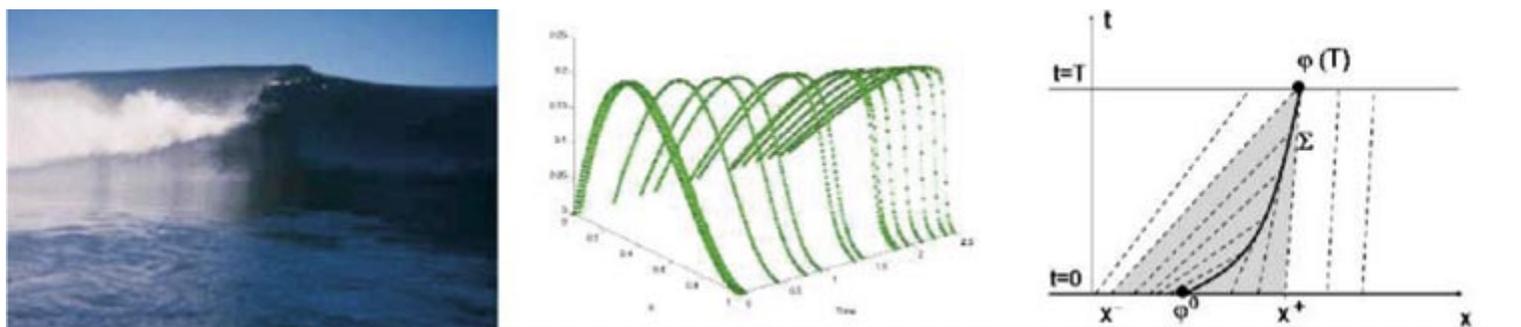


Figura 4: Izquierda: Imagen de una ola que en su lado izquierdo ya se ha roto y que en el otro está a punto de hacerlo. Centro: evolución de un frente solución de la ecuación de Burgers sin viscosidad que, de izquierda a derecha, se observa cómo desarrolla un choque. Derecha: rectas características que colisionan describiendo una curva sobre la que se propaga un choque.

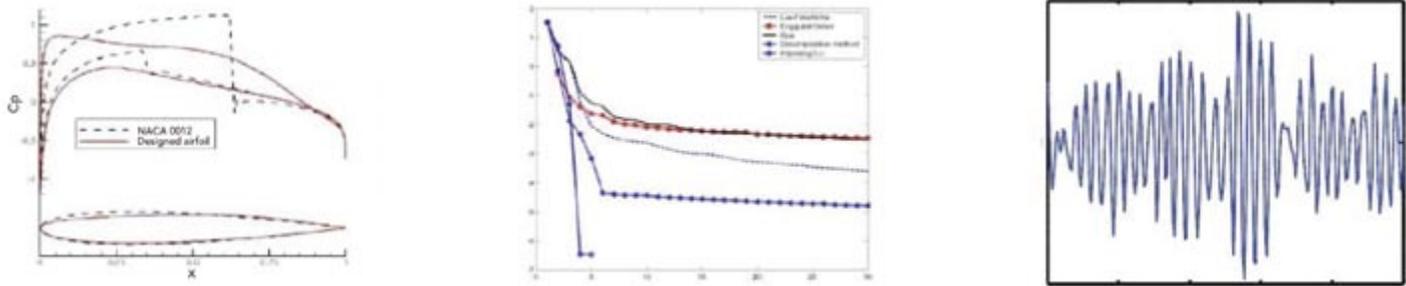


Figura 5: Izquierda: evolución del coeficiente de presiones C_p a lo largo de la superficie del ala, al pasar de la geometría inicial (en negro) a la nueva (en rojo) tras un proceso de optimización. Centro: rendimiento de los diversos métodos de descenso aplicados a la ecuación de Burgers mediante diferentes esquemas de discretización y diferenciando, sobre todo, el tratamiento de los choques. Derecha: inestabilidades numéricas.

oscilante como el ilustrado en la derecha de la Figura 5, que resulta a todas luces inutilizable, puesto que una deformación de este tipo de la forma de un vehículo es irrealizable y contraria al propio sentido común. Estamos frente a una falsa solución, espúrea, producida por el método numérico, un fantasma numérico, y no la que corresponde al problema real original planteado. Es una situación producida por la acumulación de errores numéricos en los que vamos incurriendo en cada paso del complejo proceso de optimización y que acaban corrompiendo completamente los resultados numéricos finales. Es una manifestación de haber violado la condición de estabilidad que, junto con la de consistencia antes mencionada, según el Teorema de Peter Lax (Premio Abel 2005), garantiza la convergencia de un método numérico. Esta inestabilidad es la que produce este tipo de resultado altamente oscilante, de alta frecuencia y gran amplitud.

Es por eso que los algoritmos iterativos de tipo gradiente que hemos descrito han de ser suplementados con frecuencia con técnicas de filtrado y/o regularización de las altas frecuencias espúreas, lo cual se realiza con frecuencia mediante la utilización de varios mallas simultáneos, del mismo modo que las obras de arte necesitan de un acabado o pulido final antes de considerarse terminadas.

Conclusiones: algunos retos

En este artículo hemos descrito los ingredientes principales de los métodos matemáticos de diseño óptimo de formas, centrándonos en la aeronáutica. Como hemos visto, son muy diversos los elementos que intervienen en el desarrollo de una metodología global y sistemática y en la que las matemáticas juegan un papel central, en coordinación con otras disciplinas y muy en particular con la computación. El programa que hemos descrito está fuertemente inspirado en las ideas de algunos de los clásicos como Euler y Newton, pero utiliza los desarrollos más actuales y avanzados de muy diversos ámbitos de las matemáticas. Hemos mencionado las dificultades que surgen en su implementación y algunos problemas abiertos a los que esto conduce, que son de profundo calado matemático. En esta última sección realizamos un breve resumen de las principales problemas abiertos que se plantean en éste área, no sin antes recordar que la metodología descrita tiene un carácter universal por su amplio e importante espectro de aplicaciones al que aludíamos al inicio de este artículo, más allá de los propios de la aeronáutica. Entre los problemas más relevantes que quedan por resol-

ver en este campo cabe mencionar:

- Regularidad y unicidad de las soluciones de las ecuaciones de los fluidos en tres dimensiones espaciales.
- Desarrollo de métodos de identificación de choques y singularidades, lo cual requerirá el empleo y desarrollo de técnicas propias del tratamiento de imágenes y cual de la geometría computacional.
- Análisis de la sensibilidad de los funcionales de coste habituales con respecto a las singularidades del fluido.
- Métodos eficaces para resolver numéricamente las ecuaciones adjuntas que, aunque tengan un aspecto semejante a los modelos clásicos de la Mecánica de Fluidos, poseen soluciones con características muy distintas a las ecuaciones de estado que no son fáciles de capturar.
- Desarrollo de nuevos métodos de minimización que trasciendan los métodos gradiente habituales, puesto que estos últimos permiten mejorar los diseños ya existentes pero no dar con otros más innovadores.
- Desarrollo de métodos de filtrado y regularización de las oscilaciones espúreas que funcionen de manera sistemática y de modo que el calibrado de los parámetros relevantes pueda automatizarse.

Todos estos problemas técnicos se enmarcan en un esfuerzo colectivo, que necesita un abordaje multidisciplinar, y que tiene como objetivo último el desarrollo de métodos computacionales integrados en los que los procesos de simulación del fluido y la optimización se realicen en paralelo, proporcionando herramientas de diseño que puedan ser usados de manera intuitiva, creativa, versátil y en tiempo real en entornos avanzados de diseño, dotados de las más modernas tecnologías, en particular, de realidad virtual. ■

10 En efecto, del mismo modo que la derivada de una función discontinua como la función H de Heaviside ($H = 0, x < 0; H = 1, x > 0$) tiene como derivada la delta de Dirac δ_0 (medida singular que concentra una masa unidad en un sólo punto, $x = 0$), al linealizar una EDP en torno a una solución que presenta discontinuidades, se producen términos singulares soportados en el lugar geométrico de los choques.

11 Lo cual corresponde a justificar la inversión el operador $A(\Omega)$ al que antes aludíamos para obtener la expresión $\mathbf{u}(\Omega) = (A(\Omega))^{-1}(\mathbf{b}(\Omega))$ para los fluidos tridimensionales.

12 En este caso utilizamos la notación \underline{u} en lugar de u con el objeto de subrayar que se trata de una función escalar que representa, por ejemplo, la altura de una ola en un canal unidimensional.

13 El flujo numérico tiene como objeto simular en el modelo computacional la cantidad de fluido que entra y sale por los extremos del intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, siendo $x_i = j\Delta x$ los nodos del malla espacial.

14 lo mismo que ocurre con la función valor absoluto $|x| = x$, si $x \geq 0$ y $|x| = -x$, si $x \leq 0$, que no es diferenciable en el punto $x = 0$ en el que la gráfica de la función presenta dos pendientes distintas ± 1 , a ambos lados.